

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

José Manoel Ferreira Gonçalves

MODELAGEM DA QUALIDADE DO AR: REVISÃO DE MODELOS E PROPOSTA PARA A CONSIDERAÇÃO DO EFEITO DA MOVIMENTAÇÃO DE FONTES MÓVEIS

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como requisito parcial à obtenção do título de *Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica*

Área de Concentração: Dinâmica de Fluidos e Máquinas de Fluxo

Orientador: Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Eiger

Itajubá, outubro de 2003

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

José Manoel Ferreira Gonçalves

MODELAGEM DA QUALIDADE DO AR: REVISÃO DE MODELOS E PROPOSTA PARA A CONSIDERAÇÃO DO EFEITO DA MOVIMENTAÇÃO DE FONTES MÓVEIS

Banca Examinadora: Prof. Dr. Celso Volpe
Prof. Dr. Rogério José da Silva
Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho
Prof. Dr. Sérgio Eiger

Itajubá, outubro de 2003

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Mauá –
Bibliotecária Margareth Ribeiro- CRB_6/1700

G635m

Gonçalves, José Manoel Ferreira

Modelagem de qualidade do ar : revisão de modelos e proposta para a consideração do efeito da movimentação de fontes móveis / por José Manoel Ferreira Gonçalves ; orientado por Sérgio Eiger e co-orientado por Nelson Manzanares Filho. -- Itajubá, (MG) : UNIFEI, 2003.

114 p. il.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Itajubá.

1. Poluição do ar. 2. Modelos de qualidade do ar. 3. Fontes móveis.
I. Eiger, Sérgio, orient. II. Manzanares Filho, Nelson, co-orient. III. Universidade Federal de Itajubá. IV. Título.

CDU 504.054(043)

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho ao meu pai,
José Baptista Gonçalves (*in memoriam*)

AGRADECIMENTOS

A elaboração deste trabalho contou com apoios e participações, científicas ou não, de muitos amigos e colaboradores, aos quais quero expressar a minha gratidão e reconhecimento.

Em particular, quero expressar um agradecimento especial ao Prof. Dr. Sérgio Eiger, amigo de várias décadas, orientador deste trabalho e grande incentivador científico desta minha empreitada.

Também ao Prof. Dr. Nelson Manzanares Filho, quero expressar minha gratidão por sua participação na orientação deste trabalho.

Finalmente, quero registrar o meu reconhecimento pelas intervenções precisas e amigáveis do Prof. Dr. Celso Volpe, desde o início, e do Prof. Dr. Rogério José da Silva, mais recentemente.

Gostaria ainda de agradecer à minha mãe, meus filhos e Deborah, pelo apoio recebido.

SUMÁRIO

DEDICATÓRIA	I
AGRADECIMENTOS	II
SUMÁRIO	III
RESUMO	V
ABSTRACT	VI
LISTA DE FIGURAS	VII
LISTA DE TABELAS	VIII
LISTA DE SÍMBOLOS	IX
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS	1
1.2 OBJETIVOS	2
1.3 JUSTIFICATIVA	3
1.4 LIMITAÇÕES	4
1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO	5
2 CONCEITOS FÍSICOS BÁSICOS	7
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DE MODELOS DE SIMULAÇÃO DA QUALIDADE DO AR.....	13
4 O MODELO DE PLUMA GAUSSIANA	20
4.1 APRESENTAÇÃO DO MODELO	20
4.2 CLASSES DE ESTABILIDADE ATMOSFÉRICA	22
4.3 PARÂMETROS DE DISPERSÃO	23
4.3.1 Segundo Pasquill-Gifford	23
4.3.2 Segundo Briggs	26
5 FERRAMENTAL MATEMÁTICO	30
5.1 FUNÇÃO DELTA DE DIRAC	30
5.2 CURVA DE GAUSS	31
5.3 FUNÇÃO ERRO	32
5.4 SÉRIE DE TAYLOR	33
5.5 TRANSFORMADA COMPLEXA DE FOURIER E SUA INVERSA	34
5.6 INTEGRAIS RELEVANTES	37
5.7 MÉTODO DAS IMAGENS	37
6 EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ADVECTIVA	40
6.1 FLUXOS	40
6.1.1 Fluxo Advectivo de Massa de um Constituinte	40
6.1.2 Fluxo Difusivo de Massa de um Constituinte	41
6.2 EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO DA MASSA DE UM CONSTITUINTE	43
7 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ADVECTIVA PARA ESPAÇO INFINITO	50
7.1 DEDUÇÃO DA SOLUÇÃO	50
7.2 EXEMPLOS DE APLICAÇÃO	59
7.2.1 Aplicação Pontual Instantânea de uma Massa M em uma Região Inicialmente Apresentando Concentração Nula	59
7.2.2 Aplicação Pontual de Massa Segundo uma Taxa Temporal Constante Q em uma Região Inicialmente Apresentando Concentração Nula	61
7.2.2.1 Solução Geral Para o Espaço Infinito com Emissão em $z = H$	61
7.2.2.2 Solução Para $U = 0$	63
7.2.2.3 Solução Para Regime Permanente	63
7.2.2.4 Solução Para Pontos Próximos do Eixo da Pluma – Pluma Gaussiana	65
7.2.2.5 Estimativa do Erro da Solução Gaussiana Para Pontos Próximos do Eixo da Pluma	68
7.2.2.6 Solução Para o Espaço Semi-Infinito com $z \geq 0$	70

7.2.2.7	Estimativa dos Coeficientes de Dispersão K_y e K_z	71
7.2.2.8	Estimativa do Coeficiente de Dispersão K_x	79
8	APLICAÇÃO PONTUAL DE MASSA ORIUNDA DE UMA FONTE MÓVEL SEGUNDO UMA TAXA TEMPORAL DE EMISSÃO CONSTANTE Q	80
8.1	SOLUÇÃO PARA O ESPAÇO INFINITO.....	80
8.2	CASOS PARTICULARES.....	84
8.2.1	<i>Solução para $u_f = 0$</i>	84
8.2.2	<i>Solução para $U = 0$ e $u_f \neq 0$</i>	84
8.3	SOLUÇÃO PARA O ESPAÇO SEMI-INFINITO COM $z \geq 0$	85
8.3.1	<i>Caso Particular: Emissão Efetuada no Nível do Solo</i>	85
8.3.2	<i>Estudo de Caso – Avaliação Numérica</i>	86
9	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	91
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	96

RESUMO

O principal objetivo desta pesquisa foi a obtenção de um modelo matemático analítico de simulação da poluição atmosférica gerada por uma fonte pontual móvel de velocidade constante. O poluente emitido considerado é passivo e conservativo.

A idéia de se obter tal solução surgiu, em parte, pelo fato de não ter sido encontrado na literatura um modelo matemático apresentando esta capacitação.

A obtenção deste modelo foi efetuada passo a passo, iniciando-se pela obtenção da equação de difusão advectiva, ou equação de transporte de massa, para o caso particular de velocidade constante e difusão turbulenta homogênea e anisotrópica.

Em seguida foi obtida uma solução geral da equação de transporte para o caso de um termo fonte/sumidouro genérico. Esta solução foi obtida empregando-se o método da Transformada Complexa de Fourier, conforme detalhadamente apresentado no presente texto.

A solução geral obtida foi confrontada com vários casos encontrados na literatura, como, por exemplo, aqueles relacionados a emissão de poluentes por fontes pontuais estacionárias em regime permanente ou transiente e o denominado modelo da pluma gaussiana. As soluções encontradas neste trabalho coincidem com as soluções anteriormente publicadas.

A solução para o caso de fonte pontual móvel, com velocidade constante, foi posteriormente obtida pela aplicação da solução geral, considerando de forma adequada o termo fonte/sumidouro para esta situação. Algumas propriedades desta solução foram apresentadas.

ABSTRACT

The main purpose of this research was to achieve an analytical mathematical model to simulate the atmospheric pollution caused by a non-stationary pollution point source moving at constant speed. The pollutant considered is passive and conservative.

The effort to find such a solution was partly due to the fact that a literature review was not able to find a mathematical model presenting this capability.

The derivation of this model is presented step by step, beginning with the derivation of the advective-diffusion equation, or the mass transport equation, for the particular case of constant velocity and homogeneous and anisotropic turbulent diffusion.

Then, a general solution for this equation was achieved, considering a generic source/sink term. This was obtained with the use of the Complex Fourier Transform, as presented in detail here.

This general solution was then compared by applying it to cases found in the literature, as the emission from stationary point sources in steady and unsteady flow and the so called gaussian plume model. Those solutions were recovered from the general solution obtained here.

By considering the appropriate source sink/term for the situation of a point source moving at constant speed, the corresponding solution was finally obtained. Then, some properties of this solution were presented.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 – EXEMPLO DE REVERSÃO DE VELOCIDADE HORIZONTAL (FISCHER ET AL, 1979).....	11
FIGURA 4.1 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA PLUMA GAUSSIANA.....	21
FIGURA 4.2 - S_y SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ÁREAS RURAIS, PARA.....	27
FIGURA 4.3 - S_z SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ÁREAS RURAIS, PARA.....	28
FIGURA 4.4 - S_y SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ÁREAS URBANAS, PARA.....	29
FIGURA 4.5 - S_z SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ÁREAS URBANAS, PARA.....	29
FIGURA 5.1 – REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DA FUNÇÃO DELTA DE DIRAC.	30
FIGURA 5.2 – ILUSTRAÇÃO DE DUAS CURVAS DE GAUSS COM MÉDIAS IGUAIS A 1 E DESVIOS-PADRÃO.....	32
FIGURA 5.3 – GRÁFICOS DA FUNÇÕES ERRO - $ERF(x)$ E ERRO COMPLEMENTAR – $ERFC(x)$	33
FIGURA 5.4 – ILUSTRAÇÃO DE APLICAÇÃO DO MÉTODO DAS IMAGENS.....	38
FIGURA 6.1 – REPRESENTAÇÃO DAS VARIÁVEIS QUE DEFINEM O FLUXO ADVECTIVO DE MASSA.....	41
FIGURA 6.2 – REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DO FLUXO DIFUSIVO EM UMA DIMENSÃO.....	42
FIGURA 6.3 – FLUXOS ADVECTIVOS ATRAVÉS DAS FACES DE UM VOLUME DE CONTROLE.....	44
FIGURA 6.4 – FLUXOS DIFUSIVOS ATRAVÉS DAS FACES DE UM VOLUME DE CONTROLE.....	44
FIGURA 7.1 – COMPORTAMENTO DA RELAÇÃO C_{Teor} / C_{Gauss} EM FUNÇÃO DE r / x PARA DIFERENTES VALORES DO NÚMERO DE PÉCLÉT Pe	69
FIGURA 7.2 - K_y / U SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ESTIMAR S_y PARA ÁREAS RURAIS,	72
FIGURA 7.3 - K_z / U SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ESTIMAR S_z PARA ÁREAS RURAIS,	73
FIGURA 7.4 – COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES DE K_y / U E K_z / U PARA ÁREAS RURAIS.....	74
FIGURA 7.5 – COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES DE K_y / U E K_z / U PARA ÁREAS RURAIS.....	75
FIGURA 7.6 - K_y / U SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ESTIMAR S_y PARA ÁREAS URBANAS,	76
FIGURA 7.7 - K_z / U SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ESTIMAR S_z PARA ÁREAS URBANAS,	77
FIGURA 7.8 – COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES DE K_y / U E K_z / U PARA ÁREAS URBANAS.....	78
FIGURA 8.1 – PERFIS LONGITUDINAIS DE CONCENTRAÇÃO PARA INSTANTES DISTINTOS EMPREGANDO-SE OS DADOS DA TABELA 8.1, $U = 0$ E $U_F = 10$ M/S.	87
FIGURA 8.2 – PERFIS LONGITUDINAIS DE CONCENTRAÇÃO PARA INSTANTES DISTINTOS EMPREGANDO-SE OS DADOS DA TABELA 8.1 E $U = U_F = 10$ M/S.....	88
FIGURA 8.3 – PERFIS LONGITUDINAIS DE CONCENTRAÇÃO PARA INSTANTES DISTINTOS EMPREGANDO-SE OS DADOS DA TABELA 8.1, $U = 20$ M/S E $U_F = 10$ M/S.....	89
FIGURA 8.4 – CONCENTRAÇÃO MÁXIMA EM FUNÇÃO DA VELOCIDADE DO VENTO EMPREGANDO-SE OS DADOS DA TABELA 8.1 E $U_F = 10$ M/S.	90

LISTA DE TABELAS

TABELA 4.1 – CATEGORIAS DE ESTABILIDADE DE PASQUILL-GIFFORD.....	23
TABELA 4.2 - PARÂMETROS C E D PARA ESTIMAR S_y SEGUNDO O MÉTODO.....	24
TABELA 4.3 - PARÂMETROS A E B PARA ESTIMAR S_z SEGUNDO O MÉTODO DE PASQUILL-GIFFORD PARA ÁREAS RURAIS.....	25
TABELA 4.4 - S_y SEGUNDO O MÉTODO DE PASQUILL-GIFFORD PARA ÁREAS URBANAS.....	26
TABELA 4.5 - S_z SEGUNDO O MÉTODO DE PASQUILL-GIFFORD PARA ÁREAS URBANAS.....	26
TABELA 4.6 - S_y E S_z SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ÁREAS RURAIS.....	26
TABELA 4.7 - S_y E S_z SEGUNDO O MÉTODO DE BRIGGS PARA ÁREAS URBANAS.....	28
TABELA 8.1 – DADOS ADOTADOS PARA AS SIMULAÇÕES DO ESTUDO DE CASO.....	86

LISTA DE SÍMBOLOS

a – variável auxiliar

a_c – variável auxiliar

a_f – variável auxiliar

b – variável auxiliar

b_c – variável auxiliar

b_f – variável auxiliar

c – constante do modelo de Pasquill-Gifford

C – concentração - $[M/L^3]$

\bar{C} - transformada infinita de Fourier de C com relação a x

$\overline{\bar{C}}$ - transformada infinita de Fourier de \bar{C} com relação a y

$\overline{\overline{\bar{C}}}$ - transformada infinita de Fourier de $\overline{\bar{C}}$ com relação a z

C_{Gauss} – solução dada pelo modelo da pluma gaussiana adotado na prática - $[M/L^3]$

C_R – concentração dada pela solução para espaço infinito - $[M/L^3]$

C_{Teor} – solução obtida teoricamente, de onde aproximadamente se obtém C_{Gauss} - $[M/L^3]$

C_V – solução imagem para ser usada no método das imagens - $[M/L^3]$

d - constante do modelo de Pasquill-Gifford

dA – variação infinitesimal de área - $[L^2]$

dm – variação infinitesimal de massa - $[M]$

dt – variação infinitesimal de tempo - $[T]$

dx – variação infinitesimal de distancia na direção x - $[L]$

dy – variação infinitesimal de distancia na direção y - $[L]$

dz – variação infinitesimal de distancia na direção z - $[L]$

$\left. \frac{d^n f}{dx^n} \right|_x$ - n -ésima derivada total de $f(x)$ com relação a x , aplicada no ponto x

D – coeficiente de difusão molecular - $[L^2/T]$

$erf(x)$ – função erro do argumento x

$erfc(x)$ – função erro complementar do argumento x

$exp(x)$ – função exponencial do argumento x

$f(x)$ – função genérica de x

$f_X(x)$ – função densidade de probabilidade da variável aleatória X aplicada no ponto x

$\bar{f}(\mathbf{b})$ - transformada infinita de Fourier de $f(x)$

$F(x,y,z)$ – condição inicial de concentração em x , y e z - $[M/L^3]$

$\bar{\bar{F}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$ - transformada infinita de Fourier de $F(x,y,z)$

$G(x,y,z,t)$ – termo fonte/sumidouro genérico – $[M/L^3T]$

$\bar{\bar{G}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, t)$ - transformada infinita de Fourier de $G(x,y,z,t)$

h – altura geométrica da fonte emissora com relação ao solo – $[L]$

H – altura efetiva de emissão de um poluente com relação ao solo - $[L]$

$i = \sqrt{-1}$ - unidade imaginária

$J_{a,x}$ – fluxo advectivo de poluente da direção x – $[M/L^2T]$

$J_{d,x}$ – fluxo difusivo de poluente da direção x – $[M/L^2T]$

K – coeficiente genérico de dispersão – $[L^2/T]$

K_x – coeficiente de dispersão na direção x – $[L^2/T]$

K_y – coeficiente de dispersão na direção y – $[L^2/T]$

K_z – coeficiente de dispersão na direção z – $[L^2/T]$

M – massa de poluente injetada instantaneamente – $[M]$

Pe – número de Péclet - adimensional

Q – vazão mássica de poluente - $[M/T]$

r – variável auxiliar - $[L]$

t – tempo - $[T]$

u_f – velocidade da fonte móvel de poluição na direção x - $[L/T]$

U – velocidade do ar na direção x - $[L/T]$

V – velocidade do ar na direção y - $[L/T]$

W – velocidade do ar na direção z - $[L/T]$

x – coordenada longitudinal - $[L]$

x_f – coordenada longitudinal da fonte móvel - $[L]$

x' - variável de integração da transformada complexa de Fourier na direção x

x_0 – ponto de aplicação da função Delta de Dirac na direção x - $[L]$

X – variável aleatória

y – coordenada transversal horizontal em relação ao escoamento do ar - $[L]$

y' - variável de integração da transformada complexa de Fourier na direção y

z - coordenada transversal vertical em relação ao escoamento do ar - $[L]$

z' - variável de integração da transformada complexa de Fourier na direção z

\mathbf{a} - ângulo

\mathbf{b} - parâmetro da transformada complexa de Fourier

\mathbf{b}_1 - parâmetro da transformada complexa de Fourier na direção x

\mathbf{b}_2 - parâmetro da transformada complexa de Fourier na direção y

\mathbf{b}_3 - parâmetro da transformada complexa de Fourier na direção z

$\mathbf{d}(x - x_0)$ - função delta de Dirac aplicada no ponto $x = x_0$ - $[L^{-1}]$

$\mathbf{d}(t)$ - função delta de Dirac aplicada no instante $t = 0$ - $[T^{-1}]$

$\mathbf{D}x$ - incremento finito na coordenada x - $[L]$

$\mathbf{D}y$ - incremento finito na coordenada y - $[L]$

$\mathbf{D}z$ - incremento finito na coordenada z - $[L]$

$\left. \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \right|_x$ - n -ésima derivada parcial de $f(x, y, z, t)$ com relação a x , aplicada no ponto x

$\left. \frac{\partial^n f}{\partial y^n} \right|_y$ - n -ésima derivada parcial de $f(x, y, z, t)$ com relação a y , aplicada no ponto y

$\left. \frac{\partial^n f}{\partial z^n} \right|_z$ - n -ésima derivada parcial de $f(x, y, z, t)$ com relação a z , aplicada no ponto z

\mathbf{m} - valor esperado de uma variável aleatória

$\mathbf{p} = 3,14159\dots\dots$

\mathbf{s} - desvio-padrão de uma variável aleatória

\mathbf{s}_y - desvio padrão de uma pluma de poluição ao longo da direção y - $[L]$

\mathbf{s}_z - desvio padrão de uma pluma de poluição ao longo da direção z - $[L]$

\mathbf{q} - variável auxiliar de integração - $[T]$

1 INTRODUÇÃO

1.1 Considerações Iniciais

O problema da poluição atmosférica tem afligido setores da sociedade e ecossistemas por um longo período de tempo. Eventos naturais, como queimadas, grandes erupções vulcânicas, e mesmo a queda de grandes meteoros no nosso planeta têm mostrado como o meio atmosférico pode ser significativamente atingido, mudando mesmo o curso da História Natural através da extinção de espécies. Talvez o *homo sapiens* esteja presente neste momento devido a um desses eventos, que culminou com a extinção dos dinossauros e que permitiu que os mamíferos prosperassem.

Embora seja impossível afirmar que o mundo esteja livre de outras catástrofes naturais futuras, a prosperidade do *homo sapiens* tem trazido vários danos ao meio ambiente, que, talvez, ele já possa ser chamado de *homo poluidoris*, se é que este termo existe em latim.

A sociedade humana viveu durante muitos séculos com uma população mundial razoavelmente estável em termos numéricos. Foi quando escapou de algumas restrições ambientais graças a sua engenhosidade tecnológica, através do aperfeiçoamento da medicina, da saúde pública e a revolução industrial. A partir daí, um novo paradigma de sucesso foi colocado para as sociedades humanas, que tem apresentado características demográficas típicas de espécies em desequilíbrio com o meio ambiente e, de posse de novas tecnologias, tem injetado no meio ambiente substâncias em excesso para a obtenção e sustentação de um meio saudável para a saúde pública e para o meio ambiente.

É difícil prognosticar o que vai acontecer no futuro, porém, de qualquer forma, é necessário ter em mãos ferramentas que auxiliem na avaliação de impactos ambientais para que se possa mitigar ou otimizar sistemas de produção altamente inseridos na vida humana e que trazem danos à sociedade em geral.

Um desses grandes problemas refere-se à poluição do meio ambiente, considerando-se a litosfera, hidrosfera e atmosfera. Poluentes são transportados nesses segmentos ambientais, e

através deles, atingindo vastos setores sociais que pagam um preço imposto e indesejado pela idéia de aumento da produção como o único e duvidoso caminho a ser seguido.

Felizmente, vários setores da sociedade tem-se levantado contra certos exageros e têm buscado alternativas para diminuir os danos ao meio que nos sustenta. A validação da diminuição desses danos tem que ser estimada de alguma forma para que seja possível uma hierarquização das diversas alternativas que podem ser apresentadas para a mitigação de uma determinada situação.

Infelizmente, a complexidade de todas as variáveis (aquelas que são reconhecidas) que atuam em um sistema ambiental envolve as complexidades de variáveis científicas, tecnológicas, econômicas, sociais, etc, as quais imprimem um caráter de grande complexidade aos problemas típicos. Sistemas complexos tem sido bastante estudados e, comumente, apresentam características de bifurcação, ou seja, de mudanças bruscas de comportamento, as quais são, em geral, imprevisíveis. Nesse ponto, sempre que possível, a modelagem matemática de determinados fenômenos pode ser muito valiosa para os estudiosos, cientistas e tomadores de decisão.

Infelizmente, quando se fala em modelagem matemática, é comum pensar-se em equações complexas, dificuldades de interpretação, dificuldades de comunicação, e assim por diante. Todavia, entre os estudiosos do assunto, não há quaisquer dúvidas que a modelagem matemática é aquela parte do processo de avaliação de impactos onde a grande maioria dos especialistas em outras áreas perdem o poder de decisão e de compreensão por falta de familiaridade com o assunto. É realmente lamentável que a modelagem matemática tenha, por vezes, se transformado em alguns casos, mais no impedimento de uma discussão profícua, do que em um meio para a compreensão de um problema.

1.2 Objetivos

O presente trabalho lida com um problema de modelagem matemática. Especificamente lida com a modelagem da poluição gerada por fontes móveis, basicamente veículos, os quais ainda não tem sido abordados de maneira mais racional segundo a bibliografia consultada relativa a modelos de simulação presentemente disponíveis.

De uma forma sucinta, de acordo com a bibliografia consultada acerca de modelos matemáticos de simulação da poluição do ar, verifica-se que todos eles consideram os impactos produzidos por fontes estacionárias de poluição atmosférica, tais como chaminés. Todavia, veículos não se comportam da mesma forma, uma vez que a taxa de emissão de poluentes depende da velocidade destes.

Dentro deste contexto, a proposta deste trabalho pode ser desmembrada em vários etapas, conforme pode ser verificado a seguir:

- Compreensão física de fenômeno do transporte de poluentes na atmosfera, considerando somente os efeitos da advecção e da difusão turbulenta, ou seja, poluentes conservativos;
- Estabelecimento das equações que regem este fenômeno para substâncias conservativas;
- Familiarização com as ferramentas matemáticas que possibilitam a resolução deste problema e de outros problemas que possam vir a ser estudados em etapas futuras, conforme apresentado adiante neste trabalho;
- Apresentação da solução de um problema no qual uma carga móvel de poluição gera um determinado nível de poluição no meio ambiente em função da sua velocidade de translação.

Como subproduto, apresenta-se também como essa poluição aumenta ao longo de tempo, sendo que os modelos disponíveis mais comuns lidam apenas com situações de regime permanente, ou seja, com situações nas quais os transientes já foram atingidos, sem haver qualquer preocupação sobre o tempo dispendido para atingir estas situações de equilíbrio.

1.3 Justificativa

A justificativa do presente trabalho decorre dos objetivos apresentados. Dado que a revisão bibliográfica efetuada sobre modelos de qualidade do ar não revelou nenhum modelo que considera o efeito da movimentação de uma fonte poluidora móvel sobre a poluição resultante, foi então feita uma investigação sobre como considerar este efeito. É bastante intuitivo perceber que a velocidade da fonte móvel de poluição gera efeitos distintos daqueles

produzidos por fontes estacionárias, de modo que esta influencia deve ser de alguma forma avaliada.

1.4 Limitações

O fenômeno da dispersão de poluentes no meio ambiente é altamente complexo e sua modelagem matemática, mesmo em níveis avançados, ainda está aquém do que ocorre na natureza. Isto deve principalmente à natureza turbulenta do fenômeno, a qual tem uma característica aleatória, devido à dificuldade em se prever o seu comportamento.

A modelagem matemática deste problema tem avançado na direção de se prever comportamentos médios de eventos de poluição atmosférica, os quais são muito dependentes das pouco previsíveis condições atmosféricas a curto prazo. Desse modo, as previsões procuram simular comportamentos médios em relação às flutuações turbulentas, mas pouco, ou nada se sabe sobre eventos extremos decorrentes destas flutuações.

Assim, pode-se dizer que a previsão de eventos críticos de poluição atmosférica ainda é assunto de pesquisa intensa, dentro de um certo nível de precisão. Todavia, existe a necessidade de se ter em mãos modelos úteis para o planejamento e para a gestão da qualidade do ar. Tais modelos apresentam distintos graus de representatividade, mas são considerados úteis para a comparação de alternativas de emissão e mesmo para análises de risco.

De acordo com essa filosofia o presente trabalho procura analisar modelos existentes e propor um modelo simplificado para considerar o efeito da movimentação de fontes móveis de poluição nas plumas poluidoras. Entre as simplificações mais importantes do modelo proposto pode-se citar as seguintes:

- Velocidade uniforme no espaço e no tempo, hipótese essa adotada pela grande maioria dos modelos matemáticos de qualidade do ar;
- Valores constantes, no espaço e no tempo, de coeficientes de dispersão.

Estas hipóteses foram adotadas para possibilitar a integração analítica da equação de transporte de massa. Os resultados obtidos, embora aproximados, são úteis para avaliar a importância da movimentação da fonte móvel nas concentrações decorrentes.

1.5 Estrutura do Trabalho

Procurou-se estruturar o trabalho de forma didática, apresentando-se uma seqüência de capítulos que foi seguida pelo autor durante o seu aprendizado e que, espera-se também, seja seguida pelos leitores deste texto.

No Capítulo 1 procura-se mostrar as principais motivações que levaram a adoção do presente tema de pesquisa.

No Capítulo 2 é exposto algumas das principais questões e dificuldades relativas à modelagem de dispersão de poluentes no meio ambiente.

No Capítulo 3 é efetuada uma revisão de modelos de qualidade do ar disponíveis gratuitamente para o meio técnico, mostrando-se que nenhum deles leva em conta a movimentação de fontes móveis nas concentrações resultantes.

No Capítulo 4 é apresentado o modelo de pluma gaussiana, modelo este que é a base da grande maioria dos modelos de qualidade do ar e que serve como referência para o presente trabalho.

No Capítulo 5 são introduzidos conceitos e ferramentas matemáticas que são utilizados neste trabalho para a obtenção de várias soluções que modelam a qualidade do ar para diversos tipos de emissões.

No Capítulo 6 é apresentada a dedução da equação de difusão advectiva, que representa a equação de transporte de massa em um meio fluido resultante da emissão de um poluente.

No Capítulo 7 desenvolve-se a solução da equação de difusão advectiva através da transformada complexa de Fourier para o espaço infinito, mostrando-se alguns exemplos de aplicação.

No Capítulo 8 a solução geral, de acordo com as hipóteses adotadas, de equação de difusão advectiva, é aplicada para o caso de fontes poluidoras móveis. Tal solução é analisada para casos particulares, de modo que tendências são obtidas dela. São obtidos alguns resultados que mostram características importantes do comportamento da pluma poluidora.

Finalmente, no Capítulo 9, são mostradas as conclusões deste trabalho e recomendações para trabalhos futuros que poderão frutificar a partir da pesquisa realizada.

2 CONCEITOS FÍSICOS BÁSICOS

Apresenta-se a seguir alguns conceitos fundamentais que relacionam a circulação atmosférica com a qualidade do ar. As definições apresentadas não pretendem ser rigorosas, mas sim servir para a apresentação de uma terminologia característica do assunto. Em alguns casos as definições dadas podem mesmo não estar de acordo com definições adotadas em outras áreas do conhecimento

Define-se (Eiger, 1991):

- **Constituinte:** é um indicador selecionado que descreve de alguma forma o estado da qualidade do meio em que ele se encontra. Outros nomes são por vezes utilizados como sinônimos, tais como poluente, substância, espécie e traçador, embora isto nem sempre seja correto do ponto de vista lingüístico. A determinação da distribuição espacial e temporal de constituintes é o objetivo principal da modelagem matemática da qualidade do ar. Os constituintes podem ser classificados como:
 - **Conservativo:** é o constituinte cuja distribuição espacial e temporal não é afetada por reações com outros constituintes ou com o meio fluido receptor. Tal distribuição é afetada somente por processos físicos de transporte. Um exemplo comumente aceito de constituinte conservativo, dentro de um certo nível de aproximação, é o monóxido de carbono.
 - **Não conservativo:** é o oposto de conservativo. Exemplos típicos são o ozônio e os óxidos de nitrogênio, cuja distribuição espacial e temporal pode ser afetada por outros processos além do transporte físico.
 - **Ativo:** é o constituinte cuja presença afeta as características hidrodinâmicas do escoamento. Exemplo típico de constituintes ativos na atmosfera é a temperatura, a qual pode alterar a distribuição espacial de densidade, alterando as características de turbulência e do próprio escoamento médio.

- Passivo: é o oposto de ativo, isto é, não afeta as características hidrodinâmicas do escoamento. Admite-se, por exemplo, que o monóxido de carbono seja um constituinte passivo.
- Concentração: é a forma usualmente adotada para se expressar a distribuição de um constituinte no espaço. Em seu sentido mais amplo a concentração reflete a quantidade de um constituinte existente em um dado volume de uma região no espaço, quando este volume torna-se infinitesimal. O volume desta região, embora infinitesimal, deve ser grande o suficiente para que seja razoável supor-se a existência de um meio contínuo que permita a definição de variáveis matematicamente contínuas. A concentração é usualmente definida como a quantidade de massa de um constituinte existente por unidade de volume, mas pode também expressar o conteúdo de energia térmica por unidade de volume (que é proporcional à temperatura) ou também o número de organismos existentes por unidade de volume. É importante enfatizar-se que embora o conceito de concentração seja simples, a sua quantificação em escoamentos turbulentos não o é.
- Advecção: é o nome dado ao transporte de um constituinte pelo campo de velocidades do meio fluido que o contém. É prática comum supor-se que a velocidade do constituinte seja igual à velocidade do fluido envolvente, embora isto não seja sempre correto. Isto é particularmente notável no caso do transporte de material particulado, que se precipita ao longo da direção vertical com uma velocidade diferente da do fluido.
- Convecção: embora em algumas áreas do conhecimento convecção seja sinônimo de advecção, é comum defini-la de uma forma alternativa. De acordo com Fischer et al (1979), convecção é o transporte vertical induzido por instabilidade hidrostática, ou seja, decorrente de gradientes verticais de densidade. Exemplos típicos são observados durante a formação de chuvas convectivas e em eventos de inversão térmica na atmosfera.
- Difusão Molecular: o movimento browniano, decorrente da agitação térmica das partículas de um fluido, promove o espalhamento das partículas dos constituintes

através de choques. Este processo faz com que exista um espalhamento do constituinte em um meio, mesmo que este meio apresente velocidade média nula. Se o constituinte e o fluido receptor possuírem a mesma densidade, existe a tendência de o constituinte espalhar-se por todo o meio envolvente após um tempo suficientemente longo. Este processo é denominado difusão molecular, sendo matematicamente representado pela Lei de Fick.

- **Difusão Turbulenta:** é um conceito análogo ao de difusão molecular mas com origem no movimento turbulento dos fluidos. A experiência demonstra que escoamentos turbulentos possuem um poder de espalhamento de constituintes muito mais intenso que aquele observado em escoamentos laminares análogos. É clássico o experimento efetuado por Reynolds, no qual foi utilizada como técnica de visualização da turbulência o espalhamento de um traçador para demonstrar diferenças fundamentais entre escoamentos laminares e turbulentos. A difusão turbulenta é causada por turbilhões dos mais variados tamanhos e orientações existentes no escoamento sendo, na realidade, um movimento advectivo com resultados de aparência difusiva. Como não existe ainda uma forma totalmente precisa de se quantificar o campo de velocidades instantâneas de um escoamento turbulento, encontrou-se no conceito de difusão turbulenta uma forma alternativa de se computar o efeito da turbulência nos escoamentos e no transporte de poluentes. Deve-se enfatizar, no entanto, que este conceito possui limitações e critérios específicos de aplicação, conforme detalhado mais adiante.
- **Advecção Diferenciada:** refere-se ao conceito descrito pela palavra “*shear*” na língua inglesa. Este conceito é relativo à ocorrência do fenômeno do cisalhamento, ou seja, quando camadas adjacentes de um fluido apresentam deslocamento relativo entre si. A advecção diferenciada desempenha um papel de importância fundamental no transporte de poluentes.
- **Dispersão:** é o nome dado ao efeito resultante da ação conjunta da difusão (molecular e/ou turbulenta) e da advecção diferenciada. É comum haver alguma confusão entre os conceitos de difusão e dispersão, embora sejam conceitos distintos, porque a dispersão apresenta um conceito análogo ao de difusão. O conceito de dispersão torna-se necessário quando se considera um fenômeno tridimensional de forma simplificada em

uma ou duas dimensões. Este conceito resulta como uma forma de considerar os efeitos das direções ao longo das quais foram adotadas simplificações na formulação matemática simplificada resultante.

Dentre os principais fatores que podem afetar a circulação atmosférica e o transporte de poluentes em sua camada próxima ao solo estão

- Geometria do meio
- Tensões de cisalhamento ao longo do contorno sólido no relevo e nas edificações
- Efeito do vento e sua variação na direção vertical
- Variações de densidade do meio receptor devido principalmente à variações de temperatura
- Efeitos locais de descargas de efluentes através da ação de jatos e plumas, os quais podem interferir na distribuição espacial de “momentum” e da energia térmica.

De forma mais ampla a circulação atmosférica pode ser simulada matematicamente através da solução numérica das equações diferenciais parciais que representam os princípios de conservação da massa e do momentum. Todavia, deve-se introduzir a influência da variações de densidade em basicamente dois termos da equação de conservação do momentum: o termo de gradiente de pressões e o termo de das tensões turbulentas. Conseqüentemente, o chamado módulo de circulação atmosférica, que resolve as duas equações anteriormente citadas, apresenta conexões com outros módulos que simulem variáveis que afetam a densidade do meio. Em particular, gradientes espaciais de temperatura podem produzir gradientes espaciais de densidade que, embora de pequena magnitude absoluta, são capazes de criar efeitos dominantes na circulação de meios estratificados. Fenômenos complexos observados nestes meios, tais como reversões do escoamento ao longo da direção vertical e trocas de massa, também na direção vertical, são bastante comuns, em decorrência da presença destes gradientes de densidade, conforme ilustrado pela Figura 2.1.

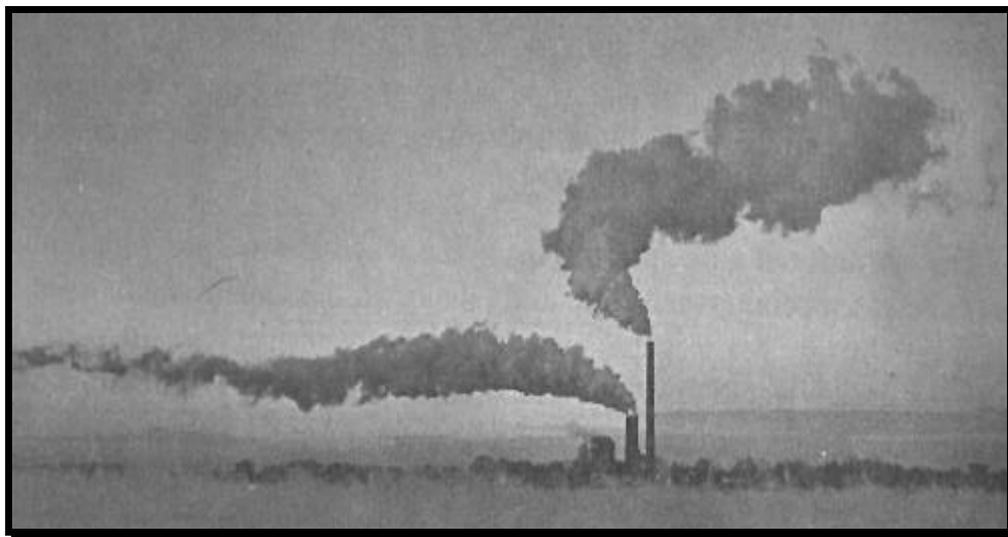


Figura 2.1 – Exemplo de reversão de velocidade horizontal (Fischer et al, 1979).

É fato experimentalmente verificado que os movimentos associados à circulação atmosférica na região próxima ao solo ocorre em regime turbulento, isto é, são irregulares e rotacionais, apresentam alto poder difusivo e flutuações de velocidades tridimensionais (Tennekes & Lumley, 1983). Enfim, são escoamentos extremamente complexos de serem matematicamente simulados, a não ser que algumas abordagens simplificadas sejam empregadas. A mais comum consiste em se tomar os valores médios das variáveis envolvidas conforme proposto por Reynolds em 1895.

A teoria matemática de escoamentos turbulentos tem sido objeto de intenso estudo por parte de engenheiros, matemáticos e físicos. Este assunto tem sido objeto central da Teoria do Caos, a qual se dedica, entre outras coisas, a sistemas que apresentam mudanças imprevisíveis de comportamento, sendo que tais sistemas são não lineares em geral.

Do ponto de vista de da engenharia, existe muitas vezes interesse em se simular os valores médios no sentido de da turbulência das grandezas envolvidas. A simulação de escoamentos atmosféricos pertence a esta classe de problemas, pois o interesse maior reside na determinação dos campos de velocidade e do poder de mistura, responsáveis principais pelo transporte físico de constituintes. É evidente que as flutuações turbulentas de velocidade, pressão e densidade são extremamente importantes para o transporte destas

grandezas, pois são responsáveis pela característica difusiva da turbulência. Porém tais flutuações turbulentas não são em geral diretamente simuladas, mas somente o efeito destas no escoamento médio.

Da abordagem de Reynolds resultam equações de transporte das velocidades médias, mas resultam também valores médios de produtos de flutuações turbulentas para os quais não resultam equações para resolvê-los. Desta forma, um número maior de incógnitas maior do que o número de equações disponíveis é introduzido. É neste ponto que surge no estudo da turbulência um ramo denominado Modelagem da Turbulência, cujo objetivo é o de fornecer as equações necessárias para tornar tal sistema de equações determinado, mesmo que de forma aproximada. Tal assunto é extremamente vasto e contém uma grande variedade de modelos destinados a suprir esta necessidade (Rodi, 1980; Eiger, 1989). Não é objetivo deste texto fazer-se um levantamento e análise dos muitos modelos de turbulência existentes, mas tão somente realçar-se alguns aspectos que são relevantes para o presente trabalho.

A simulação de escoamentos turbulentos demanda a adoção de um modelo de turbulência de modo que seja possível que possibilite resolver o sistema de equações que rege um determinado escoamento, e o correspondente transporte de poluentes que nele ocorre. Em geral, modelos mais precisos e consistentes do ponto de vista conceitual tendem a ser mais onerosos do ponto de vista computacional, alguns deles sendo ordens de magnitude mais onerosos do que outros mais simples. Tais modelos mais sofisticados dependem cada vez menos de informações específicas de um escoamento em particular, tendendo a ser cada vez mais generalizados. Modelos mais simples tendem a depender mais de informações específicas do escoamento analisado, demandando um certo nível de dados observados para que se efetue a sua calibração deste modelo. Assim, modelos do tipo $k - \epsilon$ ou modelos de tensões de Reynolds (Rodi, 1980; Eiger, 1989) tendem a ser mais gerais do que modelos baseados na teoria de comprimento de mistura proposta por Prandtl, por exemplo.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DE MODELOS DE SIMULAÇÃO DA QUALIDADE DO AR

A revisão bibliográfica apresentada a seguir refere-se a modelos de qualidade do ar contendo softwares disponíveis para pronta utilização. Tais softwares são de domínio público e distribuídos pela United States Environmental Protection Agency (USEPA). Tal distribuição não significa um endosso total por parte da EPA, mas significa que tais modelos tem grande aceitação no meio técnico e científico.

Um dos objetivos desta revisão bibliográfica foi averiguar como a questão da modelagem da poluição atmosférica por fontes móveis é considerada por esses modelos computacionais de ampla divulgação. Assim, apresenta-se a seguir uma descrição sucinta destes modelos em ordem alfabética.

ALOHA - Areal Locations of Hazardous Atmospheres (Spicer e Havens, 1989) - é um programa para a avaliação do transporte e dispersão de gás na atmosfera em situações de emergência. Ele considera as propriedades físicas e toxicológicas do poluente e as características do local em estudo, tais como as condições atmosféricas e de emissão. O pacote inclui uma biblioteca contendo as principais propriedades de cerca de 700 substâncias e mostra graficamente os resultados mais significativos de cada simulação. ALOHA use dois modelos diferentes, dependendo do tipo de poluente: um modelo de pluma gaussiana para gases pouco densos e um modelo para gases densos proposto por Spicer and Havens (1989). É adotada a hipótese de terreno plano, ausência de reações químicas e de fogo, e condições estacionárias de emissão (uma fonte variável no tempo é modelada como sendo uma seqüência de emissões constantes).

BLP - Buoyant Line and Point Source Dispersion Model (Schuman e Shire, 1980) - é um modelo de poluição do ar especificamente desenvolvido para simular a poluição gerada por usinas de redução de alumínio e outras fontes industriais de poluição onde o efeito gerado por fontes lineares estacionários é relevante. Ele pode ser usado em áreas rurais planas dentro de uma faixa de 50 km de distancia e pode incluir até 50 fontes pontuais e 10 fontes lineares. Ele

gera valores de concentração de curto período (1, 3 e 24 horas) para um máximo de 100 pontos localizados no nível do solo. Ele também fornece a contribuição de cada fonte para a concentração total em cada ponto receptor.

CALINE-3 - A Dispersion Model for Predicting Air Pollutant Concentrations Near Highways (California Department of Transportation, 1984) - este programa computa o efeito na qualidade do ar, para até 20 locais, de até 20 trechos de rodovia locada em terreno urbano ou rural e relativamente plano. Ele é baseado na aproximação de pluma gaussiana, mas também pode considerar a ocorrência de deposição para computar concentrações de material particulado.

CDM - Climatological Dispersion Model (Busse e Zimmerman, 1973) - é um modelo clássico de poluição do ar baseado no modelo de pluma gaussiana e dirigido para a estimação de concentrações médias de longo período (mês ou ano) em áreas urbanas. A concentração em qualquer número de receptores é computada como resultado do efeito de até 2500 fontes superficiais e 200 fontes pontuais em terreno plano. Pode computar dois poluentes simultaneamente e tem sido usado para a simulação de óxidos de nitrogênio e dióxido de enxôfre. Também considera o efeito de ascensão da pluma e a velocidade do vento em diferentes altitudes.

COMPLEX: Complex Terrain Dispersion Model (Cirillo, Finzi, Fortezza, Mamolini, Marani, Mura, Tamponi e Tirabassi, 1990) - é o modelo recomendado pela USEPA para condições de terrenos complexos. As versões I e II diferem na forma como avaliam a dispersão lateral. Ambas as versões são baseadas na formulação gaussiana, mas apresentam fatores corretivos para a altitude dos receptores, para a altura da camada de mistura, e para diferentes classes de estabilidade. O modelo é aplicável para fontes pontuais e existem opções para calmarias e ascensão de plumas. Os poluentes considerados são primários e não reativos.

CRSTER - Single Source Dispersion Model (Environmental Protection Agency, 1977) - é um modelo gaussiano estacionário que computa concentrações geradas em até 19 fontes pontuais em ambiente rural ou urbano. Ele apresenta as duas maiores concentrações para um dado receptor para períodos de 1, 3, 24 horas e 1 ano. Pode ser aplicado para períodos curtos de simulação de um poluente não reativo em local de terreno plano.

DIMULA - Multiple Source Dispersion Model (Cirillo e Cagnetti, 1982) - é um modelo de simulação da poluição do ar baseado na aproximação de pluma gaussiana, considerando fatores de correção para lidar com condições calmaria (onde a formulação analítica clássica não é aplicável). É aplicável para horizontes de tempo de curto e de longo período, poluentes não reativos, fontes pontuais, lineares e superficiais e terreno plano.

HIWAY - A Highway Air Pollution Model (Zimmerman e Thompson, 1974) - o modelo HIWAY foi desenvolvido pela USEPA para a avaliação da poluição do ar gerada em uma rodovia em terreno plano para uma dada condição de tráfego (equivalente à uma fonte linear de poluição). Considera a aproximação de pluma gaussiana, adaptada para representar a poluição de cada pista de rolamento, considerando fatores de correção para situações de calmaria. A presença de obstáculos (edifícios, áreas densamente arborizadas e terrenos complexos) não é considerada pelo modelo.

INPUFF - A Single Source Gaussian Puff Dispersion Algorithm (Petersen, Catalano, Chico e Yuen, 1984) - é um modelo que usa a aproximação gaussiana para avaliar a difusão de um “puff” gerado por uma fonte pontual. Pode também ser usado para várias fontes pontuais de poluentes não reativos, mas pode considerar efeitos de deposição e de sedimentação. É utilizável em casos de terrenos planos para distâncias de algumas dezenas de quilômetros.

ISC - Industrial Source Complex Dispersion Model (Bowers e Anderson, 1981) - foi especificamente desenvolvido para a simulação da poluição do ar gerada por uma indústria, considerando o efeito de altas chaminés no comportamento da pluma de poluição. Pode ser aplicado em ambientes rurais ou urbanos, apresentando terrenos relativamente complexos. Suas numerosas opções permitem a consideração de deposição seca do poluente, da modelagem da altura da pluma em função de efeitos hidrodinâmicos, da geometria da fonte emissora (pontual, linear, superficial, volumétrica). Considera poluentes não reativos, incluindo material particulado, mas pode também considerar poluentes com decaimento de primeira ordem.

KAPPA-G - A Non Gaussian Plume Dispersion Model (Tirabassi, Tagliazucca e Zanetti, 1986) - este modelo simula a poluição do ar gerada por uma fonte pontual adotando uma aproximação gaussiana para a difusão horizontal e a solução de Demuth para a difusão

vertical. Pode-se então utilizar informações sobre o perfil vertical do vento. O modelo considera várias fontes pontuais para distintos intervalos de tempo, cada qual caracterizado por condições meteorológicas distintas.

LONGZ - Long Term Dispersion Model (Bjorklund e Bowers, 1982) - é um modelo de simulação de longo período (sazonal e anual) baseado na aproximação de pluma gaussiana. Considera até 14000 fontes pontuais ou superficiais para terrenos planos ou complexos. Considera poluentes não reativos, mas inclui também efeitos de deposição. As concentrações são computadas para receptores localizados até a algumas dezenas de quilômetros da fonte poluidora.

MESOPUFF - Mesoscale Puff Model (Benkley e Bass, 1979) - é um modelo de poluição do ar de escala regional, baseado na abordagem de “puff”, a qual procura considerar a variabilidade das condições meteorológicas e físicas que podem ocorrer nestas escalas. Cada “puff” pode seguir uma trajetória independente e apresentar difusão, reações químicas, deposição e sedimentação distintas. Podem ser modelados até 5 poluentes. Escalas temporais consideradas são da ordem de poucos dias.

MPTE - Multiple Point Gaussian Dispersion Algorithm With Terrain Adjustment (Pierce e Turner, 1980) - é um modelo gaussiano de poluição do ar que pode ser usado com várias fontes pontuais, em ambiente rural ou urbano, considerando terrenos planos ou moderadamente complexos (altitudes abaixo da fonte de emissão). Computa concentrações médias para receptores para períodos de tempo variando de 1 hora a 1 ano. Não considera deposição e reações químicas.

OCD - Offshore and Coastal Dispersion Model (Schulman, Paine e Pleim, 1984) - é uma extensão do modelo clássico de pluma gaussiana especificamente projetado para a avaliação do impacto de emissões efetuadas em regiões costeiras. Ele diferencia condições meteorológicas sobre a terra e o mar, avaliando a penetração parcial da pluma quando uma inversão térmica ocorre. Adota pequenas distâncias e pequenos intervalos de tempo de simulação.

PAL - Point, Area, Line Source Algorithm (Petersen, 1978) - é um modelo de poluição do ar baseado na hipótese de pluma gaussiana. Trabalha para pequenos intervalos de tempo (poucas

horas) para um poluente não reativo. Pode considerar até 99 receptores e até 99 fontes em cada categoria. Funciona bem para áreas bastante limitadas (poucas centenas de metros da fonte emissora) em ambientes urbanos, onde pode ser empregado para áreas específicas (áreas comerciais, aeroportos). Adota a hipótese de terreno plano e pode considerar deposição seca.

PBM - Photochemical Box Model (Shere e Demerjian, 1984) - é um modelo numérico simplificado que simula o smog fotoquímico em escala urbana. É mais adequado para tratar de condições de calmaria na presença de insolação. A área urbana em estudo é subdividida em células, dentro das quais reações químicas são computadas para avaliar as concentrações de hidrocarbonetos e ozônio. Pode considerar fontes pontuais, lineares e superficiais. Os poluentes considerados são basicamente óxidos de nitrogênio e hidrocarbonetos.

PEM - Pollution Episodic Model (Texas Air Control Board, 1979) – este modelo foi desenvolvido para estudar problemas urbanos de poluição do ar e considera até 300 fontes pontuais e 50 fontes superficiais. Ele simula as concentrações de 2 poluentes não reativos e que podem apresentar deposição.

PLUVUE II - Plume Visibility Model (Environmental Protection Agency, 1992) - é um modelo de uma única fonte pontual desenvolvido para avaliar a redução de visibilidade causada por uma pluma de óxidos de enxôfre ou de nitrogênio em ambiente urbano. É baseado na aproximação gaussiana e pode considerar deposição e algumas reações químicas.

PRISE - Plume Rise and Dispersion Model (Henderson-Sellers e Allen, 1985) – este modelo calcula todas as fases (ascensão, curvatura, dispersão) do comportamento da pluma emitida por uma chaminé na atmosfera ou por uma tubulação na água, em uma formulação contínua, considerando as condições ambiente. A atmosfera é parametrizada por duas camadas: uma camada neutra subjacente à uma camada estável, estendendo-se até o infinito. Três perfis de vento são disponíveis: constante com a altitude, logarítmico e baseado em um comprimento de rugosidade.

PTPLU - A Single Source Gaussian Dispersion Algorithm (Pierce, Turner, Catalano e Hale, 1979) – é um modelo baseado na pluma gaussiana para uma fonte pontual. Adota as equações de Briggs para computar a altura efetiva da pluma utilizando as classes de estabilidade atmosférica propostas por Pasquill e os parâmetros de dispersão de Pasquill-Gifford. É

aplicável para situações de terreno plano, poluentes não reativos e distancias pequenas. É tipicamente empregado para avaliar a posição da concentração de pico no solo computando automaticamente centenas de combinações de fatores meteorológicos.

RAM - Gaussian Plume Multiple Source Air Quality Algorithm (Turner e Novak, 1978) – este modelo usa a aproximação de pluma gaussiana para várias fontes poluidoras para períodos de tempo de curta duração (1 a 24 horas). As concentrações são calculadas ao nível do solo para terrenos planos, podendo ser geradas por fontes acima do solo e para condições de calmaria. Reações químicas podem ser consideradas através de reações de primeira ordem e constantes correspondentes.

RTDM - Rough Terrain Diffusion Model (Environmental Research and Technology, 1987) - é um modelo de qualidade do ar adequado para ambientes rurais e várias fontes poluidoras. Considera a rugosidade do terreno e está preparado para computar uma seqüência de intervalos horários aplicando para cada um deles o modelo clássico de pluma gaussiana. Ele não considera deposição e reações químicas.

SHORTZ - Short Term Dispersion Model (Bjorklund e Bowers, 1982) - adota a aproximação de pluma gaussiana para avaliar concentrações ao nível do solo devido à até 300 fontes pontuais ou superficiais em ambiente rural ou urbano, para terrenos planos ou complexos. Pode considerar sedimentação e trabalha para intervalos de tempo curtos (1, 2 e 3 horas).

TUPOS - A Multiple Source Gaussian Dispersion Algorithm Using On-Site Turbulence Data (Turner, Chico e Catalano, 1986) - é um refinamento do modelo de qualidade do ar MPTER que pode empregar informações sobre o perfil vertical do vento. Apresenta formas de computar as flutuações das plumas e altura efetiva, bem como a penetração parcial na camada estável. Trabalha para curtos intervalos de tempo considerando várias fontes pontuais. Considera somente terrenos planos e não lida com deposição.

VALLEY - Multiple Point and Area-Source Gaussian Plume Dispersion Model (Burt, 1977) - é um modelo de poluição do ar especificamente projetado para condições de terreno complexas normalmente encontradas em regiões montanhosas. Pode considerar fontes pontuais e superficiais e é adequado para a simulação de valores médios de 24 horas a 1 ano.

Pode considerar condições atmosféricas instáveis, neutras e estáveis de forma a considerar adequadamente a altura da pluma em função da elevação do terreno.

Esta revisão bibliográfica remete às seguintes constatações relevantes para o presente trabalho:

- A grande maioria destes softwares baseia-se no modelo de pluma gaussiana, o qual é específico para fontes estacionárias, sendo apresentado de forma detalhada mais adiante;
- A maioria dos softwares são aplicáveis para poluentes conservativos em meios planos, embora alguns poucos trabalhem com hipóteses mais específicas para considerar efeitos como reações químicas e deposição;
- Foram encontrados apenas dois softwares específicos para problemas de tráfego (**CALINE4** e **HIWAY**), também baseados no modelo de pluma gaussiana;
- Nenhum dos softwares considera a influencia do movimento de fontes móveis na dispersão dos poluentes.

Consequentemente, esta revisão indica a necessidade de se considerar de forma mais detalhada o comportamento de fontes móveis de poluição, introduzindo o efeito do movimento destas nas plumas de poluição resultantes.

4 O MODELO DE PLUMA GAUSSIANA

4.1 Apresentação do Modelo

Segundo Amaral et al (1999) , o modelo de pluma gaussiana considera que a dispersão de uma pluma lançada ao ar pontualmente se dá de modo tal que a concentração dos componentes da pluma em função da posição relativa a fonte tem comportamento gaussiano. Isto pode ser avaliado empiricamente observando-se emissões de plumas por chaminés sob determinadas condições atmosféricas. Ainda que a fumaça sofra um meandramento, como é o comum acontecer, uma fotografia de exposição prolongada, por exemplo, revelará seu comportamento Gaussiano ao longo do tempo. É o que poderia ser chamado de comportamento médio de um evento turbulento, desde que a turbulência seja estacionária, ou seja, variáveis com valores médios constantes e flutuações turbulentas com características estatísticas constantes.

Do ponto de vista teórico não existe um modelo matemático capaz de considerar todas as condições que cercam a dispersão de uma pluma na atmosfera, fornecendo previsões de confiabilidade significativa. Assim, o modelo da Pluma Gaussiana, obtido através de inúmeras hipóteses simplificadoras apresenta suas deficiências, mas tem sido muito usado pelas seguintes razões

- Seus resultados são equivalentes aos de outros modelos mais sofisticados quando comparados com dados experimentais;
- É simples de ser usado, apresentado na forma de uma equação algébrica;
- É consistente com a natureza aleatória da turbulência;
- É uma solução para a equação de difusão-advectiva, ou seja, tem o mérito de conservar o fluxo de massa do poluente emitido;
- Tem sido aceito como ferramenta de avaliação de impactos ambientais pelo meio técnico e pelos órgãos ambientais.

O modelo da pluma gaussiana é obtido adotando-se várias hipóteses, conforme apresentado a seguir, sendo que o sistema de coordenadas cartesianas adotado está apresentado na Figura 4.1.

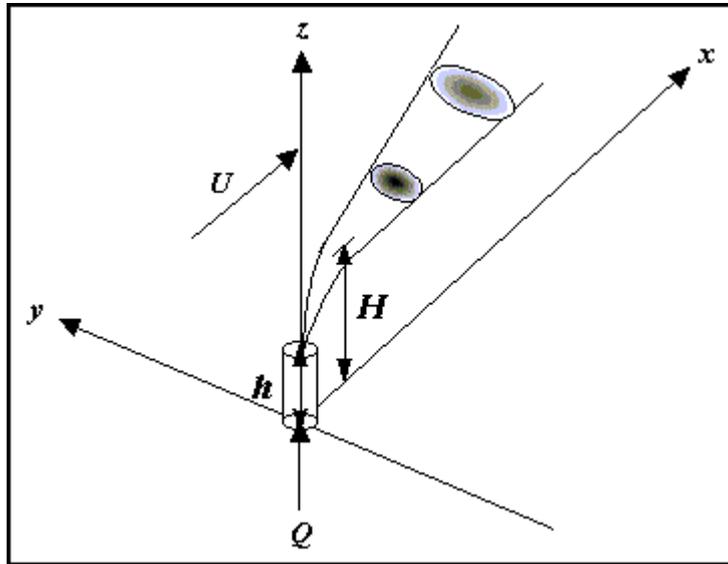


Figura 4.1 – Representação esquemática da pluma gaussiana.

- Escoamento atmosférico em regime permanente ao longo da direção x , com velocidade U uniforme;
- Taxa constante de emissão de poluente, sendo Q a sua vazão mássica (massa despejada na atmosfera por unidade de tempo);
- A coordenada vertical de despejo é dada por H , a qual resulta da soma da altura h da fonte de despejo mais a ascensão da pluma por excesso de momentum e boiância, ou seja, H é a altura efetiva da emissão;
- As coordenadas horizontais do despejo são $x = 0$ e $y = 0$;

A solução deste problema é apresentada a seguir para dois casos distintos:

Caso 1 – Espaço infinito

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2pUs_y s_z} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{y^2}{s_y^2} + \frac{(z-H)^2}{s_z^2}\right]\right\} \quad (4.1)$$

Caso 2 – Espaço semi-infinito na direção $z > 0$, com o solo localizado em $z = 0$

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2pUs_y s_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2s_y^2}\right) \exp\left\{\left[-\frac{(z-H)^2}{2s_z^2}\right] + \left[-\frac{(z+H)^2}{2s_z^2}\right]\right\} \quad (4.2)$$

onde

$C(x, y, z)$ – concentração do poluente nas coordenadas x , y , e z

s_y - desvio-padrão espacial da pluma ao longo da direção transversal y

s_z - desvio-padrão espacial da pluma ao longo da direção vertical z

A aplicação do modelo de pluma gaussiana depende do conhecimento de s_y e de s_z . Como esses valores são estimados está apresentado a seguir.

4.2 Classes de Estabilidade Atmosférica

Os valores dos desvios-padrão dependem da classe de estabilidade atmosférica, conforme proposto por Pasquill e Gifford (1976). Tais classes de estabilidade estão apresentadas na Tabela 4.1.

Velocidade do Vento a 10 m da Superfície (m/s)	Insolação			Noite	
	Forte	Moderada	Ligeira	Alguma nebulosidade ou $\geq 4/8$ de cobertura de nuvens	$\leq 3/8$ de cobertura de nuvens
< 2	A	A – B	B	-	-
2 – 3	A – B	B	C	E	F
3 – 5	B	B – C	C	D	E
5 – 6	C	C – D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Para A – B tomar os valores médios entre A e B, etc.

Insolação forte corresponde à situação típica que ocorre ao meio dia de um dia ensolarado no meio do verão na Inglaterra; insolação ligeira é o análogo para o caso do meio do inverno.

Caracterização das Classes de Estabilidade

Classe A – Extremamente Instável
 Classe B – Moderadamente Instável
 Classe C – Ligeiramente Instável
 Classe D – Neutra
 Classe E – Ligeiramente Estável
 Classe F – Moderadamente Estável

Tabela 4.1 – Categorias de Estabilidade de Pasquill-Gifford.

4.3 Parâmetros de Dispersão

4.3.1 Segundo Pasquill-Gifford

Para fontes pontuais, Turner (1970) ajustou curvas para a estimação de s_y e de s_z para ambientes rurais. Tais equações são as seguintes

$$s_y = 465,11628 x \tan[0,017453293(c - d \ln x)] \quad (4.3)$$

Na equação anterior s_y é dado em metros, x (km) é a distância a jusante do ponto de emissão, e os coeficientes c e d estão listados na Tabela 4.2.

<i>Categoria de Estabilidade</i>	<i>c</i>	<i>d</i>
A	24,1670	2,5334
B	18,3330	1,8096
C	12,5000	1,0857
D	8,3330	0,72382
E	6,2500	0,54287
F	4,1667	0,36191

Tabela 4.2 - Parâmetros c e d para estimar S_y segundo o método de Pasquill-Gifford para áreas rurais.

A equação proposta para estimar S_z é dada por

$$S_z = ax^b \quad (4.4)$$

Na equação anterior S_z é dado em metros, x (km) é a distância a jusante do ponto de emissão, e os coeficientes a e b estão listados na Tabela 4.3.

Pasquill Stability Category	x (km)	a	b
A	< 0,10	122,800	0,94470
	0,10 - 0,15	158,080	1,05420
	0,16 - 0,20	170,220	1,09320
	0,21 - 0,25	179,520	1,12620
	0,26 - 0,30	217,410	1,26440
	0,31 - 0,40	258,890	1,40940
	0,41 - 0,50	346,750	1,72830
	0,51 - 3,11	453,850	2,11660
	> 3,11	**	**
B	< 0,20	90,673	0,93198
	0,21 - 0,40	98,483	0,98332
	> 0,40	109,300	1,09710
C	Qualquer x	61,141	0,91465
D	0,30	34,459	0,86974
	0,31 - 1,00	32,093	0,81066
	1,01 - 3,00	32,093	0,64403
	3,01 - 10,00	33,504	0,60486
	10,01 - 30,00	36,650	0,56589
	> 30,00	44,053	0,51179
E	< 0,10	24,260	0,83660
	0,10 - 0,30	23,331	0,81956
	0,31 - 1,00	21,628	0,75660
	1,01 - 2,00	21,628	0,63077
	2,01 - 4,00	22,534	0,57154
	4,01 - 10,00	24,703	0,50527
	10,01 - 20,00	26,970	0,46713
	20,01 - 40,00	35,420	0,37615
	> 40,00	47,618	0,29592
F	< 0,20	15,209	0,81558
	0,21 - 0,70	14,457	0,78407
	0,71 - 1,00	13,953	0,68465
	1,01 - 2,00	13,953	0,63227
	2,01 - 3,00	14,823	0,54503
	3,01 - 7,00	16,187	0,46490
	7,01 - 15,00	17,836	0,41507
	15,01 - 30,00	22,651	0,32681
	30,01 - 60,00	27,074	0,27436
	> 60,00	34,219	0,21716

Tabela 4.3 - Parâmetros a e b para estimar s_z segundo o método de Pasquill-Gifford para áreas rurais.

Para o caso de ambientes urbanos as tabelas seguintes apresentam equações para a estimação de s_y e de s_z . Tais equações foram propostas por Briggs, conforme relatado por Pasquill

(1976) e representam o melhor ajuste para os dados obtidos por McElroy e Pooler (1968) para a difusão vertical.

<i>Categoria de Estabilidade de Pasquill</i>	s_y (metros)*
A	$0,32 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$
B	$0,32 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$
C	$0,22 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$
D	$0,16 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$
E	$0,11 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$
F	$0,11 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$
* Usar x em metros.	

Tabela 4.4 - s_y segundo o método de Pasquill-Gifford para áreas urbanas.

<i>Categoria de Estabilidade de Pasquill</i>	s_z (metros)*
A	$0,24 x (1,0 + 0,001 x)^{1/2}$
B	$0,24 x (1,0 + 0,001 x)^{1/2}$
C	$0,20 x$
D	$0,14 x (1,0 + 0,0003 x)^{-1/2}$
E	$0,08 x (1,0 + 0,0015 x)^{-1/2}$
F	$0,08 x (1,0 + 0,0015 x)^{-1/2}$
* Usar x em metros.	

Tabela 4.5 - s_z segundo o método de Pasquill-Gifford para áreas urbanas.

4.3.2 Segundo Briggs

Alternativamente, Briggs, conforme relatado por Gifford (1976) propôs outras aproximações para a estimação destes coeficientes, conforme apresentado a seguir.

<i>Categoria de Estabilidade de Pasquill</i>	s_y (metros)*	s_z (metros)*
A	$0,22 x (1,0 + 0,0001 x)^{-1/2}$	$0,20 x$
B	$0,16 x (1,0 + 0,0001 x)^{-1/2}$	$0,12 x$
C	$0,11 x (1,0 + 0,0001 x)^{-1/2}$	$0,08 x (1,0 + 0,0002 x)^{-1/2}$
D	$0,08 x (1,0 + 0,0001 x)^{-1/2}$	$0,06 x (1,0 + 0,0015 x)^{-1/2}$
E	$0,06 x (1,0 + 0,0001 x)^{-1/2}$	$0,03 x (1,0 + 0,0003 x)^{-1}$
F	$0,04 x (1,0 + 0,0001 x)^{-1/2}$	$0,016 x (1,0 + 0,0003 x)^{-1}$
* Usar x em metros		

Tabela 4.6 - s_y e s_z segundo o método de Briggs para áreas rurais.

A Figura 4.2 mostra a variação dos valores de σ_y segundo o método de Briggs para áreas rurais, segundo as classes de estabilidade de Pasquil-Gifford. Analogamente, a Figura 4.3 mostra os valores de σ_z para áreas rurais.

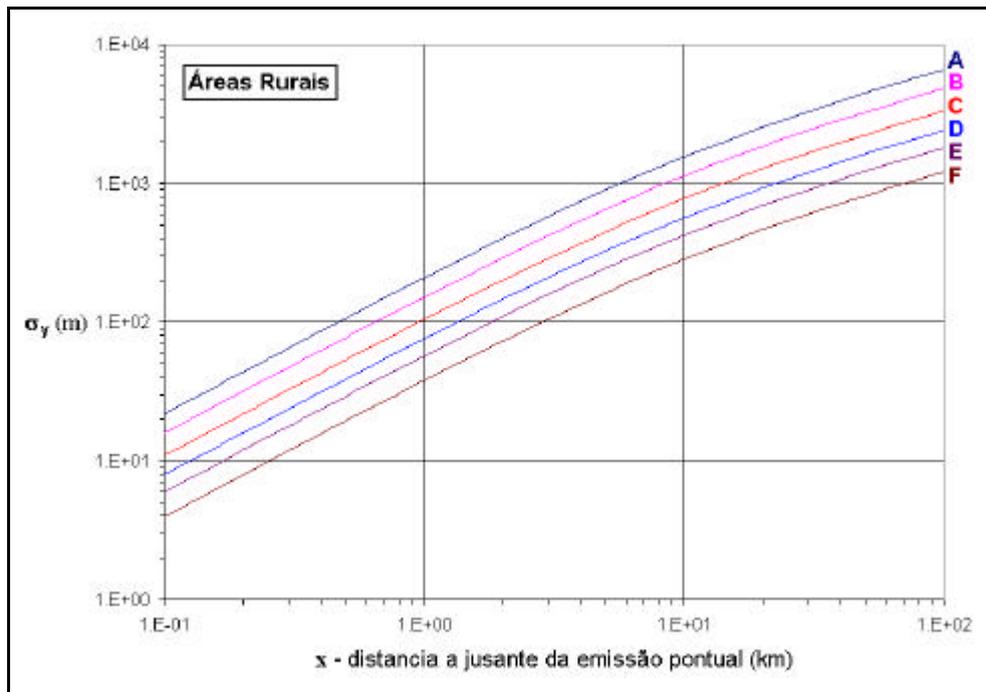


Figura 4.2 - σ_y segundo o método de Briggs para áreas rurais, para as classes de estabilidade de Pasquil-Gifford.

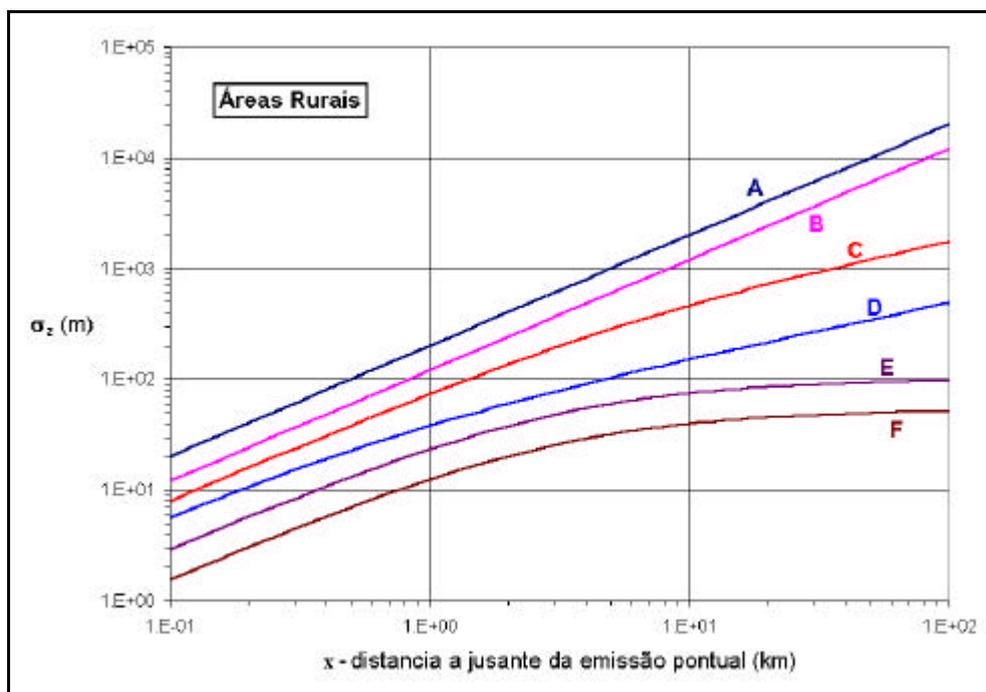


Figura 4.3 - σ_z segundo o método de Briggs para áreas rurais, para as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford.

<i>Categoria de Estabilidade de Pasquill</i>	σ_y (metros)*	σ_z (metros)*
A-B	$0,32 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$	$0,24 x (1,0 + 0,001 x)^{1/2}$
C	$0,22 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$	$0,20 x$
D	$0,16 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$	$0,14 x (1,0 + 0,0003 x)^{1/2}$
E-F	$0,11 x (1,0 + 0,0004 x)^{-1/2}$	$0,08 x (1,0 + 0,0015 x)^{1/2}$

* Usar x em metros

Tabela 4.7 - σ_y e σ_z segundo o método de Briggs para áreas urbanas.

A Figura 4.4 mostra a variação dos valores de σ_y segundo o método de Briggs para áreas urbanas, segundo as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford. Analogamente, a Figura 4.5 mostra os valores de σ_z para áreas urbanas.

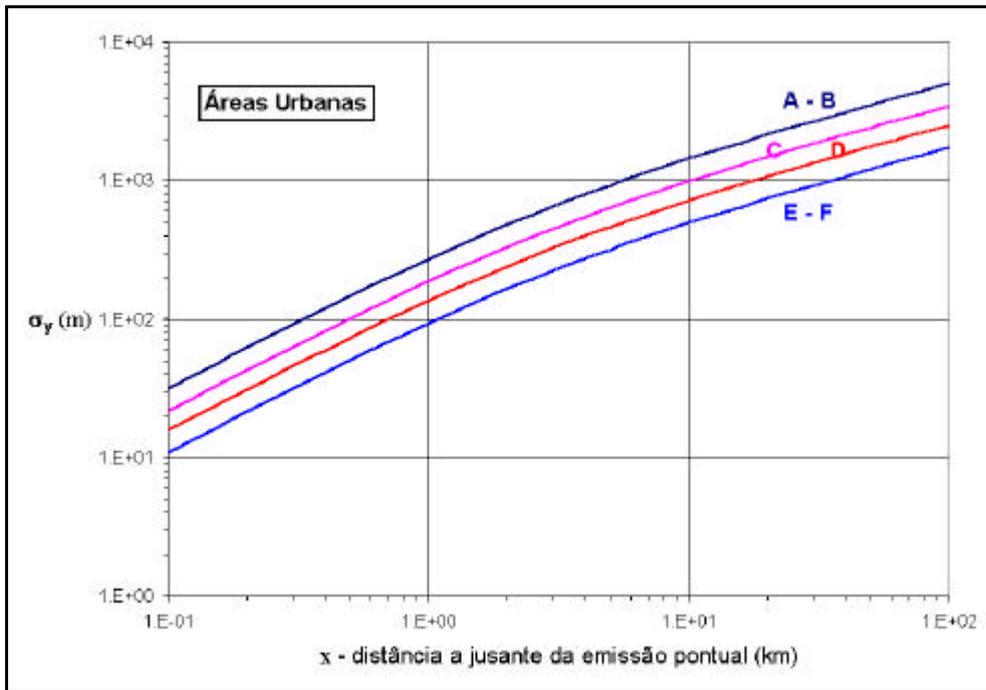


Figura 4.4 - σ_y segundo o método de Briggs para áreas urbanas, para as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford.

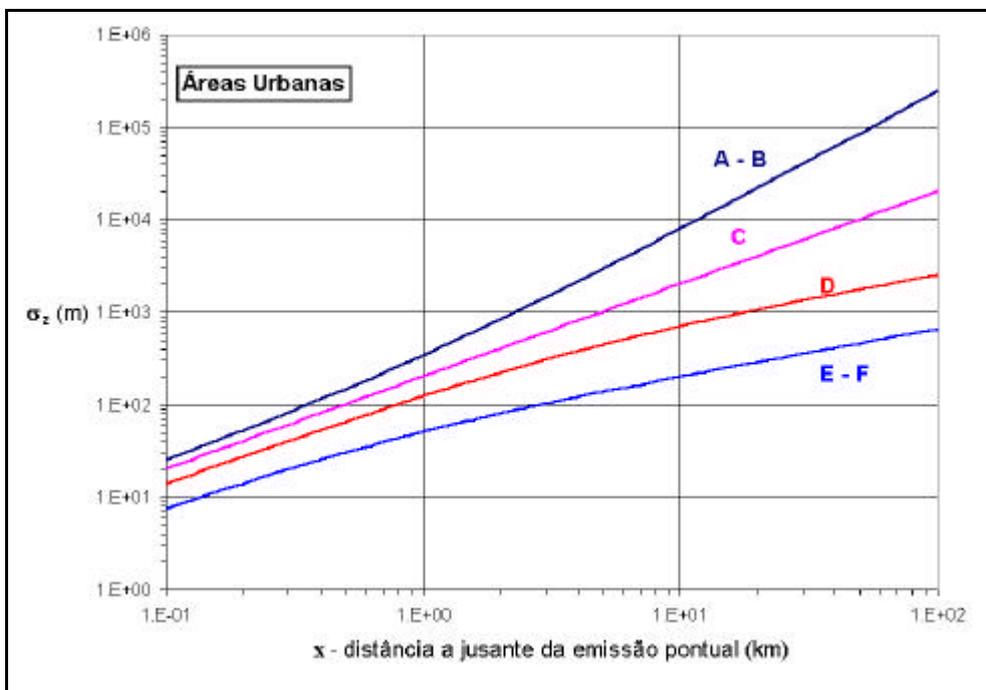


Figura 4.5 - σ_z segundo o método de Briggs para áreas urbanas, para as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford.

5 FERRAMENTAL MATEMÁTICO

5.1 Função Delta de Dirac

Define-se a função delta de Dirac da seguinte forma (Butkov, 1988)

$$\mathbf{d}(x-x_0) = \begin{cases} 0, & \text{para } x \neq x_0 \\ \infty, & \text{para } x = x_0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Graficamente, esta função pode ser representada da seguinte forma

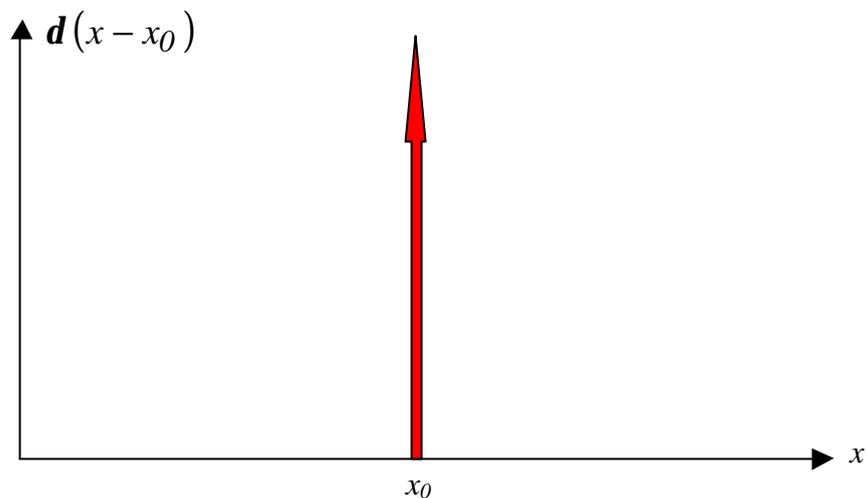


Figura 5.1 – Representação gráfica da função delta de Dirac.

Esta função representa a aplicação de um impulso de duração ou extensão infinitesimal em um dado sistema. Tal impulso pode ser a aplicação de uma carga pontual em uma viga, uma descarga poluidora pontual em um meio fluido ou mesmo uma descarga instantânea. Assim, ela pode representar um impulso no espaço e/ou no tempo.

A função delta de Dirac apresenta as seguintes propriedades

- Propriedade 1: A área total sob a função delta de Dirac é igual a 1 e é adimensional, ou seja

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(x - x_0) dx = 1 \quad (5.2)$$

Assim, por exemplo, se a dimensão de x for $[L]$, então a dimensão de $\mathbf{d}(x)$ será $1/[L]$.

- Propriedade 2: dada uma função $f(x)$ existente em x_0 , então

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(x - x_0) f(x) dx = f(x_0) \quad (5.3)$$

5.2 Curva de Gauss

A curva de Gauss desempenha papel de primeira importância na Estatística. Para uma variável aleatória X apresentando uma distribuição gaussiana, ou normal, a sua função densidade de probabilidade $f_X(x)$ é dada por (Mood, 1963)

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x - m}{s}\right)^2\right] \quad \text{para } -\infty < x < \infty \quad (5.4)$$

onde m é a média de X e s o desvio-padrão de X .

Esta curva tem o famoso aspecto de sino, sendo simétrica em torno da média (para a qual ocorre o seu valor máximo) e tanto mais larga quanto maior for o seu desvio-padrão. Estas características estão ilustradas na Figura 5.2 que apresenta duas curvas de Gauss com a mesma média, igual a 1, e desvios-padrão distintos, iguais a $1/2$ e 1.

Uma propriedade importante desta curva é que a área sob ela é sempre igual a 1, quaisquer que sejam os valores de m e s , ou seja

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_X(x) dx = 1 \quad (5.5)$$

Uma consequência desta propriedade é que, para que a área sob ela seja sempre igual a 1, então quanto menor for o desvio-padrão, maior será o valor máximo desta função. No limite, quando o desvio-padrão tende a zero, o valor máximo tende a infinito. Neste caso, a curva de Gauss tende à função delta de Dirac, evidenciando-se a relação entre estas duas funções.

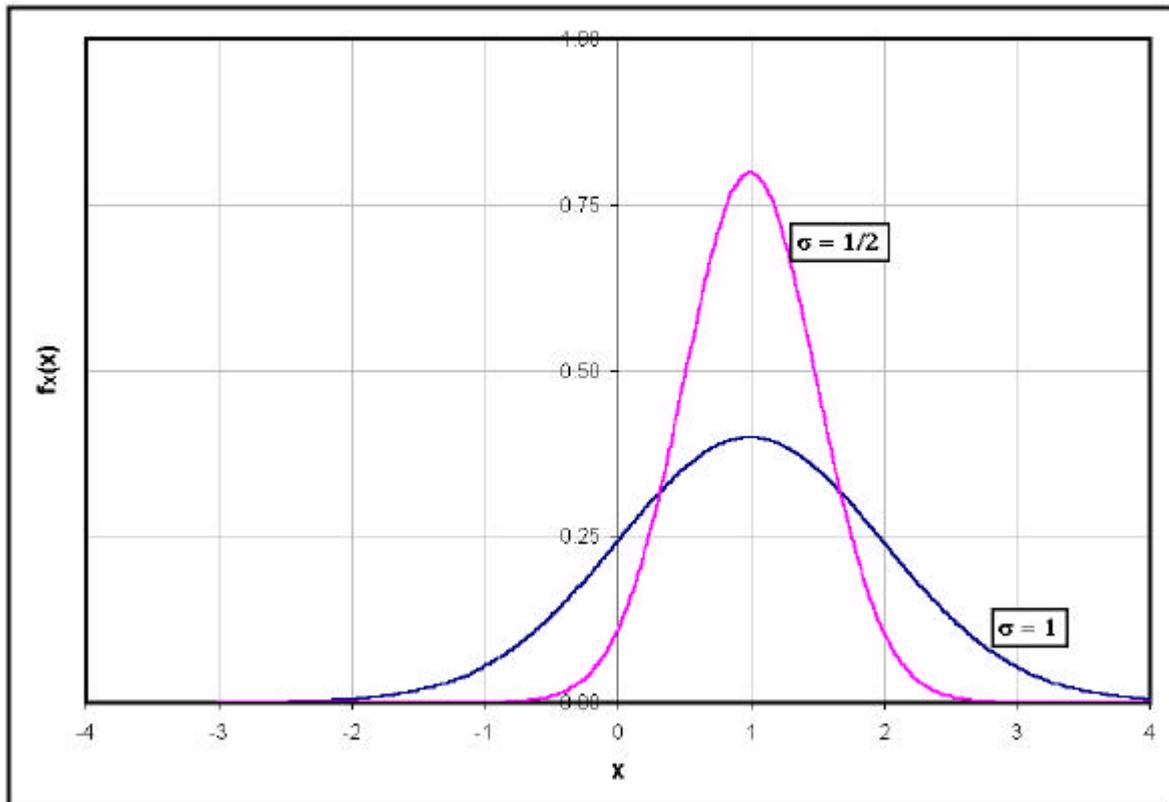


Figura 5.2 – Ilustração de duas curvas de Gauss com médias iguais a 1 e desvios-padrão iguais a $\frac{1}{2}$ e 1.

5.3 Função Erro

Define-se a função erro pela seguinte expressão (Abramovitz e Stegun, 1964)

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-q^2) dq \quad (5.6)$$

onde q é uma variável auxiliar de integração.

A função erro está representada graficamente na Figura 5.3, observando-se que ela varia entre -1 (para x tendendo a $-\infty$) e 1 (para x tendendo a $+\infty$).

Freqüentemente a função erro é apresentada na sua forma denominada complementar, definida por

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad (5.7)$$

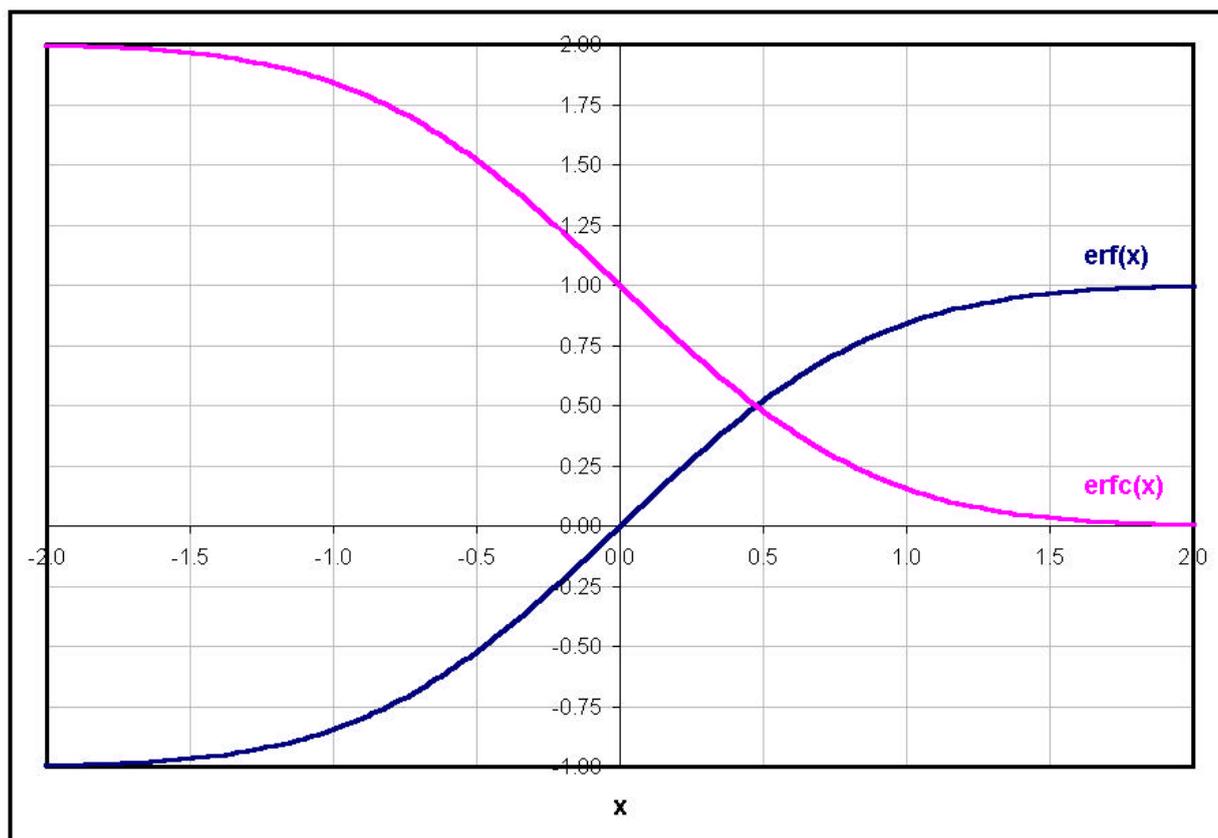


Figura 5.3 – Gráficos das funções erro - $\operatorname{erf}(x)$ e erro complementar - $\operatorname{erfc}(x)$.

Uma propriedade importante da função $\operatorname{erf}(x)$ é a seguinte

$$\operatorname{erf}(x) = -\operatorname{erf}(-x) \quad (5.8)$$

5.4 Série de Taylor

Dada uma função $f(x)$ contínua em um determinado trecho e apresentando derivadas de todas as ordens, pode-se obter o valor de $f(x + \Delta x)$ através da seguinte expressão, composta por um número infinito de termos (Butkov, 1988)

$$f(x + \mathbf{D}x) = f(x) + \left. \frac{df}{dx} \right|_x \mathbf{D}x + \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_x \frac{(\mathbf{D}x)^2}{2!} + \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_x \frac{(\mathbf{D}x)^3}{3!} + \dots \quad (5.9)$$

O símbolo $\left. \frac{d^n f}{dx^n} \right|_x$ representa o valor da n -ésima derivada de $f(x)$ calculada no ponto x .

Na prática utiliza-se um número finito de termos nesta série em função de um critério adotado para a precisão numérica desejada. O número de termos necessários para uma dada precisão diminui à medida que $\mathbf{D}x$ diminui. Quando $\mathbf{D}x$ tende a zero pode-se escrever que

$$f(x + \mathbf{D}x) = f(x) + \left. \frac{df}{dx} \right|_x \mathbf{D}x \quad (5.10)$$

No caso de uma função de mais de uma variável a aproximação é a mesma, com exceção que são utilizadas derivadas parciais no lugar de derivadas totais. Por exemplo

$$f(x + \mathbf{D}x, y, z) = f(x, y, z) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_x \mathbf{D}x \quad (5.11)$$

$$f(x, y + \mathbf{D}y, z) = f(x, y, z) + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_y \mathbf{D}y \quad (5.12)$$

$$f(x, y, z + \mathbf{D}z) = f(x, y, z) + \left. \frac{\partial f}{\partial z} \right|_z \mathbf{D}z \quad (5.13)$$

5.5 Transformada Complexa de Fourier e Sua Inversa

De acordo com Cleary (1979), para uma função $f(x)$, definida no intervalo $-\infty < x < +\infty$, define-se:

Transformada complexa de Fourier:

$$\bar{f}(\mathbf{b}) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}x'} f(x') dx' \quad (5.14)$$

Onde $i = \sqrt{-1}$

Transformada complexa inversa de Fourier:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{b}x} \bar{f}(\mathbf{b}) d\mathbf{b} \quad (5.15)$$

A Transformada Complexa de Fourier e sua inversa são alternativas muito úteis para a resolução de determinados tipos de equações diferenciais. Quando se aplica essa transformada na equação diferencial o problema torna-se cada vez mais simples, transformando-se basicamente em determinar integrais quando a solução é invertida para a variável original.

Por exemplo, seja $C(x, y, z, t)$ uma função que apresente o seguinte comportamento

$$\begin{aligned} C(x, y, z, t) \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} &= \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0 \\ C(x, y, z, t) \Big|_{y \rightarrow \pm\infty} &= \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y \rightarrow \pm\infty} = 0 \\ C(x, y, z, t) \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} &= \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} = 0 \end{aligned} \quad (5.16)$$

A transformada complexa de Fourier de C em relação a x , ou seja, \bar{C} , é dada por

$$\bar{C}(\mathbf{b}_1, y, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_1 x'} C(x', y, z, t) dx' \quad (5.17)$$

As seguintes propriedades decorrem desta definição

$$a) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial C}{\partial t} e^{i\mathbf{b}_l x'} dx' = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} C e^{i\mathbf{b}_l x'} dx' = \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} \quad (5.18)$$

$$b) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial C}{\partial x} e^{i\mathbf{b}_l x'} dx' \rightarrow \text{usar integração por partes uma vez}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_l x'} \frac{\partial C}{\partial x} dx' = \underbrace{\left(e^{i\mathbf{b}_l x'} C \right)_{x'=-\infty}^{x'=+\infty}}_{=0} - i\mathbf{b}_l \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_l x'} C dx' = -i\mathbf{b}_l \bar{C}$$

Portanto

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial C}{\partial x} e^{i\mathbf{b}_l x'} dx' = -i\mathbf{b}_l \bar{C} \quad (5.19)$$

$$c) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} e^{i\mathbf{b}_l x'} dx' \rightarrow \text{usar integração por partes duas vezes}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_l x'} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx' = \underbrace{\left(e^{i\mathbf{b}_l x'} \frac{\partial C}{\partial x} \right)_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} - i\mathbf{b}_l \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_l x'} \frac{\partial C}{\partial x} dx'$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_l x'} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx' = -i\mathbf{b}_l \left[\underbrace{\left(e^{i\mathbf{b}_l x'} C \right)_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} - i\mathbf{b}_l \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_l x'} C dx' \right] = -\mathbf{b}_l^2 \bar{C}$$

Portanto

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial x'^2} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' = -\mathbf{b}_1^2 \bar{C} \quad (5.20)$$

$$d) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial y'^2} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' = \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \int_{-\infty}^{+\infty} C e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' = \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y'^2} \quad (5.21)$$

$$e) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial z'^2} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' = \frac{\partial^2}{\partial z'^2} \int_{-\infty}^{+\infty} C e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' = \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z'^2} \quad (5.22)$$

5.6 Integrais Relevantes

Estas integrais estão contidas no trabalho de Cleary (1979).

$$a) \int_{b=-\infty}^{b=+\infty} e^{-i\mathbf{b}(x-x')-K\mathbf{b}^2 t} d\mathbf{b} = \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{Kt}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{4Kt}\right] \quad (5.23)$$

$$b) \int_{b=-\infty}^{b=+\infty} e^{-i\mathbf{b}(x-x'-Ut)-K\mathbf{b}^2} d\mathbf{b} = \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{Kt}} \exp\left\{\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4Kt}\right\} \quad (5.24)$$

$$c) \int_{b=-\infty}^{b=+\infty} e^{-i\mathbf{b}[(x-x')-U(t-t')]-K\mathbf{b}^2} d\mathbf{b} = \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{K(t-t')}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K(t-t')}\right\} \quad (5.25)$$

$$d) \int_0^t \frac{1}{\mathbf{q}^{3/2}} \exp\left\{-a^2 \mathbf{q} - \frac{b^2}{\mathbf{q}}\right\} d\mathbf{q} = \frac{\sqrt{\mathbf{p}}}{2b} \left[e^{-2ab} \operatorname{erf}\left(a\sqrt{t} - \frac{b}{\sqrt{t}}\right) + e^{-2ab} - e^{2ab} \operatorname{erf}\left(a\sqrt{t} + \frac{b}{\sqrt{t}}\right) + e^{2ab} \right] \quad (5.26)$$

5.7 Método das Imagens

O método das imagens é uma ferramenta muito útil para a obtenção de algumas soluções de equações diferenciais lineares com condições específicas de condições de contorno (Fischer et

al, 1979). Ele será empregado neste trabalho para especificar soluções que considerem um contorno sólido, conforme apresentado a seguir.

A Figura 5.4 mostra a aplicação de uma fonte poluidora real acima de um contorno sólido, o qual representa, por exemplo, o solo.

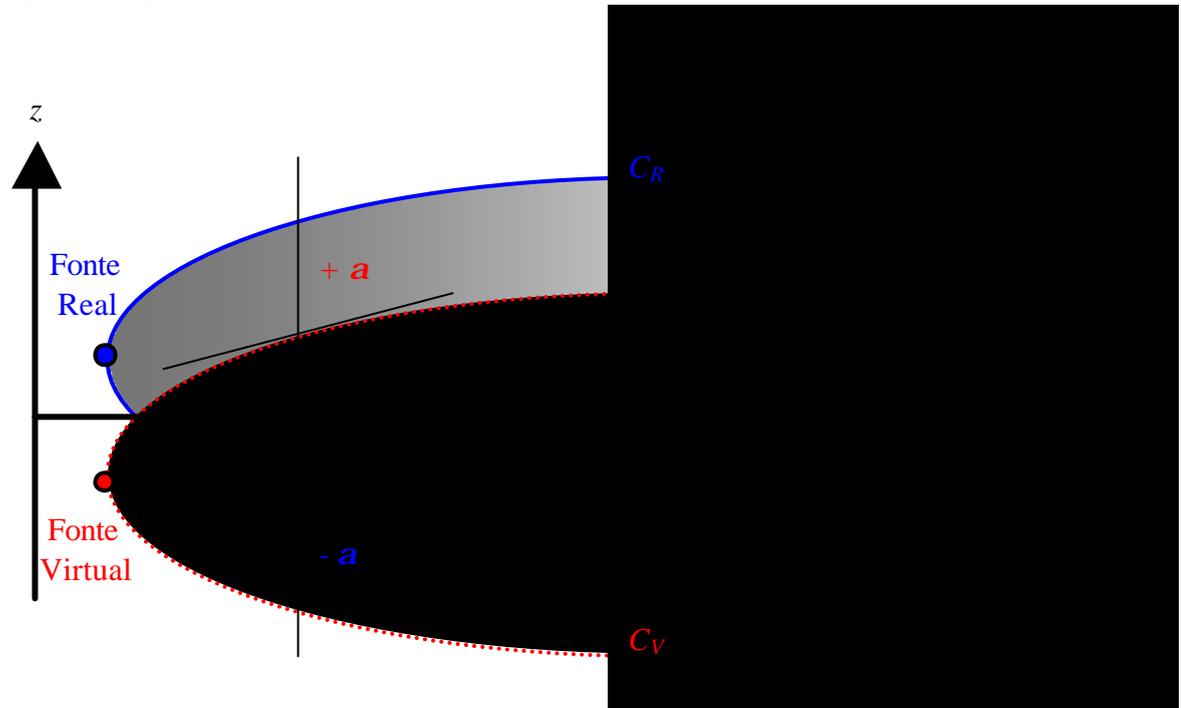


Figura 5.4 – Ilustração de aplicação do método das imagens.

A solução deste problema para a situação de espaço infinito é dada por C_R , pode ser obtida através da solução da equação diferencial do respectivo problema. Todavia, para o caso da presença do solo, não ocorre fluxo difusivo através deste contorno sólido. Portanto, a solução obtida deve ser corrigida para levar em conta esse fluxo difusivo nulo através deste contorno. Isso é feito da seguinte forma, sabendo-se que, para que ocorra fluxo difusivo nulo no contorno sólido é necessário que o gradiente de concentrações na direção perpendicular ao solo seja nulo, ou seja, $\partial C/\partial z = 0$.

Para que isso ocorra emprega-se uma fonte poluidora virtual localizada simetricamente à fonte poluidora real em relação ao eixo z . Esta solução virtual C_V é também solução da equação diferencial do respectivo problema para um espaço infinito, da mesma forma que C_R , mas aplicada em outro ponto.

Se o sistema for linear, então $(C = C_R + C_V)$ também é solução do problema, mas agora obedece a condição de contorno de fluxo difusivo no contorno sólido. Isto pode ser depreendido da Figura 5.4 aonde se observa que em uma dada linha vertical qualquer a tangente à solução C_R faz um ângulo $-\mathbf{a}$ com a direção z , enquanto que a solução C_V faz um ângulo $+\mathbf{a}$ com a direção z . Consequentemente, a solução $(C = C_R + C_V)$ faz um ângulo igual a $-\mathbf{a} + \mathbf{a} = 0$ com a direção z . Como o fluxo difusivo é proporcional a $\partial C/\partial z$, o qual é dado pela tangente de um ângulo igual a zero neste caso, então essa solução apresenta fluxo difusivo nulo no contorno sólido.

Portanto, a solução C é uma solução da equação diferencial do problema que respeita todas as condições de contorno, inclusive aquela correspondente ao contorno sólido.

6 EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ADVECTIVA

6.1 Fluxos

Define-se fluxo de uma variável como sendo a quantidade desta que passa perpendicularmente através de um elemento de área durante um dado intervalo de tempo (Fischer et al, 1979).

Fluxos são empregados em equações de conservação de grandezas como massa, momentum e energia. No presente caso, são apresentados os fluxos advectivo e difusivo.

6.1.1 Fluxo Advectivo de Massa de um Constituinte

Seja um elemento infinitesimal de comprimento dx , área de seção transversal dA , sobre o qual incide um fluido com velocidade U perpendicular à esta seção transversal, conforme esquematizado na Figura 6.1. A concentração deste constituinte atravessando esta seção é C , sendo dm a massa de constituinte que passa por esta seção durante o intervalo de tempo dt .

Por definição, o fluxo advectivo $J_{a,x}$ deste constituinte na direção x é dado por

$$J_{a,x} = \frac{dm}{dA dt} = \frac{C dA dx}{dA dt} = UC \quad (6.1)$$

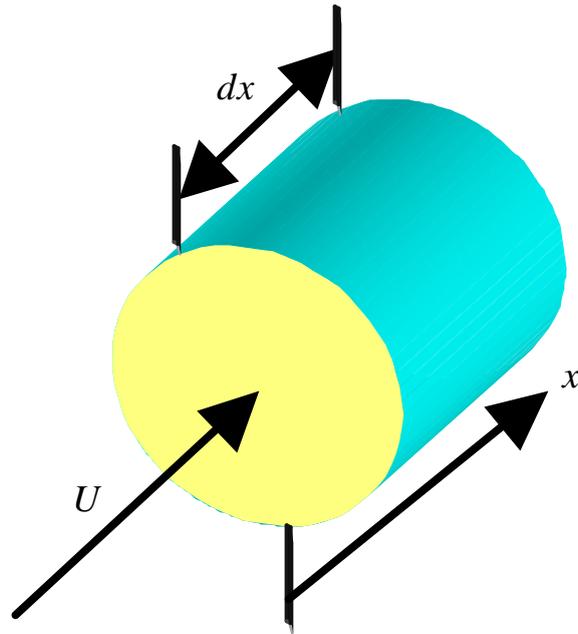


Figura 6.1 – Representação das variáveis que definem o fluxo advectivo de massa.

O fluxo advectivo translada massa na direção do vetor velocidade do fluido transportador em cada ponto do escoamento.

6.1.2 Fluxo Difusivo de Massa de um Constituinte

O fenômeno da difusão tem como principal característica o espalhamento de uma grandeza no meio fluido que a contém. Dessa forma, esse espalhamento transporta tal grandeza de locais onde sua concentração é maior para locais onde a sua concentração é menor.

Existem tipos distintos de difusão. O primeiro é a difusão molecular, através da qual uma grandeza é espalhada pelos movimentos brownianos das moléculas que constituem o fluido. Este tipo de difusão foi primeiramente modelado matematicamente através da lei de Fick (Fischer et al, 1979) através da seguinte expressão

$$J_d = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6.2)$$

onde J_d representa a intensidade do fluxo de difusão molecular e D é o coeficiente de difusão molecular, que apresenta dimensões $[L^2/T]$.

A Figura 6.2 apresenta esquematicamente a ocorrência de fluxo difusivo em uma dimensão.

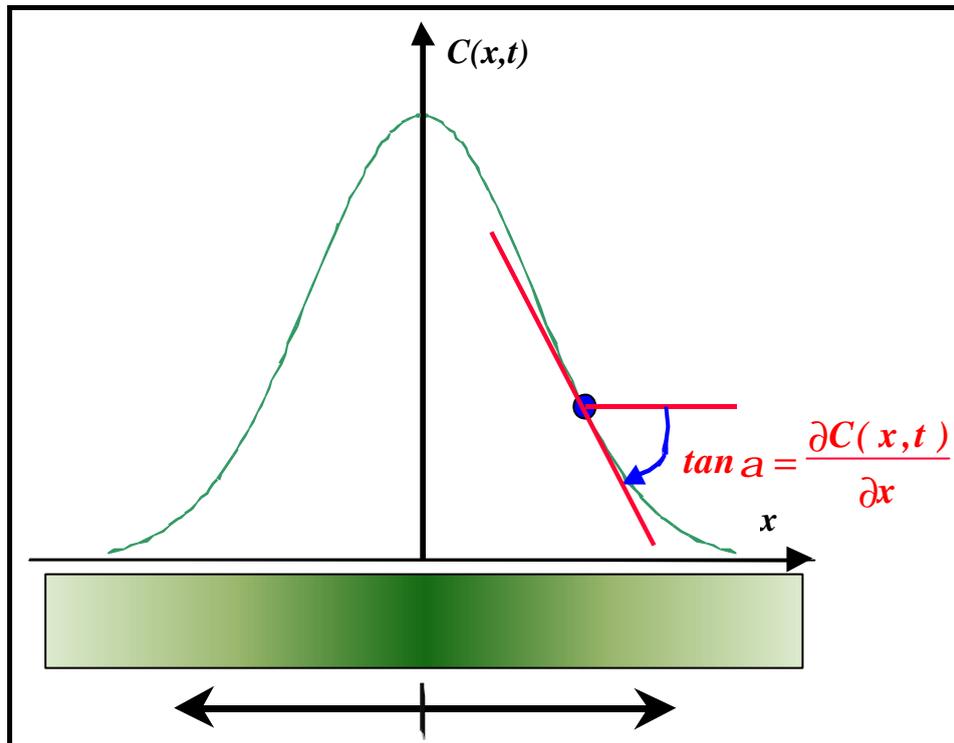


Figura 6.2 – Representação esquemática do fluxo difusivo em uma dimensão.

Nesta figura mostra-se um gráfico de concentração de um constituinte ao longo do espaço para um dado instante de tempo, imerso em um fluido estacionário. Devido à ação da difusão molecular as concentrações tendem a se igualar, ocorrendo diminuição das maiores concentrações e aumento das menores. De acordo com a lei de Fick, a taxa com que isto ocorre é diretamente proporcional à intensidade do gradiente de concentrações $\partial C/\partial x$ existente em cada ponto. O sinal negativo faz com que o fluxo ocorra sempre no sentido das concentrações decrescentes.

A difusão molecular depende essencialmente da natureza dos fluidos envolvidos e da temperatura do meio.

No caso de escoamentos turbulentos o poder de mistura da turbulência é, em geral, muito maior que o da difusão molecular. Fazendo uma analogia entre os vórtices turbulentos e as moléculas apresentando movimento browniano, Taylor (1921) mostrou que, sob certas condições, pode-se definir um coeficiente de difusão turbulenta de forma análoga ao

coeficiente de difusão molecular. Portanto, a intensidade do fluxo de difusão turbulenta $J_{d,x}$ ao longo da direção x é modelada da seguinte forma

$$J_{d,x} = -K_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6.3)$$

onde K_x é o coeficiente de difusão turbulenta na direção x .

Essa analogia é apenas parcial, porque, a intensidade da difusão turbulenta depende basicamente das flutuações turbulentas de velocidade, e não dos fluidos envolvidos. Assim, o coeficiente de difusão turbulenta pode variar ao longo do espaço, da direção e do tempo.

A modelagem do coeficiente de difusão turbulenta pode ser feita de diversas formas, sendo parte do campo da Modelagem de Turbulência (Eiger, 1989), o qual não faz parte do escopo do presente trabalho.

6.2 Equação de Conservação da Massa de um Constituinte

Esta é a equação fundamental do presente trabalho e simplesmente estabelece, de forma matemática adequada, que a concentração de um constituinte em um dado ponto e instante resulta da interação dos fluxos anteriormente apresentados, da emissão ou retirada de material do meio e de eventuais reações que transformem o constituinte em outro.

Para a obtenção desta equação toma-se um volume de controle (VC) infinitesimal fixado no espaço tridimensional cujas dimensões são dx , dy e dz ao longo das direções x , y e z respectivamente.

Através deste VC escoo o fluido cujo vetor velocidade apresenta componentes U , V e W ao longo das direções x , y e z respectivamente. A Figura 6.3 ilustra os fluxos advectivos através das faces do volume de controle.

Também através destas faces são considerados os fluxos difusivos cujos coeficientes de difusão são K_x , K_y e K_z , nas direções x , y e z respectivamente. A Figura 6.4 ilustra os fluxos difusivos em questão.

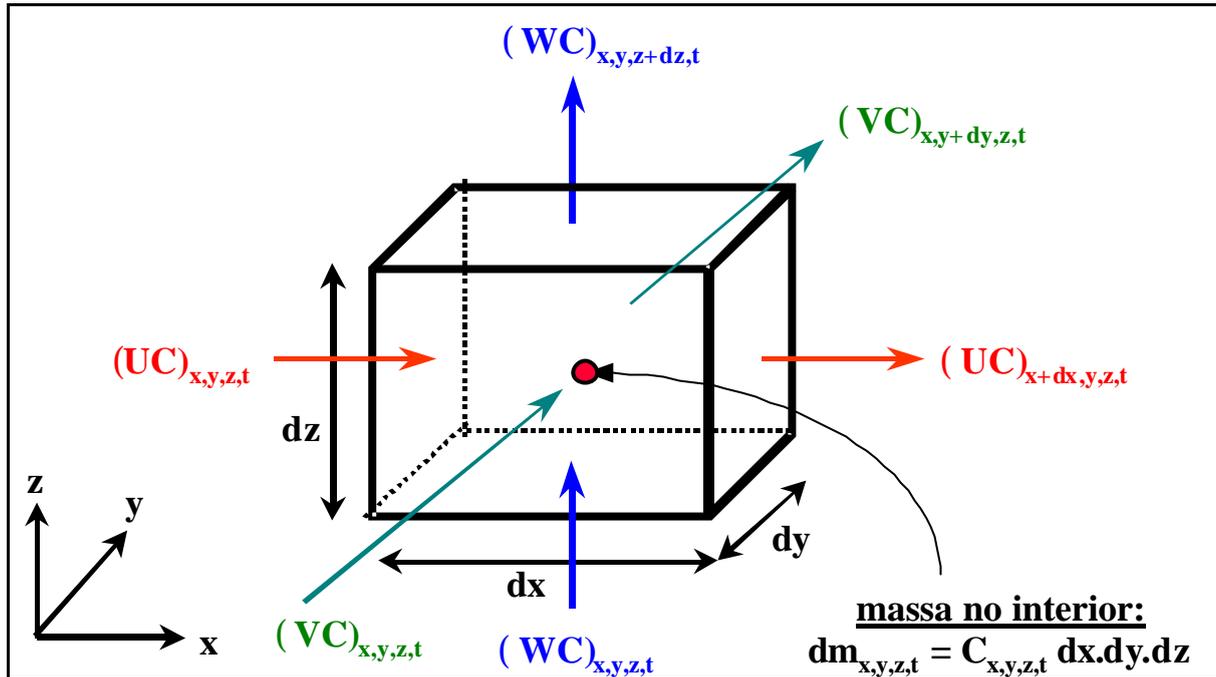


Figura 6.3 – Fluxos advectivos através das faces de um volume de controle.

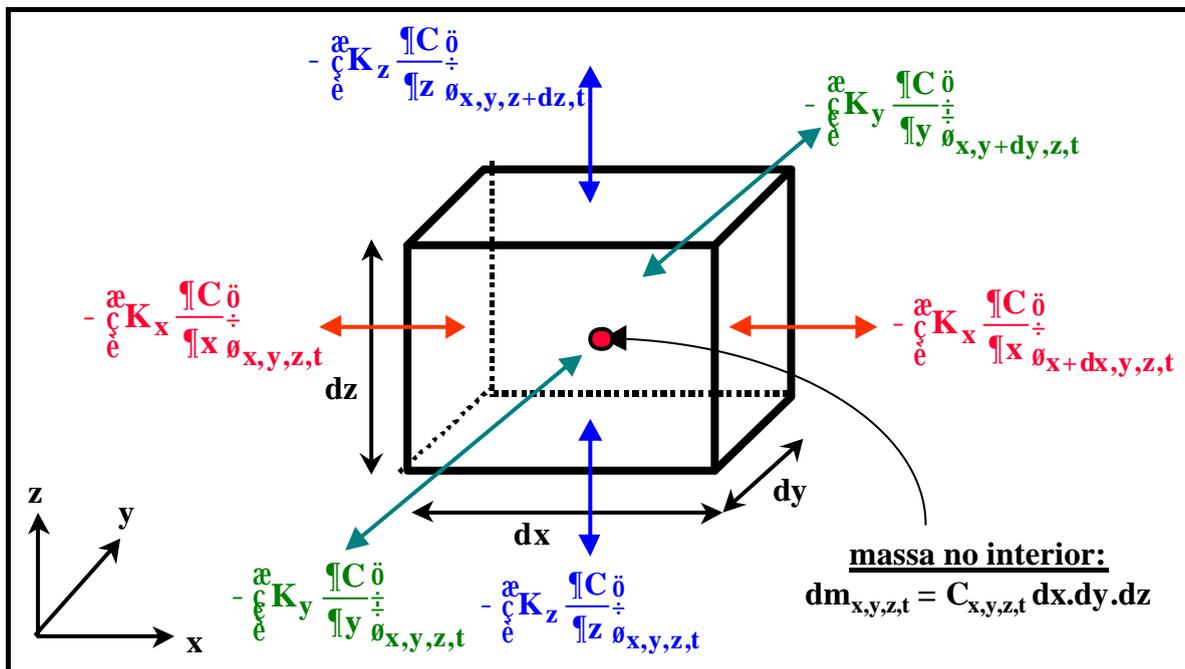


Figura 6.4 – Fluxos difusivos através das faces de um volume de controle.

A equação de conservação da massa é facilmente obtida efetuando-se o balanço de massa no VC durante um intervalo de tempo dt , conforme apresentado a seguir.

Segundo o princípio de conservação da massa pode-se escrever que

Massa que entra no VC durante dt – Massa que sai do VC durante dt = Variação de massa que ocorre dentro do VC durante dt
--

As quantidades existentes na equação acima devem, então, ser obtidas.

- Massa que entra no VC por advecção durante dt :

$$(UC)_{x,y,z,t} dydzdt + (VC)_{x,y,z,t} dxdzdt + (WC)_{x,y,z,t} dxdydt \quad (6.4)$$

- Massa que entra no VC por difusão durante dt :

$$\left(-K_x \frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x,y,z,t} dydzdt + \left(-K_y \frac{\partial C}{\partial y}\right)_{x,y,z,t} dxdzdt + \left(-K_z \frac{\partial C}{\partial z}\right)_{x,y,z,t} dxdydt \quad (6.5)$$

- Massa que sai do VC por advecção durante dt :

$$(UC)_{x+dx,y,z,t} dydzdt + (VC)_{x,y+dy,z,t} dxdzdt + (WC)_{x,y,z+dz,t} dxdydt \quad (6.6)$$

- Massa que sai do VC por difusão durante dt :

$$\left(-K_x \frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x+dx,y,z,t} dydzdt + \left(-K_y \frac{\partial C}{\partial y}\right)_{x,y+dy,z,t} dxdzdt + \left(-K_z \frac{\partial C}{\partial z}\right)_{x,y,z+dz,t} dxdydt \quad (6.7)$$

As massas que entram e que saem do VC podem ser relacionadas entre si através de séries de Taylor. Assim, pode-se escrever para a direção x

- Fluxo advectivo de massa que sai do VC na direção x

$$(UC)_{x+dx,y,z,t} = (UC)_{x,y,z,t} + \left[\frac{\partial(UC)}{\partial x}\right]_{x,y,z,t} dx \quad (6.8)$$

- Fluxo difusivo de massa que sai do VC na direção x

$$\left(-K_x \frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x+dx,y,z,t} = \left(-K_x \frac{\partial C}{\partial x}\right)_{x,y,z,t} + \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(-K_x \frac{\partial C}{\partial x}\right)\right]_{x,y,z,t} dx \quad (6.9)$$

Para a direção y tem-se

- Fluxo advectivo de massa que sai do VC na direção y

$$(VC)_{x,y+dy,z,t} = (VC)_{x,y,z,t} + \left[\frac{\partial(VC)}{\partial y}\right]_{x,y,z,t} dy \quad (6.10)$$

- Fluxo difusivo de massa que sai do VC na direção y

$$\left(-K_y \frac{\partial C}{\partial y}\right)_{x,y+dy,z,t} = \left(-K_y \frac{\partial C}{\partial y}\right)_{x,y,z,t} + \left[\frac{\partial}{\partial y}\left(-K_y \frac{\partial C}{\partial y}\right)\right]_{x,y,z,t} dy \quad (6.11)$$

E, finalmente, para a direção z

- Fluxo advectivo de massa que sai do VC na direção z

$$(WC)_{x,y,z+dz,t} = (WC)_{x,y,z,t} + \left[\frac{\partial(WC)}{\partial z}\right]_{x,y,z,t} dz \quad (6.12)$$

- Fluxo difusivo de massa que sai do VC na direção z

$$\left(-K_z \frac{\partial C}{\partial z}\right)_{x,y,z+dz,t} = \left(-K_z \frac{\partial C}{\partial z}\right)_{x,y,z,t} + \left[\frac{\partial}{\partial z}\left(-K_z \frac{\partial C}{\partial z}\right)\right]_{x,y,z,t} dz \quad (6.13)$$

Assim, dados os fluxos de massa acima, o primeiro termo da equação da conservação da massa pode ser escrito como

Massa que entra no VC durante dt – Massa que sai do VC durante dt

=

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\partial(UC)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right]_{x,y,z,t} dx dy dz dt \\ & + \left[-\frac{\partial(VC)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right]_{x,y,z,t} dx dy dz dt \\ & + \left[-\frac{\partial(WC)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right]_{x,y,z,t} dx dy dz dt \end{aligned} \quad (6.14)$$

A variação de massa no interior do VC durante dt é computada da seguinte forma, através do uso de série de Taylor desenvolvida ao longo do tempo, ou seja

$$m_{x,y,z,t+dt} = m_{x,y,z,t} + \left(\frac{\partial m}{\partial t} \right)_{x,y,z,t} dt \quad (6.15)$$

Mas, por definição

$$m_{x,y,z,t} = C_{x,y,z,t} dx dy dz \quad (6.16)$$

Então

Varição de massa que ocorre dentro do VC durante dt

=

$$m_{x,y,z,t+dt} - m_{x,y,z,t} = \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_{x,y,z,t} dx dy dz dt \quad (6.17)$$

De posse dos termos que compõem a equação de conservação da massa pode-se escrever que

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\partial(UC)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right]_{x,y,z,t} dx dy dz dt + \left[-\frac{\partial(VC)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right]_{x,y,z,t} dx dy dz dt \\ & + \left[-\frac{\partial(WC)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right]_{x,y,z,t} dx dy dz dt = \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_{x,y,z,t} dx dy dz dt \end{aligned} \quad (6.18)$$

Dividindo-se todos os termos da equação acima por $dx.dy.dz.dt$ e remanejando-se os termos resulta

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(UC)}{\partial x} + \frac{\partial(VC)}{\partial y} + \frac{\partial(WC)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (6.19)$$

Para um fluido incompressível pode-se demonstrar que a equação de conservação da massa para o fluido transportador é dada pela equação da continuidade (Fischer et al, 1979), ou seja

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0 \quad (6.20)$$

Combinando-se as duas equações anteriores resulta

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (6.21)$$

A equação acima representa o princípio de conservação da massa de um constituinte devido apenas às ações físicas da advecção e da difusão. Não estão consideradas eventuais trocas de massa devido à emissões e retiradas de constituinte e reações de qualquer espécie que possam gerar variações da massa do constituinte. Tais influências podem ser consideradas através da adição de um termo G , denominado fonte/sumidouro, específico para cada caso. Assim, esta equação toma o seguinte aspecto

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + G \quad (6.22)$$

sendo que o termo G apresenta dimensões $[M/L^3T]$.

O significado do termo G fica claro quando se considera, por exemplo, um meio estacionário e não difusivo como um recipiente contendo o fluido e o constituinte. Se a concentração for uniformemente distribuída dentro deste recipiente então qualquer variação temporal nela será devida apenas ao termo G , ou seja

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{dC}{dt} = G \quad (6.23)$$

sendo que a derivada parcial foi substituída pela derivada total pois, neste caso, a concentração depende apenas de uma variável, ou seja, do tempo.

7 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ADVECTIVA PARA ESPAÇO INFINITO

7.1 Dedução da Solução

Apresenta-se a seguir a solução da equação da difusão advectiva ressaltando-se as seguintes hipóteses adotadas:

- a) Turbulência homogênea: K_x, K_y, K_z são constantes
- b) Turbulência anisotrópica: $K_x \neq K_y \neq K_z$
- c) Advecção somente na direção x , com velocidade constante U
- d) Termo fonte/sumidouro $G(x, y, z, t)$ genérico

Neste caso, a equação de difusão advectiva é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + G(x, y, z, t) \quad (7.1)$$

cuja solução está sujeita, no presente estudo, à

$$\text{Condição Inicial: } C(-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty, t = 0) = F(x, y, z) \quad (7.2)$$

$$\text{Condições de Contorno: } \begin{cases} C(x, y, z, t) \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial x} \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0 \\ C(x, y, z, t) \Big|_{y \rightarrow \pm\infty} = \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial y} \Big|_{y \rightarrow \pm\infty} = 0 \\ C(x, y, z, t) \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} = \frac{\partial C(x, y, z, t)}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow \pm\infty} = 0 \end{cases} \quad (7.3)$$

A solução desta equação, considerando as condições de contorno e inicial adotadas, é apresentada a seguir, mostrando-se os passos seguidos em suas várias etapas.

Passo 1: usar a transformada complexa de Fourier para a equação diferencial para C em relação a x , sendo

$$\bar{C}(\mathbf{b}_1, y, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_1 x'} C(x', y, z, t) dx' \quad (7.4)$$

Assim

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial C}{\partial t} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' + U \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial C}{\partial x} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' = K_x \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' + K_y \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' + \\ K_z \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' + \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, y, t) e^{i\mathbf{b}_1 x'} dx' \end{aligned} \quad (7.5)$$

Segundo as propriedades da transformada complexa de Fourier apresentadas anteriormente, tem-se

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - i\mathbf{b}_1 U \bar{C} = -K_x \mathbf{b}_1^2 \bar{C} + K_y \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + \bar{G}(\mathbf{b}_1, y, z, t) \quad (7.6)$$

Passo 2: de forma análoga, transformar a equação diferencial para \bar{C} em relação a y , sendo

$$\bar{\bar{C}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_2 y'} \bar{C}(\mathbf{b}_1, y', z, t) dy' \quad (7.7)$$

Assim

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} e^{i\mathbf{b}_2 y'} dy' - i\mathbf{b}_2 U \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{C} e^{i\mathbf{b}_2 y'} dy' = -K_x \mathbf{b}_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{C} e^{i\mathbf{b}_2 y'} dy' + K_y \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} e^{i\mathbf{b}_2 y'} dy' + \\ K_z \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} e^{i\mathbf{b}_2 y'} dy' + \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{G}(\mathbf{b}_1, y, t) e^{i\mathbf{b}_2 y'} dy' \end{aligned} \quad (7.8)$$

As integrais acima devem ser avaliadas, conforme feito anteriormente, empregando-se as propriedades já referidas, das quais resulta

$$\frac{\partial \overline{\overline{C}}}{\partial t} - i\mathbf{b}_1 U \overline{\overline{C}} = -K_x \mathbf{b}_1^2 \overline{\overline{C}} - K_y \mathbf{b}_2^2 \overline{\overline{C}} + K_z \frac{\partial^2 \overline{\overline{C}}}{\partial z^2} + \overline{\overline{G}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, z, t) \quad (7.9)$$

Passo 3: de forma análoga, transformar a equação diferencial para $\overline{\overline{\overline{C}}}$ em relação a z , sendo

$$\overline{\overline{\overline{C}}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mathbf{b}_3 z'} \overline{\overline{C}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, z', t) dz' \quad (7.10)$$

Assim

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \overline{\overline{C}}}{\partial t} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dz' - i\mathbf{b}_1 U \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\overline{C}} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dz' = & -K_x \mathbf{b}_1^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\overline{C}} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dz' - K_y \mathbf{b}_2^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\overline{C}} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dz' + \\ & K_z \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 \overline{\overline{C}}}{\partial z^2} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dz' + \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\overline{G}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, z, t) e^{i\mathbf{b}_3 z'} dz' \end{aligned} \quad (7.11)$$

As integrais acima devem ser avaliadas, conforme feito anteriormente, empregando-se as propriedades já referidas, das quais resulta

$$\frac{d\overline{\overline{\overline{C}}}}{dt} - i\mathbf{b}_1 U \overline{\overline{\overline{C}}} = -K_x \mathbf{b}_1^2 \overline{\overline{\overline{C}}} - K_y \mathbf{b}_2^2 \overline{\overline{\overline{C}}} - K_z \mathbf{b}_3^2 \overline{\overline{\overline{C}}} + \overline{\overline{\overline{G}}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, t) \quad (7.12)$$

ou

$$\frac{d\overline{\overline{\overline{C}}}}{dt} + \left(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2 \right) \overline{\overline{\overline{C}}} = \overline{\overline{\overline{G}}} \quad (7.13)$$

sendo que a condição inicial é dada por

$$\overline{\overline{\overline{C}}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, t=0) = \int_{z'=-\infty}^{z'+\infty} \int_{y'=-\infty}^{y'+\infty} \int_{x'=-\infty}^{x'+\infty} F(x', y', z') e^{i\mathbf{b}_1 x'} e^{i\mathbf{b}_2 y'} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dx' dy' = \overline{\overline{\overline{F}}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$$

(7.14)

Passo 4: obter a solução para $\overline{\overline{C}}$ resolvendo-se a correspondente equação diferencial linear de primeira ordem, cuja solução é dada por (Butkov, 1988).

$$\overline{\overline{C}} = e^{-(-ib_1U + K_x b_1^2 + K_y b_2^2 + K_z b_3^2)t} \left[\int_0^t \overline{\overline{G}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, t') e^{(-ib_1U + K_x b_1^2 + K_y b_2^2 + K_z b_3^2)t'} dt' + \overline{\overline{F}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3) \right] \quad (7.15)$$

Passo 5: inverter $\overline{\overline{C}}$, usando a transformada complexa de Fourier inversa, com relação a \mathbf{b}_3 para obter $\overline{\overline{C}}$, dado que

$$\overline{\overline{C}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, z, t) = \frac{1}{2\mathbf{p}} \int_{b_3=-\infty}^{b_3=+\infty} e^{-ib_3z} \overline{\overline{C}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, t) d\mathbf{b}_3 \quad (7.16)$$

Passo 6: de forma análoga, inverter $\overline{\overline{C}}$ com relação a \mathbf{b}_2 para obter $\overline{\overline{C}}$, dado que

$$\overline{\overline{C}}(\mathbf{b}_1, y, z, t) = \frac{1}{2\mathbf{p}} \int_{b_2=-\infty}^{b_2=+\infty} e^{-ib_2y} \overline{\overline{C}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, z, t) d\mathbf{b}_2 \quad (7.17)$$

Passo 7: de forma análoga, inverter $\overline{\overline{C}}$ com relação a \mathbf{b}_1 para obter C , dado que

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{2\mathbf{p}} \int_{b_1=-\infty}^{b_1=+\infty} e^{-ib_1x} \overline{\overline{C}}(\mathbf{b}_1, y, z, t) d\mathbf{b}_1 \quad (7.18)$$

Portanto

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{2\mathbf{p}} \int_{b_1=-\infty}^{b_1=+\infty} e^{-ib_1x} \left\{ \frac{1}{2\mathbf{p}} \int_{b_2=-\infty}^{b_2=+\infty} e^{-ib_2y} \left[\frac{1}{2\mathbf{p}} \int_{b_3=-\infty}^{b_3=+\infty} e^{-ib_3z} \overline{\overline{C}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3, t) d\mathbf{b}_3 \right] d\mathbf{b}_2 \right\} d\mathbf{b}_1 \quad (7.19)$$

A equação anterior pode ser rearranjada após a substituição da solução $\overline{\overline{C}}$, conforme apresentado a seguir.

$$\begin{aligned}
 C(x, y, z, t) &= \frac{1}{8\mathbf{p}^3} \int_{\mathbf{b}_1=-\infty}^{\mathbf{b}_1=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1 x} \int_{\mathbf{b}_2=-\infty}^{\mathbf{b}_2=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2 y} \int_{\mathbf{b}_3=-\infty}^{\mathbf{b}_3=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3 z} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t} \overline{\overline{F}} \ast \\
 d\mathbf{b}_3 \, d\mathbf{b}_2 \, d\mathbf{b}_1 &+ \frac{1}{8\mathbf{p}^3} \int_{\mathbf{b}_1=-\infty}^{\mathbf{b}_1=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1 x} \int_{\mathbf{b}_2=-\infty}^{\mathbf{b}_2=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2 y} \int_{\mathbf{b}_3=-\infty}^{\mathbf{b}_3=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3 z} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t} \ast \\
 \ast \int_0^t \overline{\overline{G}} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t'} dt' \, d\mathbf{b}_3 \, d\mathbf{b}_2 \, d\mathbf{b}_1
 \end{aligned} \tag{7.20}$$

Mas

$$\overline{\overline{F}} = \overline{\overline{F}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3) = \int_{z'=-\infty}^{z'+\infty} \int_{y'=-\infty}^{y'+\infty} \int_{x'=-\infty}^{x'+\infty} F(x', y', z') e^{i\mathbf{b}_1 x'} e^{i\mathbf{b}_2 y'} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dx' dy' dz' \tag{7.21}$$

e

$$\overline{\overline{G}} = \overline{\overline{G}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3) = \int_{z'=-\infty}^{z'+\infty} \int_{y'=-\infty}^{y'+\infty} \int_{x'=-\infty}^{x'+\infty} G(x', y', z', t) e^{i\mathbf{b}_1 x'} e^{i\mathbf{b}_2 y'} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dx' dy' dz' \tag{7.22}$$

Fazendo as substituições para $\overline{\overline{F}}$ e $\overline{\overline{G}}$ resulta

- Para o primeiro termo do segundo membro

$$C_I = \frac{1}{8\mathbf{p}^3} \int_{\mathbf{b}_1=-\infty}^{\mathbf{b}_1=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1 x} \left\{ \int_{\mathbf{b}_2=-\infty}^{\mathbf{b}_2=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2 y} \left[\int_{\mathbf{b}_3=-\infty}^{\mathbf{b}_3=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3 z} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t} \overline{\overline{F}} \, d\mathbf{b}_3 \right] d\mathbf{b}_2 \right\} d\mathbf{b}_1 \tag{7.23}$$

ou

$$C_I = \frac{1}{8\mathbf{p}^3} \int_{\mathbf{b}_1=-\infty}^{\mathbf{b}_1=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1 x} \int_{\mathbf{b}_2=-\infty}^{\mathbf{b}_2=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2 y} \int_{\mathbf{b}_3=-\infty}^{\mathbf{b}_3=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3 z} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t} * \quad (7.24)$$

$$* \int_{z'=-\infty}^{z'=+\infty} \int_{y'=-\infty}^{y'=+\infty} \int_{x'=-\infty}^{x'=+\infty} F(x', y', z') e^{i\mathbf{b}_1 x'} e^{i\mathbf{b}_2 y'} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dx' dy' dz' d\mathbf{b}_3 d\mathbf{b}_2 d\mathbf{b}_1$$

Para rearranjar estas integrais seleciona-se a seguinte ordem de integração: $\mathbf{b}_3, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_1, x', y', z', t'$. Portanto

$$C_I = \frac{1}{8\mathbf{p}^3} \int_{z'=-\infty}^{z'=+\infty} \int_{y'=-\infty}^{y'=+\infty} \int_{x'=-\infty}^{x'=+\infty} F(x', y', z') \int_{\mathbf{b}_1=-\infty}^{\mathbf{b}_1=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1 x} \int_{\mathbf{b}_2=-\infty}^{\mathbf{b}_2=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2 y} \int_{\mathbf{b}_3=-\infty}^{\mathbf{b}_3=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3 z} * \quad (7.25)$$

$$* e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t + i\mathbf{b}_1 x' + i\mathbf{b}_2 y' + i\mathbf{b}_3 z'} d\mathbf{b}_3 d\mathbf{b}_2 d\mathbf{b}_1 dx' dy' dz'$$

As integrais em $\mathbf{b}_3, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_1$, pode ser escritas

Empregando-se a tabela de integrais relevantes apresentadas anteriormente

$$I_1 = \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{K_x t}} \exp\left\{\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4K_x t}\right\} \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{K_y t}} \exp\left[-\frac{(y-y')^2}{4K_y t}\right] \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{K_z t}} \exp\left[-\frac{(z-z')^2}{4K_z t}\right] \quad (7.26)$$

ou

$$I_1 = \sqrt{\frac{\mathbf{p}^3}{K_x K_y K_z t^3}} \exp\left\{\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4K_x t}\right\} \exp\left[-\frac{(y-y')^2}{4K_y t}\right] \exp\left[-\frac{(z-z')^2}{4K_z t}\right] \quad (7.27)$$

Substituindo I_1 em C_I

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z t^3}} \int_{z'=-\infty}^{z'=+\infty} \int_{y'=-\infty}^{y'=+\infty} \int_{x'=-\infty}^{x'=+\infty} F(x', y', z') \exp\left\{\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4K_x t}\right\} \exp\left[-\frac{(y-y')^2}{4K_y t}\right] * \quad (7.28)$$

$$* \exp\left[-\frac{(z-z')^2}{4K_z t}\right] dx' dy' dz'$$

- Para o segundo termo do segundo membro

$$C_2 = \frac{1}{8\mathbf{p}^3} \int_{\mathbf{b}_1=-\infty}^{\mathbf{b}_1=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1 x} \int_{\mathbf{b}_2=-\infty}^{\mathbf{b}_2=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2 y} \int_{\mathbf{b}_3=-\infty}^{\mathbf{b}_3=+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3 z} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t} * \int_0^t \overline{\overline{\overline{G}}} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t'} dt' d\mathbf{b}_3 d\mathbf{b}_2 d\mathbf{b}_1 \quad (7.29)$$

com

$$\overline{\overline{\overline{G}}} = \overline{\overline{\overline{G}}}(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G e^{i\mathbf{b}_1 x'} e^{i\mathbf{b}_2 y'} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dx' dy' dz' \quad (7.30)$$

Então

$$C_2 = \frac{1}{8\mathbf{p}^3} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1 x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2 y} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3 z} e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t} * \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G e^{i\mathbf{b}_1 x'} e^{i\mathbf{b}_2 y'} e^{i\mathbf{b}_3 z'} dx' dy' dz' e^{-(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2)t'} dt' d\mathbf{b}_3 d\mathbf{b}_2 d\mathbf{b}_1 \quad (7.31)$$

Agrupando os expoentes da equação anterior de forma mais apropriada

$$\begin{aligned} & -i\mathbf{b}_1 x - i\mathbf{b}_2 y - i\mathbf{b}_3 z - \left(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2 \right) t + i\mathbf{b}_1 x' + i\mathbf{b}_2 y' + i\mathbf{b}_3 z' + \\ & + \left(-i\mathbf{b}_1 U + K_x \mathbf{b}_1^2 + K_y \mathbf{b}_2^2 + K_z \mathbf{b}_3^2 \right) t' = \\ & i\mathbf{b}_1 (-x + x' + Ut - Ut') + \mathbf{b}_1^2 (-K_x t + K_x t') + i\mathbf{b}_2 (-y + y') + \mathbf{b}_2^2 (-K_y t + K_y t') + \\ & + i\mathbf{b}_3 (-z + z') + \mathbf{b}_3^2 (-K_z t + K_z t') = \\ & -i\mathbf{b}_1 (x - x') + i\mathbf{b}_1 U (t - t') - \mathbf{b}_1^2 K_x (t - t') - i\mathbf{b}_2 (y - y') - \mathbf{b}_2^2 K_y (t - t') - \\ & - i\mathbf{b}_3 (z - z') - \mathbf{b}_3^2 K_z (t - t') \end{aligned} \quad (7.32)$$

Seja I_2 a seguinte expressão

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{b}_1[(x-x')-U(t-t')]-\mathbf{b}_1^2 K_x(t-t')} d\mathbf{b}_1 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{b}_2(y-y')-\mathbf{b}_2^2 K_y(t-t')} d\mathbf{b}_2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{b}_3(z-z')-\mathbf{b}_3^2 K_z(t-t')} d\mathbf{b}_3 \quad (7.33)$$

Empregando-se novamente a tabela de integrais relevantes, resulta

$$I_2 = \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{K_x(t-t')}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{K_y(t-t')}} \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} * \\ * \sqrt{\frac{\mathbf{p}}{K_z(t-t')}} \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} \quad (7.34)$$

Portanto

$$C_2 = \frac{I}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x', y', z', t') \frac{I}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} * \\ * \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} dx' dy' dz' dt' \quad (7.35)$$

Consequentemente a solução final é dada por: $C = C_1 + C_2$, ou seja

$$\begin{aligned}
C(x, y, z, t) = & \frac{1}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z t^3}} \int_{z'=-\infty}^{z'+\infty} \int_{y'=-\infty}^{y'+\infty} \int_{x'=-\infty}^{x'+\infty} F(x', y', z') \exp\left\{\frac{[(x-x')-Ut]^2}{4K_x t}\right\} * \\
& * \exp\left[-\frac{(y-y')^2}{4K_y t}\right] \exp\left[-\frac{(z-z')^2}{4K_z t}\right] dx' dy' dz' + \\
& + \frac{1}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x', y', z', t') \frac{1}{(t-t')^{3/2}} * \\
& * \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} * \\
& * \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} dx' dy' dz' dt'
\end{aligned} \tag{7.36}$$

A função $C(x, y, z, t)$ é composta por dois termos: um referente à influência da condição inicial e outro referente à influência do termo fonte/sumidouro. Conhecidas estas funções pode-se obter a solução analítica do problema, se as integrais envolvidas apresentarem soluções conhecidas. Caso contrário, estas integrais podem ser resolvidas numericamente.

7.2 Exemplos de Aplicação

7.2.1 Aplicação Pontual Instantânea de uma Massa M em uma Região Inicialmente Apresentando Concentração Nula.

Neste caso

- Termo fonte/sumidouro: $G(x, y, z, t) = M\mathbf{d}(x)\mathbf{d}(y)\mathbf{d}(z)\mathbf{d}(t)$ (7.37)

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

a) Cálculo de C_I : como $F(x, y, z) = 0$, então $C_I = 0$.

b) Cálculo de C :

$$C = \frac{1}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} M\mathbf{d}(x')\mathbf{d}(y')\mathbf{d}(z')\mathbf{d}(t') \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} * \\ * \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} dx' dy' dz' dt'$$

(7.38)

ou

$$C = \frac{M}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{\mathbf{d}(t')}{(t-t')^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(z') \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} dz' \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(y') \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} dy' * \\ * \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(x') \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} dx' dt'$$

(7.39)

Segundo as propriedades da função delta de Dirac, tem-se

$$C = \frac{M}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{\mathbf{d}(t')}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[x-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{z^2}{4K_z(t-t')}\right\} dt'$$

(7.40)

Portanto

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z t^3}} \exp\left[-\frac{(x-Ut)^2}{4K_x t}\right] \exp\left(-\frac{y^2}{4K_y t}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{4K_z t}\right) \quad (7.41)$$

Esta solução, já conhecida anteriormente, mostra uma pluma resultante do despejo pontual instantâneo de uma massa M , espalhando-se de forma gaussiana ao longo das três direções espaciais.

7.2.2 Aplicação Pontual de Massa Segundo uma Taxa Temporal Constante Q em uma Região Inicialmente Apresentando Concentração Nula.

7.2.2.1 Solução Geral Para o Espaço Infinito com Emissão em $z = H$

Neste caso

- Termo fonte/sumidouro: $G(x, y, z, t) = Q \mathbf{d}(x) \mathbf{d}(y) \mathbf{d}(z - H)$ (7.42)

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

a) Cálculo de C_1 : como $F(x, y, z) = 0$, então $C_1 = 0$.

b) Cálculo de $C_2 = C$

$$C = \frac{1}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Q \mathbf{d}(x') \mathbf{d}(y') \mathbf{d}(z' - H) \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\}^* \\ * \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} dx' dy' dz' dt'$$
 (7.43)

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(z' - H) \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} dz' \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(y') \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} dy' * \\ * \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(x') \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} dx' dt'$$
 (7.44)

Segundo a propriedade 2 da função delta de Dirac, tem-se

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[x-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} dt'$$
 (7.45)

Fazendo a mudança de variável seguinte para facilitar a integração

$$\mathbf{q} = t - t' \Rightarrow -d\mathbf{q} = dt' \quad (7.46)$$

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{\mathbf{q}^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(x-U\mathbf{q})^2}{4K_x \mathbf{q}}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y \mathbf{q}}\right\} \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z \mathbf{q}}\right\} d\mathbf{q} \quad (7.47)$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \exp\left\{\frac{xU}{2K_x}\right\} \int_0^t \frac{1}{\mathbf{q}^{3/2}} \exp\left\{-\frac{U^2 \mathbf{q}}{4K_x}\right\} \exp\left\{-\frac{1}{\mathbf{q}} \left[\frac{x^2}{4K_x} + \frac{y^2}{4K_y} + \frac{(z-H)^2}{4K_z} \right]\right\} d\mathbf{q} \quad (7.48)$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \exp\left\{\frac{xU}{2K_x}\right\} \int_0^t \frac{1}{\mathbf{q}^{3/2}} \exp\left(-a_c^2 \mathbf{q} - \frac{b_c^2}{\mathbf{q}}\right) d\mathbf{q} \quad (7.49)$$

onde

$$a_c^2 = \frac{U^2}{4K_x} \quad (7.50)$$

e

$$b_c^2 = \frac{x^2}{4K_x} + \frac{y^2}{4K_y} + \frac{(z-H)^2}{4K_z} \quad (7.51)$$

Então, usando a tabela de integrais anteriormente apresentada

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z}} \frac{1}{2b_c} \exp\left(\frac{xU}{2K_x}\right) * \left[e^{-2a_c b_c} \operatorname{erf}\left(a_c \sqrt{t} - \frac{b_c}{\sqrt{t}}\right) + e^{-2a_c b_c} - e^{2a_c b_c} \operatorname{erf}\left(a_c \sqrt{t} + \frac{b_c}{\sqrt{t}}\right) + e^{2a_c b_c} \right] \quad (7.52)$$

7.2.2.2 Solução Para $U = 0$

Neste caso $a_c = 0$ e b_c não se altera. Assim, a Equação 7.52 se transforma em

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z}} \frac{1}{2b_c} \left[\operatorname{erf}\left(-\frac{b_c}{\sqrt{t}}\right) + 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{b_c}{\sqrt{t}}\right) + 1 \right] \quad (7.53)$$

Utilizando as propriedades da função $\operatorname{erf}(x)$ e a definição de $\operatorname{erfc}(x)$ pode-se escrever que

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z}} \frac{1}{b_c} \operatorname{erfc}\left(\frac{b_c}{\sqrt{t}}\right) \quad (7.54)$$

Uma observação importante com relação à esta solução é que ela existe mesmo quando $U = 0$. Este fato será referenciado mais adiante.

7.2.2.3 Solução Para Regime Permanente

Para o caso particular de $t \rightarrow \infty$, a solução completa para este caso transforma-se na seguinte equação

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z} \left[\frac{x^2}{4K_x} + \frac{y^2}{4K_y} + \frac{(z-H)^2}{4K_z} \right]} \exp\left(\frac{xU}{2K_x}\right) \exp(-2a_c b_c) \quad (7.55)$$

onde

$$2a_c b_c = \frac{2U}{\sqrt{4K_x}} \sqrt{\frac{x^2}{4K_x} + \frac{y^2}{4K_y} + \frac{(z-H)^2}{4K_z}} \quad (7.56)$$

Assim, esta solução pode ser reescrita como

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64p^2 K_x K_y K_z \left[\frac{x^2}{4K_x} + \frac{y^2}{4K_y} + \frac{(z-H)^2}{4K_z} \right]}} \exp \left[\frac{xU}{2K_x} - \frac{2U}{\sqrt{4K_x}} \sqrt{\frac{x^2}{4K_x} + \frac{y^2}{4K_y} + \frac{(z-H)^2}{4K_z}} \right] \quad (7.57)$$

ou

$$C = \frac{Q}{4p \sqrt{K_x K_y K_z \left[\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{(z-H)^2}{K_z} \right]}} \exp \left\{ \frac{Ux}{2K_x} - \sqrt{\frac{U^2}{4K_x} \left[\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{(z-H)^2}{K_z} \right]} \right\} \quad (7.58)$$

Vale observar que para meio isotrópico e $H = 0$, a equação anterior transforma-se em

$$C = \frac{Q}{4pK \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \exp \left\{ \frac{Ux}{2K} - \frac{U}{2K} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \right\} \quad (7.59)$$

a qual coincide com a Equação 13.70 apresentada por Seinfeld (1986).

Seja

$$\frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{(z-H)^2}{K_z} = \frac{1}{K_x} \left[x^2 + \left(\frac{K_x}{K_y} \right) y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z} \right) (z-H)^2 \right] = \frac{r^2}{K_x} \quad (7.60)$$

onde

$$r^2 = x^2 + \left(\frac{K_x}{K_y} \right) y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z} \right) (z-H)^2 \quad (7.61)$$

Então, para $U > 0$

$$C = \frac{Q}{4pr\sqrt{K_y K_z}} \exp\left\{-\frac{U}{2K_x}(r-x)\right\} \quad (7.62)$$

7.2.2.4 Solução Para Pontos Próximos do Eixo da Pluma – Pluma Gaussiana

O modelo de pluma gaussiana apresentado no início deste trabalho pode ser obtido desta solução se forem adotadas algumas aproximações adicionais para pontos localizados próximos ao centro da pluma.

- Primeira Aproximação:

Como

$$r^2 = x^2 + \left(\frac{K_x}{K_y}\right)y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z}\right)(z-H)^2 \Rightarrow r = x\sqrt{1 + \frac{\left(\frac{K_x}{K_y}\right)y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z}\right)(z-H)^2}{x^2}} \quad (7.63)$$

Supondo que $K_x \approx K_y \approx K_z$, ou seja, meio aproximadamente isotrópico, e que sejam considerados somente pontos próximos o eixo da pluma, ou seja

$$\frac{y^2 + (z-H)^2}{x^2} \ll 1 \quad (7.64)$$

então, o termo sob a raiz quadrada pode ser aproximado segundo uma série de Taylor, produzindo

$$r = x\sqrt{1 + \frac{\left(\frac{K_x}{K_y}\right)y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z}\right)(z-H)^2}{x^2}} \approx x\left[1 + \frac{\left(\frac{K_x}{K_y}\right)y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z}\right)(z-H)^2}{2x^2}\right] \quad (7.65)$$

Consequentemente

$$r - x \approx \frac{\left(\frac{K_x}{K_y}\right)y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z}\right)(z - H)^2}{2x} \quad (7.66)$$

- Segunda Aproximação: no denominador da solução para C , utilizando-se novamente a hipótese de considerar somente pontos muito próximos do centro da pluma, pode-se escrever que

$$r - x \approx x \quad (7.67)$$

Portanto

$$C = \frac{Q}{4px\sqrt{K_y K_z}} \exp \left\{ -\frac{U}{2K_x} \left[\frac{\left(\frac{K_x}{K_y}\right)y^2 + \left(\frac{K_x}{K_z}\right)(z - H)^2}{2x} \right] \right\} \quad (7.68)$$

ou

$$C = \frac{Q}{4px\sqrt{K_y K_z}} \exp \left\{ -\frac{U}{4x} \left[\frac{y^2}{K_y} + \frac{(z - H)^2}{K_z} \right] \right\} \quad (7.69)$$

É interessante observar que, adotando-se estas hipóteses, o termo de difusão longitudinal K_x desaparece da solução, indicando que o efeito advectivo prevalece sobre o efeito difusivo na direção longitudinal para pontos próximos do eixo da pluma.

Se a equação anterior for comparada com a função densidade de probabilidade de Gauss, pode-se escrever que

$$s_y^2 = 2 \frac{x}{U} K_y \quad (7.70)$$

e

$$s_z^2 = 2 \frac{x}{U} K_z \quad (7.71)$$

de modo que

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2pUs_y s_z} \exp\left\{-\frac{1}{2} \left[\frac{y^2}{s_y^2} + \frac{(z-H)^2}{s_z^2} \right]\right\} \quad (7.72)$$

A equação anterior tem a mesma forma que o modelo gaussiano introduzido no início deste trabalho para espaço infinito, mas apresenta uma distinção fundamental. Esta equação foi deduzida com base, dentre outras, na hipótese de que todos os coeficientes de difusão são constantes, não necessariamente iguais entre si. Conseqüentemente, de acordo com as equações anteriores para os desvio-padrão, verifica-se que tanto s_y como s_z variam com \sqrt{x} . Todavia, tanto a formulação da Pasquill-Gifford como a de Briggs para os parâmetros de dispersão, não apresentam este tipo de variação, o que acarreta uma inconsistência no modelo da pluma gaussiana.

Em outras palavras, para que a solução gaussiana apareça como resultado do processo de integração da equação de difusão-advectiva é necessário que, entre outras coisas, K_y e K_z sejam constantes para que tanto s_y como s_z variem com \sqrt{x} . Por outro lado, se tanto s_y como s_z não variam com \sqrt{x} , então K_y e K_z não são constantes e a integração da equação de difusão-advectiva não produz solução gaussiana.

Dessa forma, deve-se encarar o modelo de pluma gaussiana, conforme apresentado no início deste trabalho, como um modelo semi-empírico, no qual a forma da solução foi adotada com base em resultados teóricos, mas foram acrescentados termos empíricos de correção em s_y e em s_z para melhor aproximar seus resultados de dados observados.

Outro aspecto importante desta solução aproximada é que ela não existe para $U = 0$, em contraste com a solução não simplificada. Como, na solução simplificada o efeito de K_x desaparece, então, se $U = 0$ também, não existe transporte longitudinal advectivo e difusivo, o que contraria a existência real de transporte de poluente na direção longitudinal.

7.2.2.5 Estimativa do Erro da Solução Gaussiana Para Pontos Próximos do Eixo da Pluma

A solução aproximada para pontos próximos do eixo da pluma deve produzir erros à medida em que são considerados pontos mais afastados deste eixo. Assim, apresenta-se a seguir uma estimativa desse erro para uma situação simplificada de turbulência isotrópica e homogênea, ou seja, $K_x = K_y = K_z = K$ e para $H = 0$.

A equação que corresponde à solução teórica é repetida e renomeada a seguir

$$C_{Teor} = \frac{Q}{4prK} \exp\left\{-\frac{U}{2K}(r-x)\right\} \quad (7.73)$$

Analogamente, a solução gaussiana, que é uma aproximação para pontos próximos do eixo da pluma é também repetida e renomeada a seguir

$$C_{Gauss} = \frac{Q}{4pxK} \exp\left[-\frac{U}{4Kx}(y^2 + z^2)\right] = \frac{Q}{4pxK} \exp\left[-\frac{U}{4Kx}(r^2 - x^2)\right] \quad (7.74)$$

A relação entre as duas soluções é dada por

$$\frac{C_{Teor}}{C_{Gauss}} = \frac{\frac{Q}{4prK} \exp\left\{-\frac{U}{2K}(r-x)\right\}}{\frac{Q}{4pxK} \exp\left[-\frac{U}{4Kx}(r^2 - x^2)\right]} \quad (7.75)$$

ou

$$\frac{C_{Teor}}{C_{Gauss}} = \frac{\exp\left[\frac{Pe}{4}\left(\frac{r}{x} - 1\right)^2\right]}{\left(\frac{r}{x}\right)} \quad (7.76)$$

onde

$$Pe = \frac{Ux}{K} \quad (7.77)$$

é denominado número de Péclet e mede a intensidade relativa entre os efeitos advectivos e difusivos no transporte de poluentes.

No caso em que $H = 0$, r é a magnitude do vetor que sai da origem do sistema de coordenadas até um ponto qualquer, enquanto que x é a coordenada horizontal do mesmo ponto. Portanto, r/x é uma medida do afastamento desse ponto do centro da pluma.

A Figura 7.1 mostra o comportamento da relação entre as duas soluções para alguns valores de Pe .

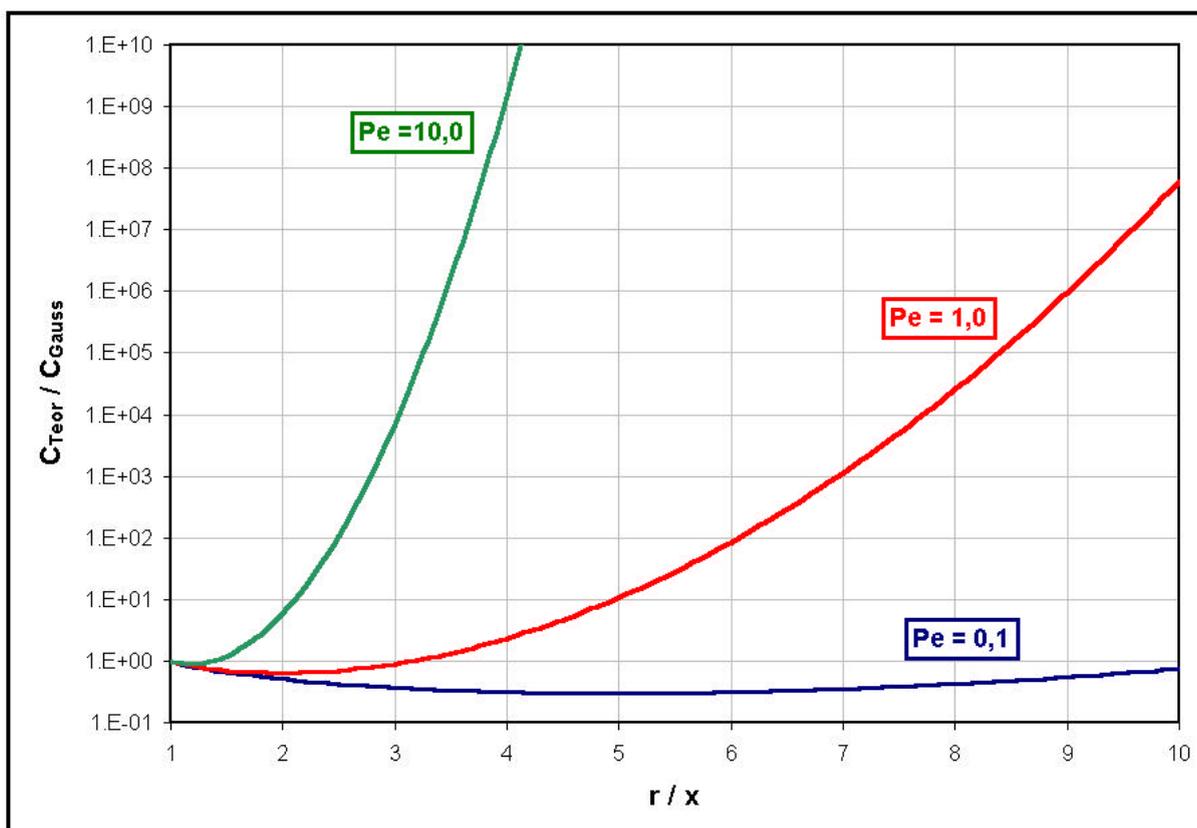


Figura 7.1 – Comportamento da relação C_{Teor} / C_{Gauss} em função de r/x para diferentes valores do número de Péclet Pe .

De acordo com a Figura 7.1 verifica-se que este erro pode atingir várias ordens de magnitude, principalmente para valores maiores de Pe e de r/x .

Para $Pe = 0,1$ observa-se a tendência de que esta relação esteja entre 0,1 e 1,0, significando que a aproximação gaussiana teórica superestima as concentrações fora do eixo da pluma, pelo menos no intervalo $1 \leq r/x \leq 10$.

Para $Pe = 1,0$, existe uma ligeira superestimação da aproximação gaussiana teórica no intervalo $1 < r/x < 3$. Para valores maiores de r/x ocorre uma subestimação dessa aproximação, crescendo várias ordens de magnitude para valores crescentes de r/x , ou seja, para pontos mais afastados do eixo da pluma.

Quando $Pe = 10,0$ esta subestimação fica ainda mais crítica, apresentando erros enormes mesmo para valores relativamente pequenos de r/x .

De acordo com estas observações, pode-se concluir que a solução gaussiana teórica tende a subestimar as concentrações com relação à solução que não considera as aproximações adotadas para a obtenção da pluma gaussiana para

- Valores maiores de r/x , ou seja, pontos mais distantes do eixo da pluma;
- Valores maiores de Pe , o que significa ou pontos situados mais afastados do ponto de emissão e/ou valores elevados para a relação U/K .

Embora esta seja uma análise simplificada pode-se inferir que a aproximação da pluma gaussiana apresenta um potencial de produzir grandes erros teóricos para pontos afastados do eixo da pluma, sem que haja um ganho computacional aparente, ou de outra espécie, em sua adoção. Tal fato pode ter implicações práticas significativas, pois vários modelos de simulação da qualidade do ar, que adotam a aproximação gaussiana, são empregados em estudos de análise de risco, podendo existir uma subestimação significativa das concentrações simuladas.

7.2.2.6 Solução Para o Espaço Semi-Infinito com $z \geq 0$

Esta solução corresponde ao caso em que a emissão é limitada pela presença de uma barreira horizontal ao transporte vertical de poluente como, por exemplo, a que é imposta pelo solo.

Nesse caso, a adição de uma fonte virtual em $z = -H$ anula o gradiente vertical de concentração em $z = 0$, anulando o fluxo difusivo vertical através do solo. Assim, conforme exposto no item Método das Imagens, a solução para este caso é dada por

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2pUs_y s_z} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{y^2}{s_y^2} + \frac{(z-H)^2}{s_z^2}\right]\right\} + \frac{Q}{2pUs_y s_z} \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{y^2}{s_y^2} + \frac{(z+H)^2}{s_z^2}\right]\right\} \quad (7.78)$$

ou, conforme já introduzido anteriormente em O MODELO DE PLUMA GAUSSIANA

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2pUs_y s_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2s_y^2}\right) \exp\left\{\left[-\frac{(z-H)^2}{2s_z^2}\right] + \left[-\frac{(z+H)^2}{2s_z^2}\right]\right\} \quad (7.79)$$

7.2.2.7 Estimativa dos Coeficientes de Dispersão K_y e K_z

Conforme apresentado anteriormente, existem relações entre os desvios-padrão espaciais das plumas e os coeficientes de dispersão nas direções correspondentes. Estas relações são dadas por

$$s_y^2 = 2 \frac{x}{U} K_y \Rightarrow \frac{K_y}{U} = \frac{s_y^2}{2x} \quad (7.80)$$

e

$$s_z^2 = 2 \frac{x}{U} K_z \Rightarrow \frac{K_z}{U} = \frac{s_z^2}{2x} \quad (7.81)$$

Os valores de s_y e de s_z podem ser estimados através de equações apresentadas anteriormente. A análise apresentada a seguir foi baseada empregando-se as equações de Briggs para a estimação dos valores dos desvios padrão e, conseqüentemente, dos valores dos coeficientes de dispersão divididos por U .

Os resultados obtidos para o caso de áreas rurais estão apresentados a seguir.

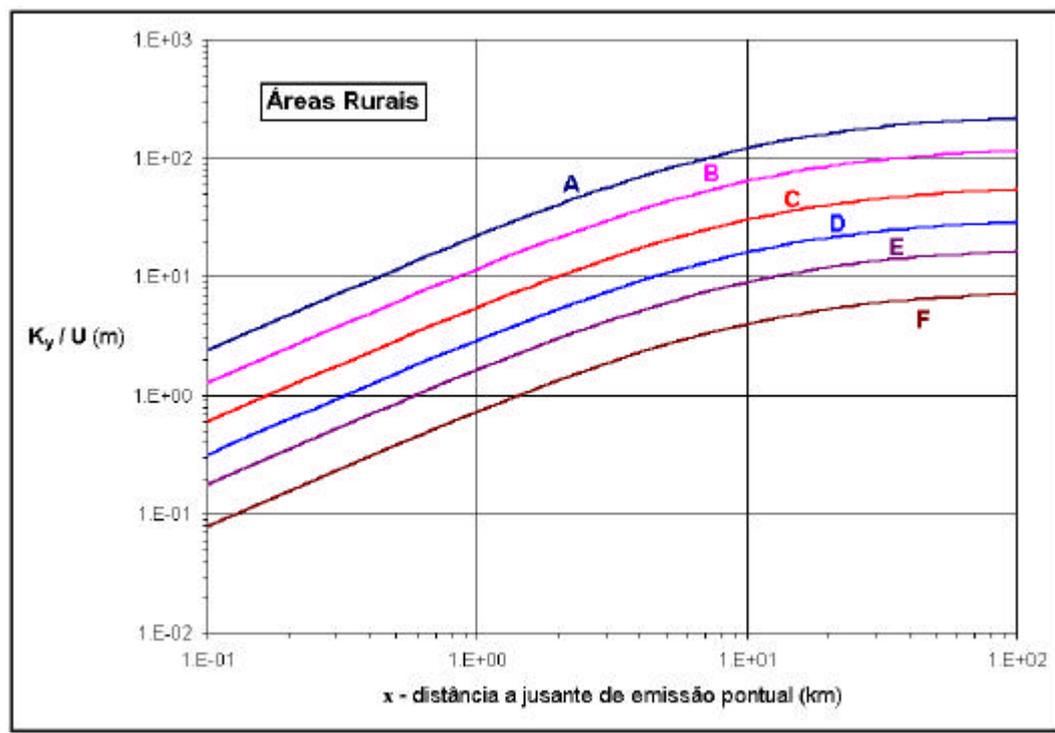


Figura 7.2 - K_y/U segundo o método de Briggs para estimar σ_y para áreas rurais, para as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford.

De acordo com a Figura 7.2, K_y/U para áreas rurais, pode-se observar que

- Em nenhum caso o valor do coeficiente de dispersão apresenta valor constante, mas sim bastante variável com a distancia e com a classe de estabilidade atmosférica;
- Entre a classe F (mais estável) e a classe A (mais instável) existe um aumento de mais de uma ordem de magnitude dos valores do coeficiente de dispersão, para uma mesma distancia.

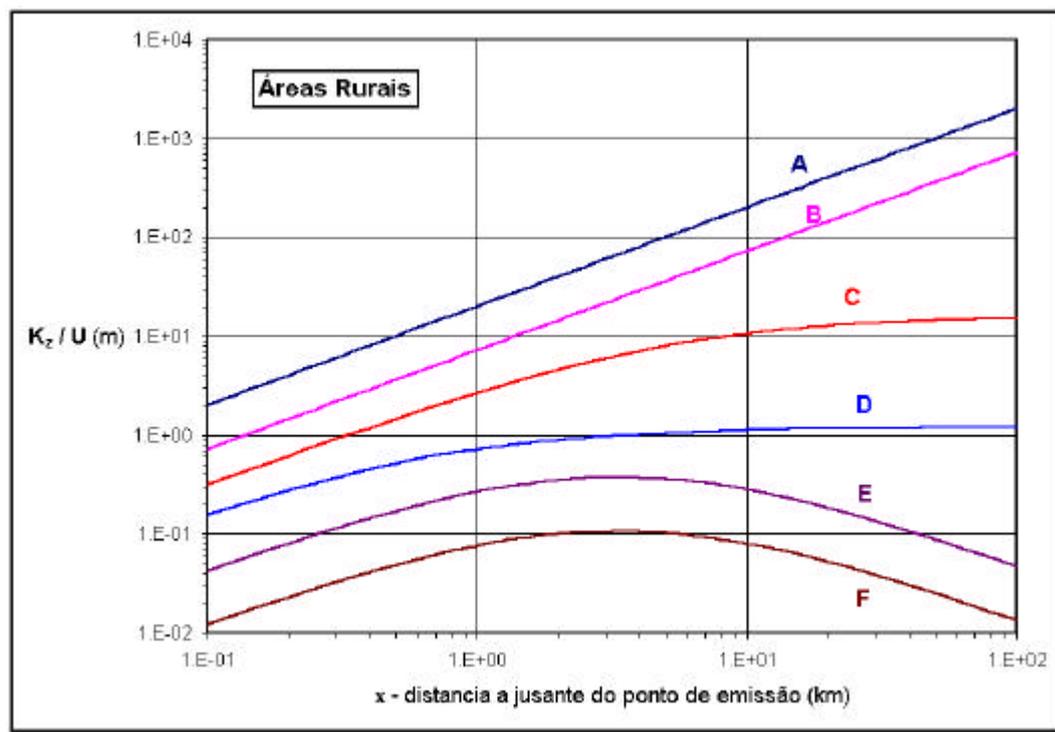


Figura 7.3 - K_z/U segundo o método de Briggs para estimar S_z para áreas rurais, para as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford.

De acordo com a Figura 7.3, K_z/U para áreas rurais, pode-se observar que

- Somente para a classe de estabilidade D observa-se um tendência de o valor do coeficiente de dispersão apresentar valor constante para distancias maiores do que 100 km;
- Entre a classe F (mais estável) e a classe D (neutra) existe um aumento crescente com a distancia, chegando a atingir várias ordens de magnitude dos valores do coeficiente de dispersão, para uma mesma distancia;
- Os curvas encontradas para as classes E e F são inconsistentes, pois apresentam diminuição dos valores dos coeficientes de dispersão para distancias aproximadamente maiores do que 3 km, significando que o poder dispersivo da atmosfera tende a diminuir para distancias maiores, sendo que não foi encontrada uma razão física para explicar tal comportamento.

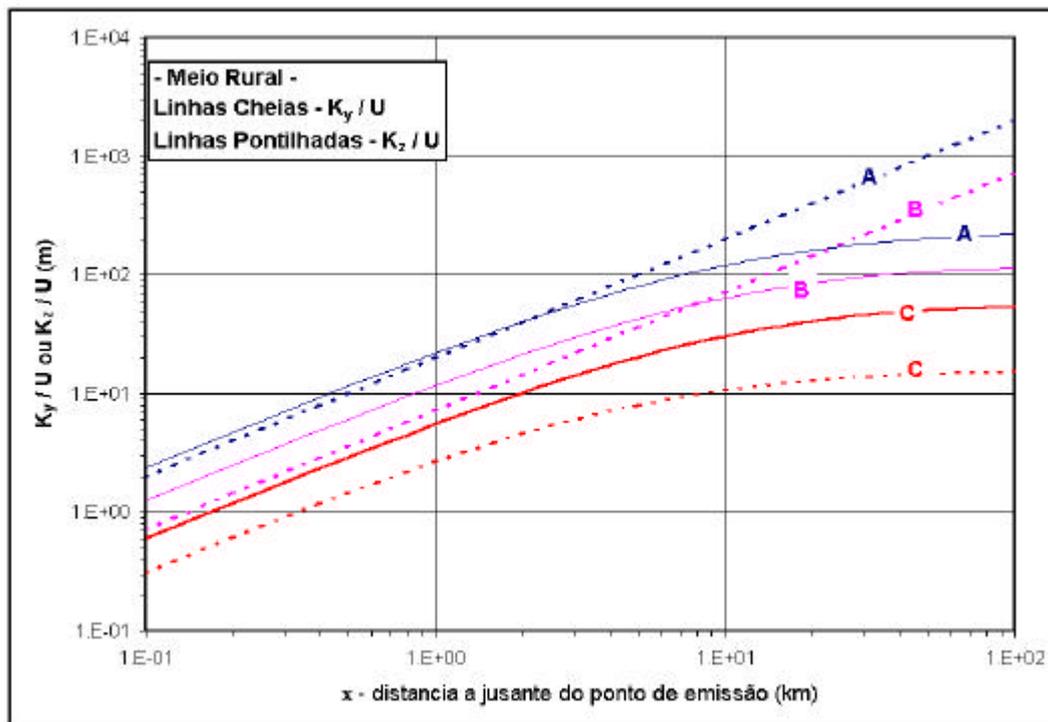


Figura 7.4 – Comparação entre os valores de K_y/U e K_z/U para áreas rurais e classes de estabilidade A, B e C.

De acordo com a Figura 7.4, observa-se que

- Para as classes de estabilidade A e B, os coeficientes de dispersão são relativamente próximos entre si até cerca de 5 km a jusante do ponto de emissão, sendo que para distancias maiores os valores para a direção vertical crescem mais rapidamente do que os valores para a direção transversal horizontal;
- Esta tendência não ocorre para a classe C, havendo um certo paralelismo entre as duas curvas, cujos valores são sempre maiores para K_y do que para K_z .

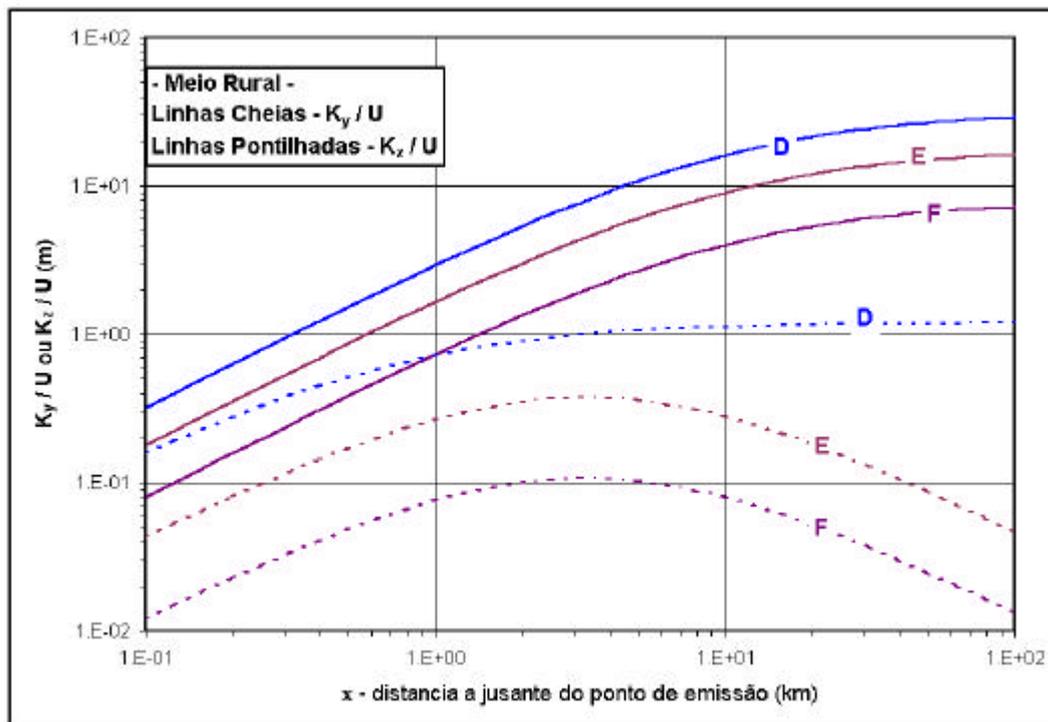


Figura 7.5 – Comparação entre os valores de K_y/U e K_z/U para áreas rurais e classes de estabilidade D, E e F.

De acordo com a Figura 7.5, observa-se que

- Para a classe de estabilidade D, os coeficientes de dispersão afastam-se significativamente entre si com a distancia a jusante, sendo que K_y chega a atingir valores maiores do que uma ordem de magnitude com relação a K_z ;
- Para as classes E e F, constata-se comportamentos muito distintos entre K_y e K_z , principalmente devido ao comportamento potencialmente anômalo de K_z , o que coloca dúvidas sobre esta comparação.

Os resultados obtidos para o caso de áreas urbanas estão apresentados a seguir.

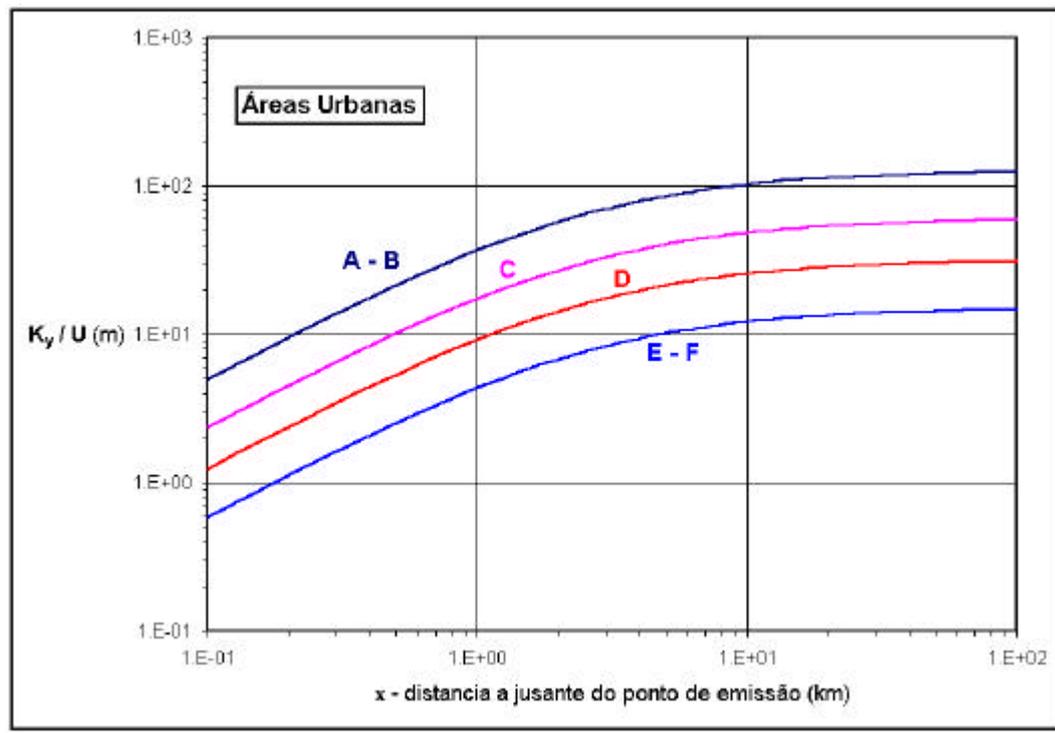


Figura 7.6 - K_y/U segundo o método de Briggs para estimar S_y para áreas urbanas, para as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford.

De acordo com a Figura 7.6, K_y/U para áreas urbanas, pode-se observar que

- Em nenhum caso o valor do coeficiente de dispersão apresenta valor constante, mas sim bastante variável com a distancia e com a classe de estabilidade atmosférica;
- Entre as classes E-F (mais estáveis) e as classes A-B (mais instáveis) existe um aumento de cerca de uma ordem de magnitude dos valores do coeficiente de dispersão, para uma mesma distancia;
- Estes coeficientes tendem para valores aproximadamente maiores do que 1 km.

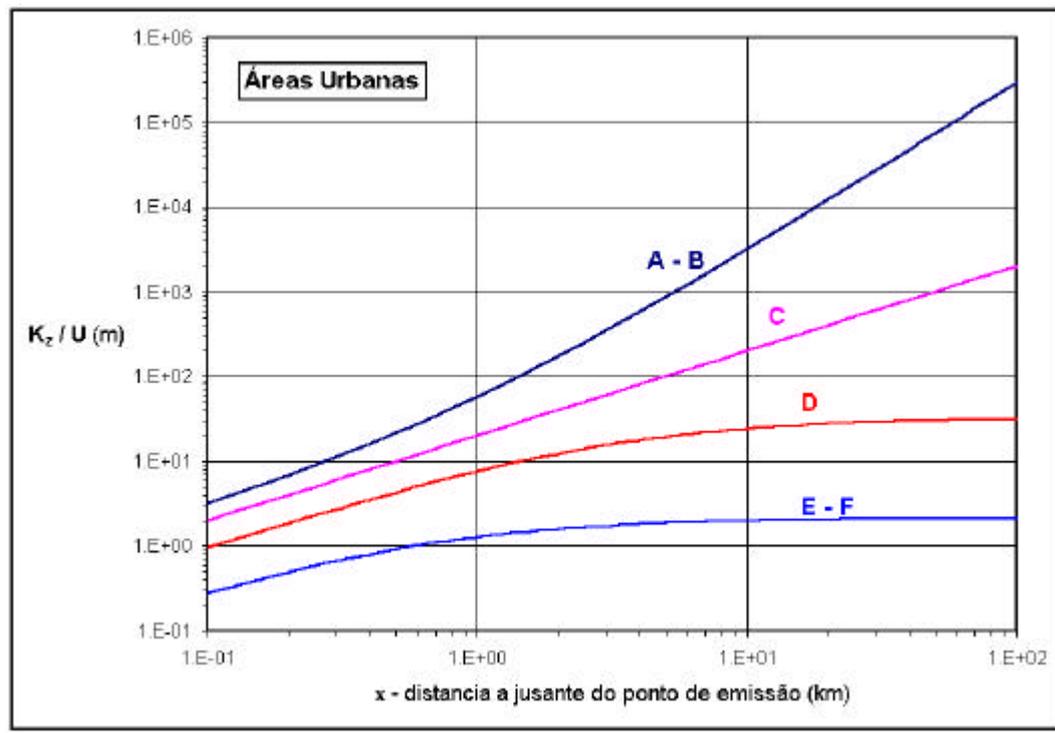


Figura 7.7 - K_z/U segundo o método de Briggs para estimar s_z para áreas urbanas, para as classes de estabilidade de Pasquill-Gifford.

De acordo com a Figura 7.7, K_z/U para áreas urbanas, pode-se observar que

- Somente para as classes de estabilidade D, E e F observa-se um tendência de o valor do coeficiente de dispersão apresentar valor constante para distancias aproximadamente maiores do que 1 km;
- Entre as classes E-F (mais estáveis) e as classes A-B (mais instáveis) existe um aumento crescente com a distancia, chegando a atingir várias ordens de magnitude dos valores do coeficiente de dispersão, para uma mesma distancia;

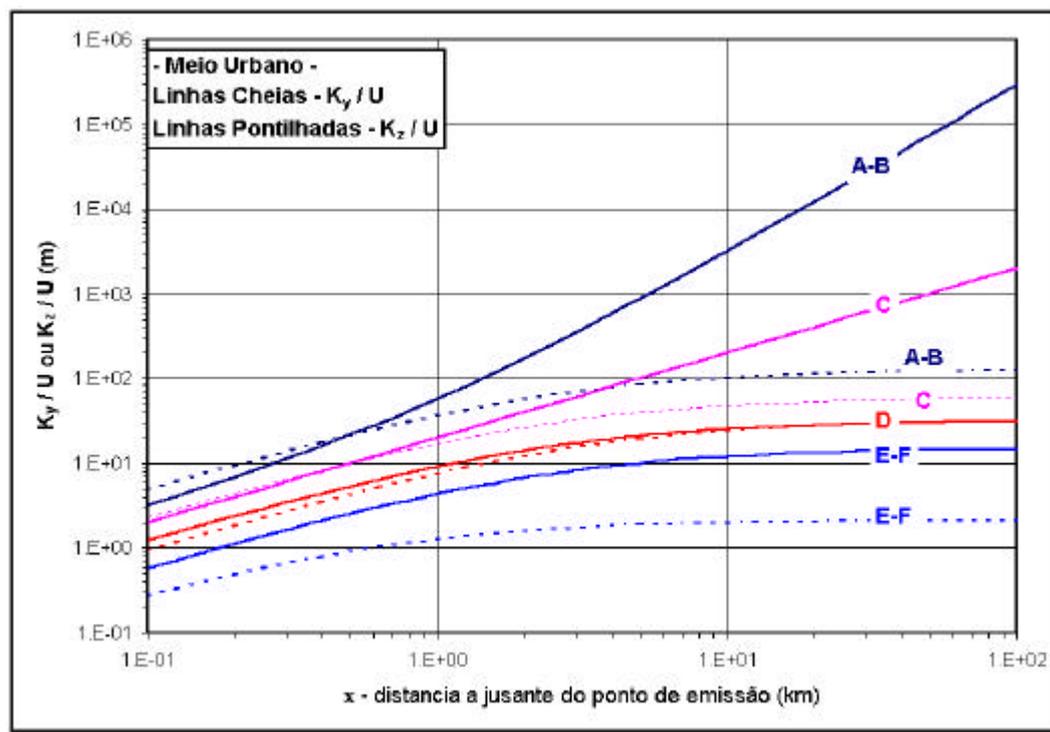


Figura 7.8 – Comparação entre os valores de K_y/U e K_z/U para áreas urbanas e classes de estabilidade A-B, C, D e E-F.

De acordo com a Figura 7.8, observa-se que

- Para as classes de estabilidade A-B constata-se um crescimento maior de K_y sobre K_z , sendo que este último parece tender a valores constantes, enquanto que para valores grandes de x , K_y é cerca de 3 ordens de magnitude maior do que K_z ;
- Para a classe de estabilidade C observa-se uma tendência similar àquela observada para as classes A-B, porém com distanciamentos menores para valores elevados de x ;
- Para a classe de estabilidade D não existem diferenças significativas entre K_y e K_z ;
- Para as classes de estabilidade E-F, volta-se a ter o padrão anterior, ou seja, constata-se um crescimento maior de K_y sobre K_z , atingindo-se uma diferença de cerca de uma ordem de magnitude para valores elevados de x .

7.2.2.8 Estimativa do Coeficiente de Dispersão K_x

O modelo de pluma gaussiana, conforme tradicionalmente apresentado, não depende do conhecimento de K_x , de modo que não foram apresentadas expressões matemáticas para a sua estimação da mesma forma que foram apresentadas para K_y e K_z . Todavia, em modelos discutidos no presente texto, a presença de K_x demanda a necessidade de estimação deste coeficiente.

Uma maneira razoável de estimar K_x pode ser obtida através da hipótese de que este coeficiente deve ter valor próximo de K_y . Uma argumentação física para tanto é apresentada a seguir.

Os vórtices turbulentos que causam a difusão turbulenta nas direções x e y não são geometricamente limitados pela presença de barreiras ao escoamento, tal como acontece com o solo para a direção z . Neste caso, não existe uma razão significativa que faça com que K_y e K_x sejam significativamente distintos entre si. Consequentemente, é razoável adotar-se $K_x \approx K_y$ no presente trabalho, quando isto for necessário.

8 APLICAÇÃO PONTUAL DE MASSA ORIUNDA DE UMA FONTE MÓVEL SEGUNDO UMA TAXA TEMPORAL DE EMISSÃO CONSTANTE Q

8.1 Solução Para o Espaço Infinito

Neste caso, considera-se inicialmente que a descarga ocorre no espaço infinito e na coordenada longitudinal x_f , na coordenada transversal $y = 0$ e na coordenada vertical $z = H$.

Portanto, o termo fonte é dado por

$$G(x, y, z, t) = Q \mathbf{d}(x - x_f) \mathbf{d}(y) \mathbf{d}(z - H) \quad (8.1)$$

Hipótese: a fonte móvel caminha com velocidade constante u_f na direção x , iniciando seu movimento em $t = 0$ e $x = 0$. Portanto

$$x_f = u_f t \quad (8.2)$$

Portanto

$$G(x, y, z, t) = Q \mathbf{d}(x - u_f t) \mathbf{d}(y) \mathbf{d}(z - H) \quad (8.3)$$

- Condição Inicial: $T(-\infty < x < \infty, -\infty < y < \infty, -\infty < z < \infty, t = 0) = F(x, y, z) = 0$

a) Cálculo de C_1 : como $F(x, y, z) = 0$, então $C_1 = 0$.

b) Cálculo de $C_2 = C$:

$$C = \frac{1}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Q \mathbf{d}(y') \mathbf{d}(z' - H) \mathbf{d}(x' - u_f t') \frac{1}{(t - t')^{3/2}} * \\ * \exp\left\{-\frac{[(x - x') - U(t - t')]^2}{4K_x(t - t')}\right\} \exp\left\{-\frac{[(y - y')]^2}{4K_y(t - t')}\right\} \exp\left\{-\frac{[(z - z')]^2}{4K_z(t - t')}\right\} dx' dy' dz' dt' \quad (8.4)$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(z'-H) \exp\left\{-\frac{[(z-z')]^2}{4K_z(t-t')}\right\} dz' \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(y') * \tag{8.5}$$

$$* \exp\left\{-\frac{[(y-y')]^2}{4K_y(t-t')}\right\} dy' \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{d}(x'-u_f t') \exp\left\{-\frac{[(x-x')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} dx' dt'$$

Segundo a propriedade 2 da função delta de Dirac, tem-se

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-u_f t')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} * \tag{8.6}$$

$$* \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt'$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-u_f t+u_f t-u_f t')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} * \tag{8.7}$$

$$* \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt'$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-u_f t+u_f(t-t')-U(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} * \tag{8.8}$$

$$* \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt'$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-u_f t)-(U-u_f)(t-t')]^2}{4K_x(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} * \\ * \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt' \quad (8.9)$$

ou

$$C = \frac{\dot{M}}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{[(x-u_f t)^2 - 2(x-u_f t)(U-u_f)(t-t') + (U-u_f)^2(t-t')^2]}{4K_x(t-t')}\right\} * \\ * \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt' \quad (8.10)$$

ou

$$C = \frac{\dot{M}}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{-(x-u_f t)^2 + 2(x-u_f t)(U-u_f)(t-t') - (U-u_f)^2(t-t')^2}{4K_x(t-t')}\right\} * \\ * \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt' \quad (8.11)$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \exp\left[\frac{2(x-u_f t)(U-u_f)}{4K_x}\right] \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(x-u_f t)^2}{4K_x(t-t')} - \frac{(U-u_f)^2(t-t')}{4K_x}\right\} * \\ * \exp\left\{-\frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')}\right\} \exp\left\{-\frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt' \quad (8.12)$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \exp\left[\frac{2(x-u_f t)(U-u_f)}{4K_x}\right] \int_0^t \frac{1}{(t-t')^{3/2}} * \quad (8.13)$$

$$* \exp\left\{-\frac{(U-u_f)^2(t-t')}{4K_x} - \frac{(x-u_f t)^2}{4K_x(t-t')} - \frac{(z-H)^2}{4K_z(t-t')} - \frac{y^2}{4K_y(t-t')}\right\} dt'$$

Seja

$$\mathbf{q} = t - t' \Rightarrow -d\mathbf{q} = dt' \quad (8.14)$$

Então

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \exp\left[\frac{2(x-u_f t)(U-u_f)}{4K_x}\right] * \quad (8.15)$$

$$\int_0^t \frac{1}{\mathbf{q}^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(U-u_f)^2 \mathbf{q}}{4K_x} - \frac{(x-u_f t)^2}{4K_x \mathbf{q}} - \frac{(z-H)^2}{4K_z \mathbf{q}} - \frac{y^2}{4K_y \mathbf{q}}\right\} d\mathbf{q}$$

ou

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^3 K_x K_y K_z}} \exp\left[\frac{2(x-u_f t)(U-u_f)}{4K_x}\right] * \quad (8.16)$$

$$\int_0^t \frac{1}{\mathbf{q}^{3/2}} \exp\left\{-\frac{(U-u_f)^2 \mathbf{q}}{4K_x} - \frac{1}{\mathbf{q}} \left[\frac{(x-u_f t)^2}{4K_x} + \frac{(z-H)^2}{4K_z} + \frac{y^2}{4K_y}\right]\right\} d\mathbf{q}$$

A integral existente na equação anterior encontra-se tabelada anteriormente neste texto (Equação 5.26), de modo que, para

$$a_f^2 = \frac{(U-u_f)^2}{4K_x} \quad (8.17)$$

e

$$b_f^2 = \frac{(x - u_f t)^2}{4K_x} + \frac{(z - H)^2}{4K_z} + \frac{y^2}{4K_y} \quad (8.18)$$

Então

$$C = \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z}} \left(\frac{1}{2b_f} \right) \exp \left[\frac{(x - u_f t)(U - u_f)}{2K_x} \right] * \quad (8.19)$$

$$* \left[e^{-2a_f b_f} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} - \frac{b_f}{\sqrt{t}} \right) + e^{-2a_f b_f} - e^{2a_f b_f} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} + \frac{b_f}{\sqrt{t}} \right) + e^{2a_f b_f} \right]$$

8.2 Casos Particulares

8.2.1 Solução para $u_f = 0$

Neste caso

$$a_f^2 = \frac{U^2}{4K_x} = a_c^2 \quad (8.20)$$

$$b_f^2 = \frac{x^2}{4K_x} + \frac{y^2}{4K_y} + \frac{(z - H)^2}{4K_z} = b_c^2 \quad (8.21)$$

Substituindo as equações 8.20 e 8.21 na equação 8.19, resulta a equação 7.52, que corresponde à solução para o caso de fonte emissora estacionária, tal como deveria ser.

8.2.2 Solução para $U = 0$ e $u_f \neq 0$

Ao contrário do modelo de pluma gaussiana a solução em foco existe para $U = 0$. Isto decorre do fato de ter sido considerado o efeito da dispersão longitudinal.

8.3 Solução Para o Espaço Semi-Infinito com $z \geq 0$

Esta solução corresponde ao caso em que a emissão é limitada pela presença de uma barreira horizontal ao transporte vertical de poluente como, por exemplo, a que é imposta pelo solo. Nesse caso, a adição de uma fonte virtual em $z = -H$ anula o gradiente vertical de concentração em $z = 0$, anulando o fluxo difusivo vertical através do solo. Esta solução é obtida da mesma forma que o caso análogo para uma fonte emissora fixa com vazão constante. Portanto

$$\begin{aligned}
 C = & \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z}} \left(\frac{1}{2b_f} \right) \exp \left[\frac{(x - u_f t)(U - u_f)}{2K_x} \right] * \\
 & * \left[e^{-2a_f b_f} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} - \frac{b_f}{\sqrt{t}} \right) + e^{-2a_f b_f} - e^{2a_f b_f} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} + \frac{b_f}{\sqrt{t}} \right) + e^{2a_f b_f} \right] \\
 + & \\
 & \frac{Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z}} \left(\frac{1}{2b_f} \right) \exp \left[\frac{(x - u_f t)(U - u_f)}{2K_x} \right] * \\
 & * \left[e^{-2a_f b_v} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} - \frac{b_v}{\sqrt{t}} \right) + e^{-2a_f b_v} - e^{2a_f b_v} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} + \frac{b_v}{\sqrt{t}} \right) + e^{2a_f b_v} \right]
 \end{aligned} \tag{8.22}$$

onde

$$b_v^2 = \frac{(x - u_f t)^2}{4K_x} + \frac{(z + H)^2}{4K_z} + \frac{y^2}{4K_y} \tag{8.23}$$

8.3.1 Caso Particular: Emissão Efetuada no Nível do Solo

Neste caso $H = 0$ e $b_f = b_v$. Assim, a equação 8.22 toma o seguinte aspecto

$$C = \frac{2Q}{\sqrt{64\mathbf{p}^2 K_x K_y K_z}} \left(\frac{1}{2b_f} \right) \exp \left[\frac{(x - u_f t)(U - u_f)}{2K_x} \right] * \left[e^{-2a_f b_f} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} - \frac{b_f}{\sqrt{t}} \right) + e^{-2a_f b_f} - e^{2a_f b_f} \operatorname{erf} \left(a_f \sqrt{t} + \frac{b_f}{\sqrt{t}} \right) + e^{2a_f b_f} \right] \quad (8.24)$$

8.3.2 Estudo de Caso – Avaliação Numérica

Devido ao número de variáveis envolvidas na solução deste problema apresenta-se uma avaliação de respostas típicas desta solução para alguns valores numéricos adotados para estas variáveis, conforme detalhado a seguir.

Foram adotados os seguintes valores para algumas das variáveis, conforme indicado na Tabela 8.1.

Variável	Unidade	Valor	Observação
Q	(kg/s)	1,0	Q não afeta a forma da solução, somente a escala
$K_x = K_y = K_z$	(m ² /s)	1,0	Meio isotrópico
H	(m)	0,0	Emissão efetuada no solo
y	(m)	0,0	Receptor localizado 1 m acima do solo, no centro da pluma
z	(m)	1,0	

Tabela 8.1 – Dados adotados para as simulações do estudo de caso.

A Figura 8.1 mostra os resultados obtidos na ausência de vento ($U = 0$) para uma fonte móvel com $u_f = 10$ m/s e para diferentes instantes de tempo. Os resultados apresentados nesta figura sugerem que

- A concentração de pico é a mesma para todos os instantes;
- As caudas na parte posterior de cada pluma aumentam para valores maiores de t devido à maior quantidade de massa emitida;
- A parte frontal da pluma é praticamente inexistente nesses casos, indicando que o efeito advectivo é muito mais intenso do que o efeito dispersivo na direção longitudinal;

- A concentração de pico ocorre para valores de x ligeiramente menores do que $u_f t$ devido à ação da dispersão longitudinal;
- A pluma é extremamente assimétrica na direção x devido ao movimento da fonte;
- A ausência de regime permanente nesta solução é graficamente evidente.

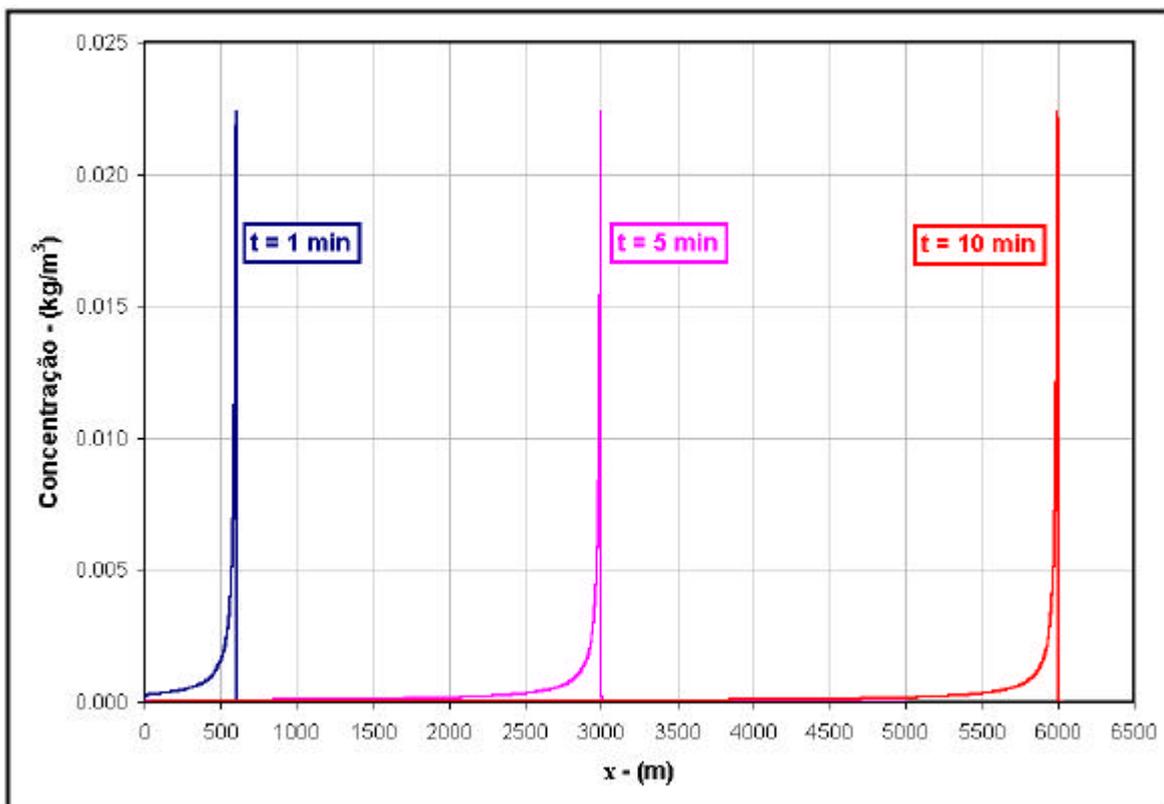


Figura 8.1 – Perfis longitudinais de concentração para instantes distintos empregando-se os dados da Tabela 8.1, $U = 0$ e $u_f = 10$ m/s.

A Figura 8.2 mostra os resultados obtidos na presença de vento com velocidade do vento U igual a velocidade de uma fonte móvel ($u_f = 10$ m/s) e para diferentes instantes de tempo.

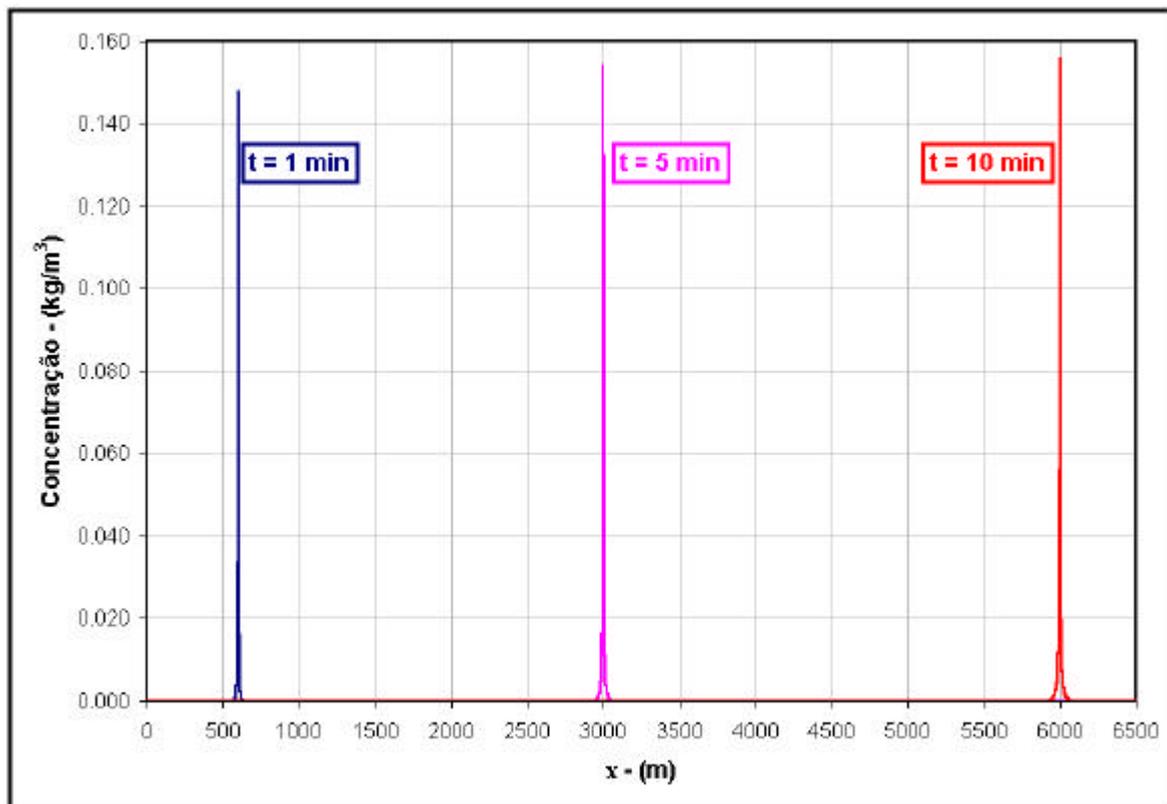


Figura 8.2 – Perfis longitudinais de concentração para instantes distintos empregando-se os dados da Tabela 8.1 e $U = u_f = 10$ m/s.

Os resultados apresentados na Figura 8.2 sugerem que

- A concentração de pico aumenta com o tempo devido à contínua injeção de massa;
- As caudas da solução são simétricas na direção longitudinal em relação à posição instantânea da fonte emissora;
- As concentrações de pico são muito maiores quando comparadas àquelas obtidas na ausência de vento;
- Também neste caso a ausência de regime permanente nesta solução é graficamente evidente.

A Figura 8.3 mostra os resultados obtidos na presença de vento mais rápido do que a fonte móvel, com $U = 20$ m/s e com $u_f = 10$ m/s e para diferentes instantes de tempo.

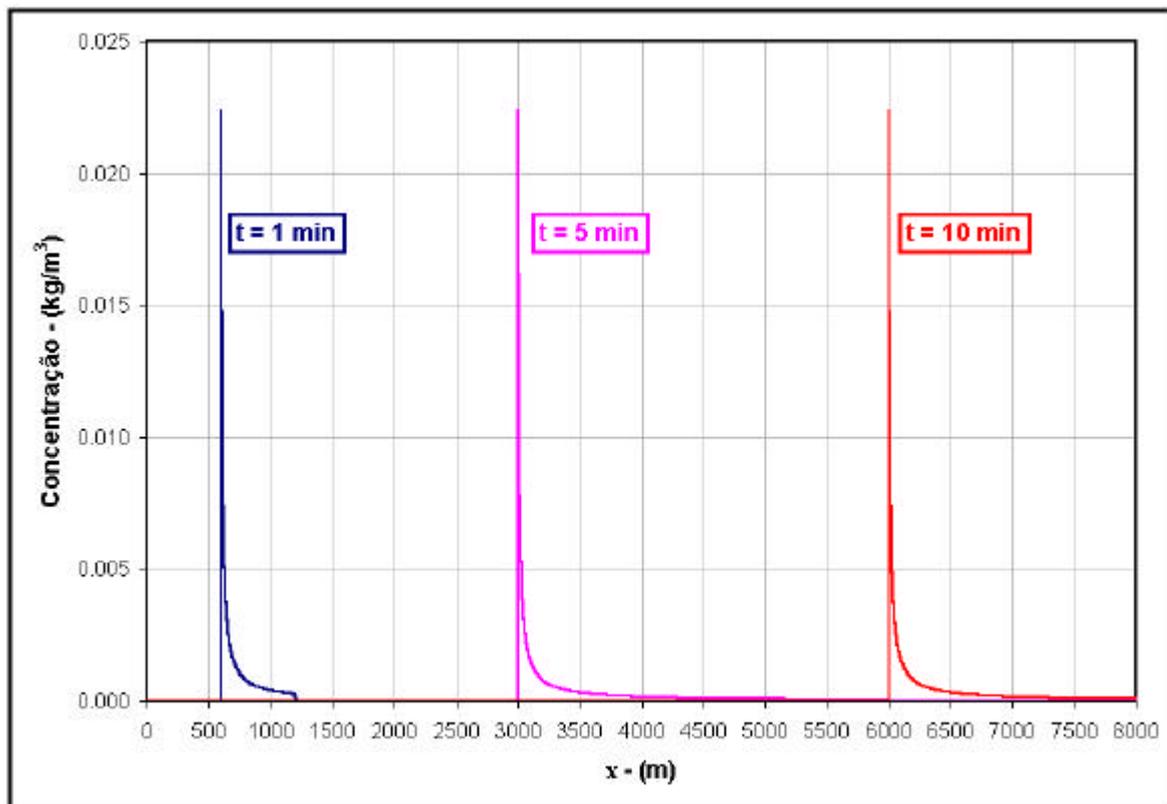


Figura 8.3 – Perfis longitudinais de concentração para instantes distintos empregando-se os dados da Tabela 8.1, $U = 20$ m/s e $u_f = 10$ m/s.

Os resultados apresentados na Figura 8.3 sugerem que

- A concentração de pico é constante com o tempo e com valores iguais ao do caso em que $U = 0$, indicando a existência de uma simetria da solução em relação a $|U - u_f|$;
- As caudas destas soluções são assimétricas também, mas adiantadas com relação à localização instantânea da fonte emissora;
- As concentrações de pico são iguais quando comparadas ao caso $U = 0$
- Também neste caso a ausência de regime permanente nesta solução é graficamente evidente.

A Figura 8.4 mostra os resultados obtidos para a concentração de pico em função da velocidade do vento e com $u_f = 10$ m/s e para diferentes instantes de tempo.

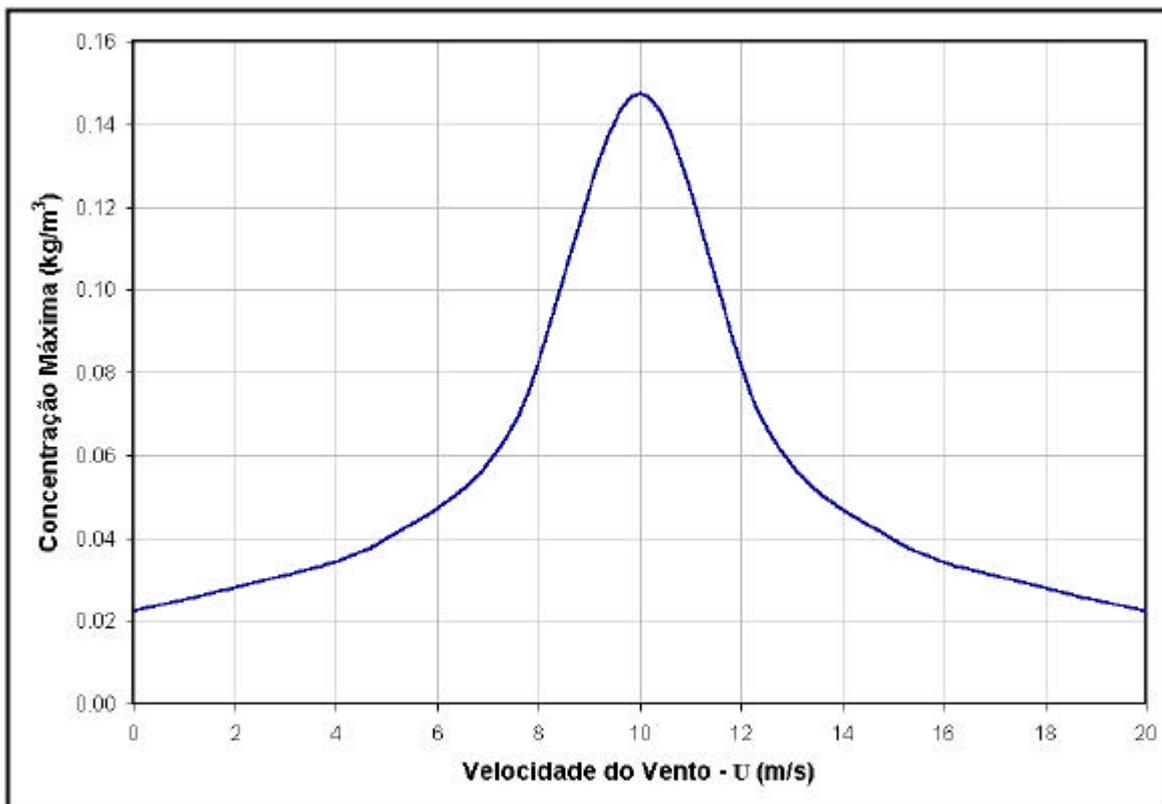


Figura 8.4 – Concentração máxima em função da velocidade do vento empregando-se os dados da Tabela 8.1 e $u_f = 10$ m/s.

Os resultados apresentados na Figura 8.4 sugerem que

- A concentração máxima é simétrica em relação a $|U - u_f|$;
- Quanto menor for o valor de $|U - u_f|$ maior é o valor da concentração máxima;
- Considerando-se somente o efeito da velocidade do vento, as situações que geram as maiores concentrações de pico são aquelas nas quais a velocidade do vento é próxima da velocidade da fonte móvel;
- A observação acima deve ser considerada com certa cautela pois velocidade maiores de vento tendem a aumentar a turbulência atmosférica e os correspondentes valores dos coeficientes de dispersão, cujos aumentos tendem a diminuir as concentrações.

9 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

As modelagem matemática da qualidade do ar é assunto bastante complexo e ainda produz resultados insatisfatórios sob alguns pontos de vista. Em particular, devido ao caráter altamente turbulento, em geral, da circulação atmosférica não é possível ainda simular-se a ocorrência fidedigna do campo de concentrações emitidos por uma fonte estacionária ou móvel, afetado por rajadas de vento e por uma turbulência heterogênea e anisotrópica.

Por causa desta dificuldade aceita-se na prática o uso de modelos simplificados, os quais procuram representar plumas de poluição médias no sentido da turbulência. Tais soluções procuram representar os valores médios de concentrações no sentido estatístico e não a realização de um experimento único.

Estes modelos simplificados são empregados na comparação de alternativas pertinentes à avaliação de impactos ambientais, por peritos em processos judiciais e também em tentativas de simulação de dados observados. Dessa forma, contatou-se na literatura correlata a existência de vários softwares de domínio público, cuja grande maioria faz uso do denominado modelo da pluma gaussiana para fontes estacionárias. Além disso, nenhum dos softwares analisados considera o efeito da movimentação de fontes móveis nas plumas resultantes de suas emissões.

Tais fatos despertaram a atenção para a necessidade de se compreender melhor esse fenômeno, a sua modelagem, a obtenção de soluções das equações pertinentes e, particularmente, a obtenção de uma solução para fontes móveis.

De forma cronológica este trabalho foi efetuado segundo as seguintes etapas:

- Dedução e compreensão da equação diferencial usada para simular o fenômeno, ou seja, a equação de transporte de massa ou equação de difusão advectiva;
- Estudo e aplicação de métodos matemáticos para resolver esta equação diferencial para situações simplificadas, particularmente para casos de escoamentos com velocidade e coeficientes de dispersão constantes. O método adotado foi o da transformada complexa e

Fourier para espaço infinito e o método das imagens incluir a existência de solo bloqueando fluxos difusivos verticais;

- Avaliação do modelo da pluma gaussiana, amplamente utilizado na prática. Sobre este modelo, aplicado para o caso de regime permanente de concentrações geradas por uma fonte estacionária localizada em terreno plano, verificou-se que:
 - É apenas uma simplificação válida para pontos localizados próximos ao centro da pluma;
 - Conserva o fluxo de massa de poluente em plano vertical;
 - Os erros decorrentes de sua aplicação para pontos distantes do centro da pluma podem ser muito grandes, conforme demonstrado neste trabalho;
 - A simplificação adotada para o modelo de pluma gaussiana é matematicamente desnecessária uma vez que o ganho de facilidade de cálculo por ela introduzido é irrelevante;
 - Os coeficientes de dispersão obtidos através dos valores dos desvios-padrão espaciais das plumas de poluição propostos por Briggs, levam, em alguns casos, a valores decrescentes dos coeficientes de dispersão com a distancia a jusante do ponto de emissão. Esse comportamento não faz, aparentemente, qualquer sentido físico, fato este que sugere a presença de inconsistências nessa forma de modelagem;
- Obtenção de uma solução para o campo de concentrações gerado por uma fonte móvel em terreno plano para valores constantes da taxa de emissão constante, velocidade do ar e coeficientes de dispersão. Tal solução apresenta variações temporais e espaciais. Tentou-se apresentar esta solução analítica de forma adimensional, procurando-se obter grupos de parâmetros adimensionais que afetam seus resultados. Todavia, verificou-se que esta abordagem produz um número grande de parâmetros adimensionais apresentando-se de forma pouco conveniente do ponto de vista didático. Preferiu-se, então, efetuar-se uma avaliação numérica através de um estudo de caso para avaliar-se a consistência dos

resultados produzidos, considerando-se uma emissão efetuada no nível do solo e um receptor situado 1 m acima do solo. Sobre os resultados obtidos é relevante enfatizar que:

- As formas e as concentrações de pico obtidas para as plumas simuladas dependem extremamente da diferença entre a velocidade do vento e a da fonte móvel;
- As concentrações de pico atingem valores máximos quando as velocidades do vento e da fonte móvel coincidem. Neste caso, a fonte móvel não sofre translação em relação à velocidade do ar, constituindo um caso análogo ao de uma fonte estacionária na ausência de vento;
- Em função da constatação anterior, a condição crítica para a dispersão de poluentes para fontes móveis não é de ausência de vento;
- Dada a diferença entre a velocidade do vento e a da fonte móvel, a concentração de pico não se altera ao longo do percurso da fonte para um receptor situado numa dada cota;
- Existe uma simetria do valor da concentração de pico em relação ao valor absoluto da diferença entre a velocidade do vento e a velocidade da fonte móvel;
- As caudas das plumas resultantes estão predominantemente situadas a montante da fonte quando ela é mais veloz do que o vento, sendo que estas caudas passam a situar-se predominantemente a jusante da fonte quando ela é mais lenta do que o vento.

O desenvolvimento e soluções aqui apresentadas devem ser consideradas como um passo inicial dentro dessa área de pesquisa, particularmente a da fonte móvel. Embora esta solução obtida às custas de várias hipóteses simplificadoras, ela pode ser bastante útil para a comparação de situações e para uma melhor compreensão deste problema em particular. Dessa forma, vários aperfeiçoamentos podem ser propostos a partir do presente estudo para se obter resultados mais realistas, conforme apresentado a seguir:

- Representar a taxa de emissão de poluentes em função da velocidade da fonte móvel, sendo que tal alteração é imediata, pois mesmo com essa dependência, este termo pode ser colocado para fora das integrais da solução geral;
- Consideração de várias fontes móveis poluidoras simultâneas, procurando representar o efeito gerado por um comboio de veículos. Tal solução é obtida diretamente pela adição de soluções individuais devido à linearidade do problema;
- Uma outra forma de se considerar aproximadamente o efeito de um comboio de fontes móveis discretas é através de uma fonte linear contínua, cuja taxa de emissão por unidade de comprimento produza o mesmo da soma das emissões das fontes móveis discretas;
- Consideração de uma via com pistas com fluxos opostos, na qual parte das fontes move-se a favor do vento enquanto a outra parte move-se contra a vento. Novamente, esta solução é simples de ser obtida através da soma das contribuições de cada fonte, devido à linearidade do problema;
- A solução apresentada considera somente um contorno sólido, representado pelo terreno plano. Na prática, a ocorrência de inversão térmica é costumeiramente caracterizada como sendo um outro contorno sólido localizado na altura de sua base. A influência desse contorno pode ser incluída, por exemplo, através do método das imagens ou da transformada finita de Fourier;
- efeito de ascensão da pluma a partir do seu ponto de emissão deve ser avaliado em termos de sua importância e, caso seja significativo, incorporado na modelagem através de um ponto de emissão virtual localizado na cota na qual esse efeito cessa, conforme feito para a pluma gaussiana gerada por fontes estacionárias.

Uma das questões mais complexas a ser considerada é relativa aos coeficientes de dispersão. Tais coeficientes estão propostos na literatura para o modelo da pluma gaussiana e a extrapolação destes coeficientes para a situação de fontes móveis não é imediata. Em primeiro lugar, estes coeficientes foram obtidos para a solução de um problema em regime permanente e devem estar compensando eventuais erros na utilização do modelo da pluma gaussiana, o qual pode produzir grandes erros, conforme mostrado neste trabalho. Em segundo lugar, os

valores desses coeficientes dependem de alguma forma da “idade” dos vórtices turbulentos contendo poluentes, definindo-se esta “idade” como sendo o tempo em que as partículas poluidoras amostram o campo de velocidades turbulentas do meio. No caso de fontes estacionárias em regime permanente, esta “idade” pode ser representada pelo tempo médio de translação da pluma. Todavia, no caso de fontes móveis, deve-se considerar o efeito da ocorrência de emissões em posições distintas ao longo do tempo. Este tópico é merecedor de uma pesquisa mais aprofundada.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRAMOVITZ, M. and STEGUN, I.A. (eds.). Pocketbook of Mathematical Functions. Thun – Frankfurt and Main, 1964.
- AMARAL, F.L.M., CORTEZ, N.V., JARDINETTI, J.R.B. e LUCHESI, P. Modelamento da Difusão Atmosférica de Poluentes.
<http://socrates.if.usp.br/~fernando/poluicao/fpa.htm#indice>, 1999.
- BENKLEY, C.W. and BASS, A. User's Guide to Mesopuff (Mesoscale Puff) Model. EPA Report 600/7-79-xxx, U.S. EPA, Research Triangle Park., NC, 141 pp., 1979.
- BJORKLUND, J.R. and BOWERS, J.F. User's Instructions for the SHORTZ and LONGZ Computer Programs. EPA Publication No. EPA-903/9-82-004a,b. U.S. Environmental Protection Agency, Region III, Philadelphia, PA, 1982..
- BOWERS, J.F. and ANDERSON, A. An Evaluation Study for the Industrial Source Complex (ISC) Dispersion Model, EPA Publication No. EPA-450/4-81-002, 1981.
- BURT, E. VALLEY Model User's Guide. PB-274 054, EPA 450/2-77-018, USEPA, Research Triangle Park, NC, USA, 1987.
- BUSSE, A.D. and ZIMMERMAN, J.R. User's Guide for CDM. EPA Publication No. EPA r4-73- 024, 1973.
- BUTKOV, E. Física Matemática, Editora Guanabara S.A., Rio de Janeiro, 1988.
- CALIFORNIA DEPARTMENT OF TRANSPORTATION. A Dispersion Model for Predicting Air Pollutant Concentrations Near Highways. Final Report, 1984.
- CIRILLO, M.C. and CAGNETTI, P. Un Codice Multisorgente per il Calcolo Della Concentrazione in Aria, a Livello del Suolo. Degli Inquinant Atmosferici, Enel-DSR/CRTN, RTI/STUDI-VALSAMB(82)8, Milano, 1982.

- CIRILLO, M.C., FINZI, G., FORTEZZA, F., MAMOLINI G., MARANI, A., MURA, M.C., TAMPONI, M., and TIRABASSI, T. Modelli per la Progettazione e la Valutazione di una Rete di Rivelamento per il Controllo Della Qualità Dell'aria. Istituto Superiore di Sanità, Roma, 1990.
- CLEARY, R. W. Water Quality Analysis. Water Resources Program, Department of Civil Engineering, Princeton University, 1979.
- EIGER, S. “Modelos de Escoamentos Turbulentos”, In: Silva, R.V. da (ed.), *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos*, Rio de Janeiro, Associação Brasileira de Recursos Hídricos, 1989.
- EIGER, S. “Qualidade da Água em Rios e Estuários”, In: Porto. R. L. L; (org.), *Hidrologia Ambiental*, Associação Brasileira de Recursos Hídricos, 1991.
- ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. User's Manual for Single Source (CRSTER) Model. EPA Publication No. EPA-450/2-77-013, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 1977.
- ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. User's Manual for the Plume Visibility Model (PLUVUE II). EPA Publication No. EPA-454/B-92-008. U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 1992.
- ENVIRONMENTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY. User's Guide to the Rough Terrain Diffusion Model (RTDM), Rev. 3.20. ERT document No. P-D535-585. Environmental Research and Technology, Inc., Concord, MA, 1987.
- FISCHER, H.B.; LIST, E.J.; KOH, R.C.Y.; IMBERGER, J. and BROOKS, N.H. *Mixing in Inland and Coastal Waters*. Academic Press, Inc., New York, 1979.
- GIFFORD, F.A., Jr. Turbulent Diffusion - Typing Schemes: A Review. *Nuclear Safety*, 17, 68-86, 1976.

- HENDERSON-SELLERS, B. and ALLEN, S.E.. Verification of the plume rise/dispersion model U.S.P.R.: Plume rise for single stack emissions. *Ecological Modelling*, 30, 209-227, 1985.
- McELROY, J.L. and POOLER, F. The St. Louis Dispersion Study. U.S. Public Health Service, National Air Pollution Control Administration, Report AP-53, 1968.
- MOOD, A. M., GRAYBILL, F. A. and BOES, D. C. *Introduction to the Theory of Statistics*. McGraw-Hill, New York, 1963.
- PETERSEN, W.B. User's Guide for PAL - A Gaussian Plume Algorithm for Point, Area and Line Source. EPA Publication No. EPA-600/4- 78-013, Office of Research and Development, Research Triangle Park, NC, 1978.
- PETERSEN, W.B., CATALANO, J.A., CHICO, T., and YUEN, T.S. INPUFF - A Single Source Gaussian Puff Dispersion Algorithm. EPA - 600/8-84-027, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 110 pp., 1984.
- PIERCE, T. D. and TURNER, D.B. User's Guide for MPTER. EPA Publication No. EPA-600/8-80-016, U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 1980.
- RODI, W. Turbulence Models and Their Applications in Hydraulics - a State of the Art Review. *Journal of the Hydraulic Research*, IAHR, 1980.
- PIERCE, T.E., TURNER, D.B., CATALANO, J.A. and HALE, F.V. PTPLU - A Single Source Gaussian Dispersion Algorithm - User's Guide. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park. PB83-211235, 1979.
- SCHULMAN, H.S., PAINE, R., and PLEIM, J. The Offshore and Coastal Dispersion (OCD) Model User's Guide. OCS Study MMS 84-0069, Environmental Research and Technology, Inc., Concord, MA, 1984.

- SCHUMAN, L. L. and SHIRE, J. S. Buoyant Line and Point Source (BLP) Dispersion Model User's Guide. Document P-7304B. Environmental Research and Technology, Inc, Concord, MA. (NTIS PB 81-164642), 1980.
- SEINFELD, J. H. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. John Wiley and Sons, NY, 1986.
- SHERE, K. L. and DEMERJIAN, K.L. User's Guide for the Photochemical Box Model (PBM). U.S. Environmental Protection Agency, Environmental Sciences and Research Laboratory, Office of Research and Development, Research Triangle Park, NC, 1984.
- SPICER, T. and HAVENS, J. User's Guide for the DEGADIS 2.1 - Dense Gas Dispersion Model. U.S. Environmental Protection Agency. EPA-450/4-89-019, 1989.
- TAYLOR, G.I. Diffusion by Continuous Movements. *Proceedings of the London Mathematical Society*, A-20, pp. 196-211, 1921.
- TENNEKES, H. and LUMLEY, J.L. *A First Course in Turbulence*. Cambridge, Massachusetts, The MIT Press, 1983.
- TEXAS AIR CONTROL BOARD. User's Guide: Texas Episodic Model. Permits Section, Austin, TX, 215 pp., 1979.
- TIRABASSI, T., TAGLIAZUCCA, M. and ZANETTI, P. Kappa-G - a Non Gaussian Plume Dispersion Model: Description and Evaluation Against Tracer Measurements. JAPCA, vol. 36, pp. 592-596, 1986.
- TURNER, D.B. Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates. PHS Publication No. 999-AP-26. U.S. Department of Health, Education and Welfare, National Air Pollution Control Administration, Cincinnati, Ohio, 1970.
- TURNER, D.B., CHICO, T., and CATALANO, J.A. TUPOS-P - A Program for Reducing Hourly and Partial Concentration Files Produced by TUPOS: User's Guide.

EPA-600/8-86/012.U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, 1986.

- TURNER, D.B., and NOVAK; J.H. User's Guide for RAM, Vols. I and II, U.S. Environmental Protection Agency, Reports EPA-600/8-78-016 a and b, Research Triangle Park, NC, 1978.
- ZIMMERMAN, J.R., and THOMPSON, R.S. HIWAY: a Highway Air Pollution Model. Environmental Protection Agency, NC, 1974.