



Universidade Estadual de Campinas
Faculdade de Tecnologia

Matheus Fernando Pereira

Dependência paramétrica das equações da difusão e do calor

Limeira
2018

Matheus Fernando Pereira

Dependência paramétrica das equações da difusão e do calor

Tese apresentada à Faculdade de Tecnologia da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Tecnologia na área de concentração de Ciências dos Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Varese Salvador Timóteo

Este exemplar corresponde à versão final da Tese defendida por Matheus Fernando Pereira e orientada pelo Prof. Dr. Varese Salvador Timóteo.

Limeira
2018

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): Não se aplica.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9725-1812>

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Faculdade de Tecnologia
Felipe de Souza Bueno - CRB 8/8577

P414d Pereira, Matheus Fernando, 1987-
Dependência paramétrica das equações da difusão e do calor / Matheus
Fernando Pereira. – Limeira, SP : [s.n.], 2018.

Orientador: Varese Salvador Timóteo.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de
Tecnologia.

1. Equação da difusão. 2. Diferenças finitas. 3. Dispersão de soluto. 4.
Equação de calor. I. Timóteo, Varese Salvador, 1972-. II. Universidade
Estadual de Campinas. Faculdade de Tecnologia. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Parametric dependence of advection-diffusion and heat equations

Palavras-chave em inglês:

Advection-diffusion equation

Finite differences

Solute dispersion

Heat equation

Área de concentração: Ciência dos Materiais

Titulação: Doutor em Tecnologia

Banca examinadora:

Varese Salvador Timóteo [Orientador]

Edson Luiz Ursini

Elaine Cristina Catapani Poletti

Edilson Ferreira Batista

Luciana Cláudia de Paula

Data de defesa: 07-12-2018

Programa de Pós-Graduação: Tecnologia

FOLHA DE APROVAÇÃO

Abaixo se apresentam os membros da comissão julgadora da sessão pública de defesa de tese para o Título de Doutor em Tecnologia na área de concentração de Ciências dos Materiais, a que submeteu o aluno Matheus Fernando Pereira, em 07 de dezembro de 2018 na Faculdade de Tecnologia- FT/ UNICAMP, em Limeira/SP.

- **Prof. Dr. Varese Salvador Timóteo**
FT/UNICAMP – Presidente da Comissão Julgadora
- **Prof. Dr. Edson Luiz Ursini**
FT/UNICAMP
- **Profa. Dra. Elaine Catapani Poletti**
FT/UNICAMP
- **Prof. Dr. Edilson Ferreira Batista**
DCEN/UESB
- **Profa. Dra. Luciana Cláudia de Paula**
DCET/UESC

Ata da defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós Graduação da FT.

Dedicatória

Dedico esta tese à minha família

Agradecimentos

A Deus.

Ao Prof. Dr. Varese Salvador Timóteo, pela oportunidade, pelo apoio no projeto, pela confiança, pelos incentivos e pela paciência.

Aos examinadores, Prof. Dr. Edson Luiz Ursini, Profa. Dra. Elaine Cristina Catapani Poletti, Prof. Dr. Edison Ferreira Batista e Profa. Luciana Cláudia de Paula pela avaliação do trabalho.

Aos docentes da Faculdade de Tecnologia (FT) que contribuíram para minha formação.

À secretaria da pós-graduação, pelo esclarecimento das dúvidas e pelo apoio.

À minha família, pelo amor, pelo apoio em todos os momentos, pela confiança, por tudo que eu tenho e pelo que sou.

À minha namorada, Mariana, por me incentivar e me apoiar em todos os momentos.

À minha amiga, M^a Tais de Alencar Lucato Santana, pela parceria no projeto e pelo constante incentivo.

A todos os amigos e colegas pelo incentivo e apoio.

Aos colegas e colaboradores que conheci nas disciplinas cursadas durante o mestrado e o doutorado.

Resumo

A presente pesquisa contemplou uma análise sistemática e detalhada da dependência paramétrica das equações da difusão unidimensional e do calor bidimensional, ambas na variável espacial, por meio de integração numérica com o emprego do método das diferenças finitas. Foram analisados os efeitos dos parâmetros relacionados à heterogeneidade do meio, velocidade do fluxo e coeficiente de dispersão na variação da concentração de um soluto em função da distância e do tempo em dois cenários abordados na literatura, sendo um deles de dispersão espacialmente dependente em meio heterogêneo com fluxo instável e outro de dispersão temporalmente dependente em meio homogêneo com fluxo uniforme, ambos considerando a existência de uma fonte emissora do tipo pulso, a qual é desativada após um determinado período de tempo. Após validação do método numérico por meio da comparação com solução analítica abordada na literatura, ficou evidente que há uma faixa de intervalo para cada parâmetro cuja integração numérica converge para uma solução estável, e que de modo geral, quando a fonte está ativada, maiores valores dos parâmetros implicam em maiores níveis de concentração, exceto para o parâmetro de heterogeneidade do meio bem próximo à fonte emissora, em que menores valores implicam em maiores concentrações. Com a fonte desativada, por sua vez, as influências dos três parâmetros são muito semelhantes, sendo verificado que valores mais elevados dos três parâmetros implicam em concentrações menores nas proximidades da fonte e maiores após uma determinada distância onde há um pico de máxima concentração. As simulações realizadas para a equação do calor, por sua vez, após validação do método por meio de comparação com um código desenvolvido no software Matlab, evidenciaram que menores valores dos parâmetros de condutividade térmica e densidade implicam em maiores variações de temperatura em função do tempo.

Palavras-chaves: Equação da difusão; diferenças finitas; dispersão de soluto; equação do calor.

Abstract

The present research contemplated a systematic and detailed analysis of the parametric dependence of the one-dimensional advection-diffusion and the two-dimensional heat equations, both on the spatial variable, by numerical integration with the use of finite difference method. The effects of the parameters related to medium heterogeneity, flow velocity and dispersion coefficient on a solute concentration variation as function of distance and time were analysed for two scenarios reported in the literature, spatially dependent dispersion through non-homogeneous medium with unstable flow, and temporally dependent dispersion through homogeneous medium with uniform flow, both considering the existence of a pulse-type emitting source, which is removed after a certain period of time. After validating the numerical method comparing it with an analytical solution reported in the literature, it was evidenced that there is an interval range for each parameter where the numerical integration converges to a stable solution and that when the source is activated, larger values of the parameters yields to larger concentration levels, except for the medium heterogeneity parameter very close to the emitting source, where lower values yields to larger concentrations. With the source deactivated, in turn, the influences of the three parameters are very similar, being verified that higher values of the three parameters yields to lower concentrations in the proximities of the source and higher concentrations in distances larger than where there is a peak of maximum concentration. The simulations performed for the heat equation, in turn, after the method validation by comparing it with a code developed in the software Matlab, showed that lower values of parameters related to thermal conductivity and density yields to a greater variation of temperature as function of time.

Keywords: Advection-diffusion equation; finite differences; solute dispersion; heat equation.

Lista de Figuras

3.1	Memória ocupada de acordo com o número de passos utilizados nas iterações para os cenários de dispersão em uma, duas e em três dimensões. . . .	33
4.1	Efeito do parâmetro de heterogeneidade do meio na variação da concentração de soluto em função da distância - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.	37
4.2	Efeito do parâmetro de heterogeneidade do meio na variação da concentração de soluto em função do tempo - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.	37
4.3	Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de heterogeneidade do meio para o cenário de dispersão espacialmente dependente.	39
4.4	Efeito da velocidade do fluxo em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função da distância - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.	41
4.5	Efeito da velocidade do fluxo em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função do tempo - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.	41
4.6	Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de velocidade do fluxo em $x = 0$ para o cenário de dispersão espacialmente dependente.	43
4.7	Efeito do coeficiente de dispersão em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função da distância - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.	45
4.8	Efeito do coeficiente de dispersão em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função do tempo - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.	45
4.9	Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de coeficiente de dispersão em $x = 0$ para o cenário de dispersão espacialmente dependente.	48
4.10	Distribuição da concentração em função da distância e do tempo para os valores de referência após a desativação da fonte para o cenário de dispersão espacialmente dependente.	49
4.11	Efeito da velocidade do fluxo uniforme na variação da concentração de soluto em função da distância para o cenário de dispersão temporalmente dependente.	51
4.12	Efeito da velocidade do fluxo uniforme na variação da concentração de soluto em função do tempo para o cenário de dispersão temporalmente dependente.	51

4.13	Distribuição de C/C_0 em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de velocidade do fluxo uniforme para o cenário de dispersão temporalmente dependente.	52
4.14	Efeito do coeficiente de dispersão inicial na variação da concentração de soluto em função da distância para o cenário de dispersão temporalmente dependente.	54
4.15	Efeito do coeficiente de dispersão inicial na variação da concentração de soluto em função do tempo para o cenário de dispersão temporalmente dependente.	54
4.16	Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores do coeficiente de dispersão inicial para o cenário de dispersão temporalmente dependente.	55
4.17	Distribuição da concentração em função da distância e do tempo para os valores de referência após a desativação da fonte para o cenário de dispersão temporalmente dependente.	57
4.18	Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	58
4.19	Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 0,5 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	59
4.20	Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 1,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	59
4.21	Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 2,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	59
4.22	Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	60
4.23	Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 0,5 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	60
4.24	Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 1,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	60
4.25	Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 2,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	61
4.26	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=0,1$ segundo.	61
4.27	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=0,5$ segundo.	62
4.28	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=1,0$ segundo.	62
4.29	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=2,0$ segundos.	63
4.30	Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa_x = 0,3 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\kappa_y = 2,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	64
4.31	Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa_x = 0,8 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\kappa_y = 1,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	64
4.32	Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa_x = 1,5 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\kappa_y = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	64

4.33	Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa_x = 0,3 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\kappa_y = 2,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	65
4.34	Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa_x = 0,8 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\kappa_y = 1,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	65
4.35	Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa_x = 1,5 \text{ m}^2/\text{s}$ e $\kappa_y = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).	65
4.36	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t = 0,1$ segundo.	66
4.37	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t = 0,5$ segundo.	66
4.38	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t = 1,0$ segundo.	67
4.39	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t = 2,0$ segundos.	67
4.40	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t = 0,1$ segundo.	68
4.41	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t = 0,5$ segundo.	69
4.42	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t = 1,0$ segundo.	69
4.43	Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t = 2,0$ segundos.	70

Lista de Tabelas

- 3.1 Valores de referência utilizados para os parâmetros da equação da difusão . 29
- 3.2 Valores de referência utilizados para os parâmetros da equação do calor. . . 34

Sumário

1	Introdução	14
1.1	Revisão Bibliográfica	14
1.2	Importância do estudo e aplicações	19
1.3	Objetivos da pesquisa	21
2	Equação da difusão	22
2.1	Descrição da equação da difusão	22
2.2	Equação da difusão em 1+1 dimensão	23
2.2.1	Cenário de dispersão espacialmente dependente	24
2.2.2	Cenário de dispersão temporalmente dependente	25
2.3	Equação da difusão em 2+1 dimensões	26
2.3.1	Equação da condução do calor	27
3	Métodos numéricos	28
3.1	Método da diferença finita explícita	28
3.2	Emprego do método para cenário de dispersão em 1+1 dimensão	29
3.2.1	Cenário 1: Dispersão espacialmente dependente	30
3.2.2	Cenário 2: Dispersão temporalmente dependente	31
3.3	Emprego do método para dispersão em 2+1 dimensões	32
3.3.1	Equação do calor bidimensional	32
4	Resultados e Discussões	35
4.1	Dependência paramétrica da equação da difusão em 1+1 dimensão	35
4.1.1	Cenário 1: Dispersão de soluto espacialmente dependente	35
4.1.2	Cenário 2: Dispersão de soluto temporalmente dependente	49
4.2	Dependência paramétrica da equação do calor bidimensional	56
4.2.1	Influência da condutividade térmica para a condição isotrópica . . .	57
4.2.2	Influência da condutividade térmica para a condição não isotrópica	63
4.2.3	Influência da densidade com a presença de fonte de calor	68
5	Conclusões	71
	Referências Bibliográficas	73

Capítulo 1

Introdução

1.1 Revisão Bibliográfica

Considerando que a maior causa da degradação de recursos ambientais como ar, solo e águas superficiais e subterrâneas é decorrente da emissão de poluentes de fontes naturais e antropogênicas, como vulcões, indústrias e refinarias, foram desenvolvidos modelos baseados na equação da difusão, a qual é utilizada para descrever os níveis de concentração da massa de um poluente de interesse em um determinado ponto e em um determinado tempo (SINGH et al., 2015).

Levando-se em conta que os efeitos da velocidade em que o poluente é carregado e a maneira como o mesmo é disperso na variação da concentração, a equação da difusão, descrita de modo simplificado na Equação 1.1, possui importância em diversas áreas como ciências ambientais, biociências, engenharia química e hidrologia (adaptado de AHMED et al., 2017).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial C}{\partial x} - u(x, t) C \right) \quad (1.1)$$

sendo:

C = concentração;

x = Distância;

t = Tempo;

u = Velocidade em que o poluente é carregado;

D = Coeficiente relacionado à dispersão.

A equação pode ser adaptada para o meio em que a substância de interesse está sendo dispersa, devendo sempre ser levados em conta a intensidade da fonte emissora, a concentração inicial e fatores como velocidade, densidade, pressão e viscosidade (adaptado de LORA, 2002; MOHAMMADMORADI et al., 2018).

Existem diversos métodos para resolução da equação da difusão abordados na literatura, envolvendo tanto técnicas analíticas quanto numéricas e associações entre as mesmas, além de modelos comerciais existentes como AERMOD abordados em Barbon (2008), DAUMOD e Industrial Source Complex (ISC) abordados em Mazzeo e Venegas (2008).

Cassol et al. (2009) apresentam uma solução analítica utilizando transiente de dispersão bidimensional de poluentes atmosféricos aplicando técnicas de transformação integral generalizada, uma expansão em série, para a solução de equações diferenciais parciais. Nesse estudo, a técnica foi associada a transformadas de Laplace e à diagonalização de matrizes, demonstrando boa concordância com experimentos realizados em Copenhague por Gryning, S.E. e Lucky, E. (1984), cujos dados foram utilizados para validação dos resultados.

Trabalho similar ao Cassol et al. (2009) foi desenvolvido por Costa et al. (2012), que resolvem a equação da difusão para três dimensões analiticamente por meio da combinação da técnica da transformada de Laplace com a técnica de transformação integral generalizada por meio da discretização da altura da Camada Limite Planetária (CLP) em n subintervalos, sendo calculado um valor médio para o coeficiente de difusividade e para a velocidade do vento em cada sub-região.

Kumar et al. (2010) apresentam uma solução analítica para a equação da difusão unidimensional considerando três cenários de dispersão de soluto com fonte emissora contínua, sendo eles através de meio heterogêneo em fluxo estacionário, temporalmente dependente ao longo de fluxo uniforme em meio homogêneo, e temporalmente dependente em fluxo instável através de meio heterogêneo. Os autores empregam a técnica da transformada de Laplace para estimativa da concentração a partir dos coeficientes relacionados à dispersão, velocidade do fluxo e heterogeneidade do meio, e realizam uma investigação da dependência espacial e temporal na dispersão da concentração, concluindo que a atenuação tende a ser mais rápida em meios heterogêneos e em fluxo estacionário.

Jaiswal et al. (2009), por sua vez, empregam a técnica da transformada de Laplace para resolução da equação da difusão unidimensional na variável espacial em cenários

de dispersão temporalmente dependente ao longo de fluxo uniforme e espacialmente dependente ao longo de fluxo não uniforme, ambos considerando a existência de uma fonte emissora do tipo pulso, a qual é removida após um determinado período de emissão. Os autores analisam a influência da heterogeneidade do meio na variação da concentração do soluto e demonstram a aplicabilidade do método para casos de avaliação da degradação de um determinado meio após a remoção de uma fonte de poluição.

Yadav et al. (2012) também utilizam a mesma técnica adotada por Kumar et al. (2010) e por Jaiswal et al. (2009) para resolução da equação da difusão bidimensional em cenário de dispersão de soluto considerando que há uma fonte emissora do tipo pulso, com desativação após um ano. Para o caso em questão, os autores verificaram que a técnica da transformada de Laplace por meio da transformação inversa para resolução da equação diferencial geraram resultados mais realísticos do que a transformação integral generalizada.

Os mesmos cenários adotados por Kumar et al. (2010), Jaiswal et al. (2009) e Yadav et al. (2012) também foram adotados por Savovic e Djordjevic (2012, 2013) e Djordjevic e Savovic (2013), respectivamente, para resolução numérica da equação da difusão unidimensional com a utilização do método da diferença finita explícita, que consiste basicamente em uma discretização para aproximação da solução através da diferença média de funções derivativas em um intervalo preestabelecido. Os autores demonstram, através da comparação com a solução analítica, a eficácia do método para resolução da equação com condições iniciais e de contorno arbitrárias.

Santana (2017) também utiliza o método da diferença finita explícita para avaliação da dependência paramétrica da equação da difusão unidimensional na variável espacial no cenário de dispersão espacialmente dependente com fonte emissora do tipo pulso, simulado previamente por Jaiswal et al. (2009) e por Savovic e Djordjevic (2013). No estudo em questão, foi verificada a influência dos parâmetros de heterogeneidade do meio, velocidade do fluxo e coeficiente de dispersão com a fonte ligada e desligada na variação da concentração do soluto, sendo verificados efeitos similares para os três parâmetros, e demonstrada boa concordância com a solução analítica existente na literatura para todos os valores dos parâmetros adotados para a análise.

Pereira et al. (2014) demonstram a viabilidade do emprego de um algoritmo de integração numérica de passo adaptativo, com código simples e de rápida convergência, para

resolução da equação da difusão unidimensional utilizando os mesmos dados dos cenários abordados por Kumar et al. (2010) e por Savovic e Djordjevic (2012), sendo verificado que os resultados são correspondentes aos verificados na literatura. O algoritmo em questão também é aplicado por Pereira (2014) para investigação da influência do parâmetro de heterogeneidade do meio, da influência da velocidade do fluxo e do coeficiente de dispersão na variação da concentração do soluto em função da distância e do tempo.

Um outro exemplo de método numérico que pode ser utilizado para estudo da equação da difusão é o método dos volumes finitos, que consiste na utilização de balanços de massa, energia e quantidade de movimento para resolução de equações diferenciais em um determinado volume do meio considerado contínuo. Kaabeche e Belbaki (2013) demonstram o emprego da técnica para o desenvolvimento de um modelo de adsorção de soluto em leito fixo com a introdução de um parâmetro específico para quantificação da heterogeneidade do meio a partir da resolução da equação da difusão unidimensional para análise da diferença no transporte não-linear de soluto em meios homogêneos e heterogêneos.

Mazaheri et al. (2013) simulam cenários específicos com quatro tipos de fonte emissora, sendo elas do tipo pulso constante, de liberação instantânea, fonte pontual com decaimento exponencial em relação ao tempo, e várias fontes emissoras com padrões irregulares. Os autores demonstram que a combinação da técnica da transformada de Laplace com o princípio da superposição viabilizam a solução da equação da difusão unidimensional com padrões arbitrários, condição cujas técnicas analíticas geralmente apresentam limitações.

A técnica da transformada de Laplace também é utilizada por Singh et al. (2012), para avaliação da variação da concentração em um meio semi-infinito homogêneo em um fluxo de água subterrânea. No estudo, os autores realizam a investigação da dispersão em duas situações temporalmente dependente, sendo elas com dispersão considerada variável sinusoidalmente e exponencialmente crescente, e concluem que quando a concentração de entrada é considerada temporalmente dependente a solução é mais realística em relação a uma concentração de entrada considerada uniforme.

Outra técnica frequentemente utilizada para modelagem de dispersão de poluentes é a Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD), que emprega a substituição do domínio espacial e temporal por um domínio dividido em diversos pontos de uma grade ou células e níveis temporais para a resolução das equações diferenciais por meio de um algoritmo especificado (PEREIRA, 2014). Embora o método possua diversas vantagens, como a

representar a influência de obstáculos em um campo de velocidade, a técnica apresenta limitações como o fato de possuir custo computacional elevado e depender de uma configuração extremamente cuidadosa, e de testes específicos para cada campo de aplicação, requerendo a configuração correta de diversos parâmetros ajustáveis (ANTONIONI et al, 2012).

Em um caso específico da equação da difusão é a equação do calor, aplicada à difusão do calor em sólidos, ocasião em que o coeficiente D é assumido ser constante e ao invés do transporte de uma substância de interesse, há um fluxo de energia térmica. A equação do calor é descrita de modo simplificado conforme Equação 1.2 (RIETH et al., 2018).

$$\partial_t T = \kappa \partial_{xx} T \quad (1.2)$$

sendo:

T = Temperatura;

∂_t = Função derivativa temporal de primeira ordem;

∂_{xx} = Função derivativa espacial de segunda ordem;

κ = Condutividade térmica;

t = Tempo.

Rieth et al. (2018) apresentam uma abordagem de discretização espacial para a equação do calor generalizada de Guyer-Krumhansl (GK) (Eq. 1.3), considerando a existência de fluxo de calor nas fronteiras da faixa de domínio, com o emprego do método da diferença finita baseada no esquema implícito. No estudo, o método é utilizado para aproximação dos termos relacionados à temperatura (T) e à produção de calor (q), sendo verificada sua eficácia e precisão por meio de comparações com soluções analíticas e método do elemento finito por meio do software COMSOL v5.3.

$$\tau_q \partial_t q = -\kappa \partial_x T + \kappa^2 \partial_{xx} q \quad (1.3)$$

sendo:

q = Produção de calor;

τ_q = Coeficiente relacionado ao tempo de relaxação.

Pettres et al. (2015) apresentam uma formulação baseada no método dos elementos de fronteira para o estudo de difusão térmica em meio homogêneo e isotrópico, com base

na equação do calor bidimensional, sendo contemplada a inclusão de termos relacionados à dissipação de energia e geração de calor após o emprego do esquema da diferença regressiva para funções derivativas de primeira ordem. Os autores empregaram células lineares triangulares para discretização do domínio, sendo assumida variação constante para derivada temporal da temperatura, e elementos lineares para discretização nas fronteiras, e verificaram boa correlação com soluções analíticas para os casos simulados, que abrangem equação da difusão clássica, inserção de termo dissipativo e termo não-homogêneo relacionado à produção de calor.

A equação do calor unidimensional foi resolvida analiticamente por Talaee et al. (2018) com o emprego de autovalores para modelagem de aquecimento de tecido biológico a partir de séries de intervalos de pulso e de séries exponenciais de calor. Os autores observaram que a modelagem com pulsos exponenciais produz resultados muito similares aos observados para a série de intervalos e que o pico de temperatura máxima aumenta em função do aumento no coeficiente de penetração mesmo quando não há mudança na temperatura final e na energia térmica.

Dubois e Comerçon (2016) apresentam um método que envolve a associação do volume finito implícito com uma malha adaptativa refinada, sendo empregado um código RAMSES com passo de tempo adaptativo, para resolução da equação do calor em condição não isotrópica de modo a avaliar a difusão da energia dos raios cósmicos e a difusão do calor transmitido por elétrons, que se acopla a estrutura dos íons, e concluem que a condução ou a difusão não isotópica, juntamente com a temperatura de acoplamento, são relevantes para vários problemas astrofísicos.

1.2 Importância do estudo e aplicações

As investigações acerca do transporte e da concentração da dispersão de poluentes, especialmente em área urbana, são fundamentais para proteção da qualidade dos recursos naturais e da saúde humana. A estimativa da concentração de um poluente atmosférico no nível do solo, por exemplo, é necessária para determinação do impacto ambiental das fontes já existentes e avaliação de alternativas para novas localizações e medidas de controle para minimização dos efeitos adversos da fonte emissora (SAGRADO et al., 2002).

Em 1987 foram estabelecidas diretrizes de qualidade do ar pela Organização Mundial de Saúde (OMS), baseadas em evidências científicas atuais, visando a minimização dos impactos da poluição atmosférica sobre a saúde humana. O documento teve sua última atualização realizada no ano de 2005, sendo contemplados padrões de concentração para ozônio, dióxido de enxofre, dióxido de nitrogênio e material particulado (WHO, 2005).

Ho et al. (2018) realizam um levantamento de todos os casos de parada cardíaca ocorrida fora de hospitais ao longo dos anos de 2010 a 2015 em Singapura, município localizado no sudeste da Ásia, região onde é verificada uma série de episódios de poluição do ar em grande escala desde 1972, e confrontam com dados de exposição primária baseada na média de 24 horas de um índice de qualidade do ar desenvolvido a partir de escala desenvolvida pela *EPA – Environmental Protection Agency*, Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos. Os autores verificaram uma correlação entre a exposição primária e o risco de parada cardíacas, que é alta especialmente para pessoas com idade superior a 65 anos.

Estudo semelhante é desenvolvido por Lin et al. (2013) que realizam uma associações entre poluentes atmosféricos e mortalidade por infarto agudo no miocárdio em Hong Kong a partir de coleta de dados diários relacionados a concentrações de material particulado (PM_{10}), dióxido de nitrogênio (NO_2), dióxido de enxofre (SO_2), ozônio (O_3) e monóxido de carbono (CO) no período compreendido entre os anos de 1998 e 2010. No estudo, foi verificada uma associação significativa entre aumento nas concentrações de NO_2 e SO_2 , e mortalidade por infarto no miocárdio.

Bastos et al. (2018), por sua vez, apresentam uma abordagem para estimativa de um índice denominado “fração de entrada”, que expressa a exposição da população a emissões atmosféricas, para emissões de material particulado fino ($PM_{2,5}$) proveniente do tráfego veicular de Lisboa e comparada com o modelo de um compartimento. Levando-se em conta a variabilidade espacial e temporal das emissões, bem como a contabilização dos deslocamentos populacionais ao longo do dia, os autores concluíram que 74% da exposição ocorre no raio de 500 metros das principais rodovias, onde vive ou trabalha de 32 a 37% da população do município.

Munir e Habeebullah (2018) enfatizam a importância de monitorar, modelar e gerenciar os impactos ambientais e sanitários da poluição do ar para o desenvolvimento sanitário, uma vez que além dos impactos à saúde humana através de doenças respira-

tórias e cardiovasculares, a poluição atmosférica também afeta construções, monumentos históricos, visibilidade e biodiversidade.

Diante deste contexto, o desenvolvimento de modelos que permitam a estimativa da concentração de um poluente de interesse em uma determinada localização é fundamental para o planejamento da instalação de fontes emissoras e para a minimização dos impactos ambientais e de riscos à saúde humana.

1.3 Objetivos da pesquisa

Este estudo propõe a realização de uma investigação detalhada da dependência paramétrica da equação da difusão e da equação do calor, sendo empregado o método da diferença finita explícita para verificação da influência de variáveis independentes como velocidade do fluxo, coeficiente de dispersão, heterogeneidade do meio, densidade e condutividade térmica no comportamento das equações, especialmente em relação à variação da concentração e da temperatura em função da distância e do tempo em cenários abordados na literatura.

Um dos objetivos desta pesquisa é oferecer uma base para o desenvolvimento de um modelo tridimensional que permita a estimativa da concentração de poluentes de interesse com aplicabilidade no planejamento de fontes de poluição ambiental e sistemas de monitoramento da qualidade do ar.

O presente estudo é dividido em 5 capítulos, com a seguinte estrutura:

- Capítulo 2: Descrição da equação da difusão, dos cenários simulados neste estudo e da equação do calor;
- Capítulo 3: Descrição das etapas do estudo e da aplicação do método para os cenários simulados;
- Capítulo 4: Resultados obtidos para o cenário simulado, análise da influência das variáveis relacionadas à heterogeneidade do meio, velocidade do fluxo e coeficiente de dispersão na variação da concentração de soluto em função do espaço e do tempo, e comparação com estudos abordados recentemente na literatura;
- Capítulo 5: Considerações finais e propostas para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Equação da difusão

2.1 Descrição da equação da difusão

A equação da difusão, pode ser descrita de forma vetorial, conforme Equação 2.1. (GOUSSEAU et al., 2011):

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c = - \nabla \cdot \vec{q}_m + S_c , \quad (2.1)$$

sendo:

$\frac{\partial c}{\partial t}$ = Variação da concentração em função do tempo;

c = concentração;

t = tempo;

u = velocidade;

S_c = termo relacionado à fonte emissora;

q_m = fluxo de massa molecular médio.

O termo relacionado à fonte emissora é obtido a partir do operador divergente da soma entre o fluxo médio de massa molecular, o fluxo convectivo e o fluxo turbulento, conforme Equação 2.2 (GOUSSEAU et al., 2011).

$$S_c = \nabla \cdot (\vec{Q}_m + \vec{Q}_c + \vec{Q}_t), \quad (2.2)$$

sendo:

$\vec{Q}_m$ = Fluxo de massa molecular médio;

$\vec{Q}_c$ = Fluxo convectivo;

$\vec{Q}_t$ = Fluxo de massa turbulento.

A equação da difusão padrão, segundo Povstenko (2015), pode ser descrita a partir da combinação da equação da conservação da massa e da Lei de Fick combinando o fluxo de matéria J ao gradiente de concentração, conforme Equações 2.3 a 2.5, podendo ser interpretada tanto em termos de difusão quanto de condução de calor com um campo adicional de velocidade v :

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} = - \nabla \cdot J, \quad (2.3)$$

$$J = -\kappa \nabla C + \rho v C, \quad (2.4)$$

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} = \kappa - \rho v C \quad (2.5)$$

sendo:

J = Fluxo de matéria;

κ = Coeficiente de difusividade térmica;

ρ = Densidade;

v = Velocidade.

2.2 Equação da difusão em 1+1 dimensão

A equação da difusão unidimensional fazendo-se referência à variável espacial pode ser descrita conforme Equação 2.6 (SAVOVIC e DJORDJEVICH, 2012):

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} C(x, t) - u(x, t) C(x, t) \right], \quad (2.6)$$

sendo:

x = Distância em relação à fonte emissora;

t = Tempo de emissão;

D = Coeficiente de dispersão;

u = Velocidade do fluxo em que o poluente é carreado.

Ressalta-se que dependendo das características da velocidade do fluxo e da dispersão, geralmente representadas por coeficientes variáveis, a equação da difusão pode apresentar características não-lineares extremamente complexas. Deste modo, o estudo da dependência paramétrica da equação da difusão requer a seleção das formas específicas das variáveis u e D .

2.2.1 Cenário de dispersão espacialmente dependente

Conforme descrito no Capítulo 1, um dos cenários abordados por Jaiswal et al. (2009) e por Savovic e Djordjevic (2012) envolve a dispersão de soluto espacialmente dependente com fluxo instável em meio não homogêneo, sendo considerada a existência de uma fonte emissora do tipo pulso, a qual é desativada após um período de tempo.

No cenário em questão, a velocidade do fluxo em que o soluto é transportado é assumida ser temporalmente independente e aumentar linearmente com a posição x . O coeficiente de dispersão D , por sua vez, é assumido ser quadraticamente dependente da posição x , e também temporalmente independente, conforme Equação 2.7.

$$\begin{aligned} u(x, t) &= u_0 (1 + a x) = u(x) , \\ D(x, t) &= D_0 (1 + a x)^2 = D(x) . \end{aligned} \quad (2.7)$$

Considerando se tratar de meio heterogêneo, Savovic e Djordjevic (2013) apresentaram uma adaptação da equação da difusão para o cenário conforme Equação 2.8.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} C(x, t) &= \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} [(1 + a x)(2 a D_0 - u_0)] \\ &+ D_0 (1 + a x)^2 \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} - u_0 a C(x, t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

sendo:

C = Concentração;

a = Parâmetro de heterogeneidade do meio;

u_o = Velocidade do fluxo na origem;

D_0 = Coeficiente de dispersão na origem.

Considerando que o coeficiente C^{in} refere-se à concentração de soluto já existente no meio antes da ativação da fonte, e que a distância infinita (x_∞) é considerada como aquela em que não há mais influência da fonte emissora, as condições iniciais e de contorno para o cenário simulado são apresentadas conforme Equação 2.9 (JAISWAL et al., 2009; SAVOVIC e DJORDJEVICH, 2013):

$$\begin{aligned} C(x, 0) &= \frac{C^{in}}{(1 + ax)} , \\ C(0, t) &= \begin{cases} C_0 , & 0 < t \leq t_0 , \\ 0 , & t > t_0 , \end{cases} \\ \left. \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right|_{x \rightarrow \infty} &= 0. \end{aligned} \tag{2.9}$$

Santana (2017) realiza a análise da dependência paramétrica da equação da difusão unidimensional para o cenário descrito nesta subseção, comparando as soluções analítica abordada em Jaiswal et al. (2009) e numérica abordada em Savovic e Djordjevic (2013), em pesquisa de mestrado que teve colaboração deste autor.

2.2.2 Cenário de dispersão temporalmente dependente

O cenário de dispersão temporalmente dependente, também simulado por Jaiswal et al. (2009) e por Savovic e Djordjevic (2013), é caracterizado pela dispersão de soluto em meio homogêneo com fluxo uniforme. No caso, os parâmetros velocidade do fluxo e coeficiente de dispersão são temporalmente dependente e espacialmente independente, conforme Equação 2.10.

$$\begin{aligned} u(x, t) &= u_0 = \text{constante} , \\ D(x, t) &= D_0 (1 - m t)^{-1} = D(t) , \end{aligned} \tag{2.10}$$

Considerando que o coeficiente de dispersão é proporcional a um parâmetro m , de dimensão inversa ao tempo, Savovic e Djordjevic (2013) reescrevem a equação da difusão para o cenário conforme Equação 2.11.

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = -u_0 \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + \frac{D_0}{1 - m t} \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.11)$$

sendo:

u_0 = Velocidade do fluxo uniforme;

D_0 = Coeficiente de dispersão inicial;

m = Parâmetro relacionado à dependência temporal da dispersão, com dimensão inversa ao tempo.

Levando-se em conta que o fluxo é considerado ser uniforme, o valor do parâmetro u_0 é o mesmo em toda a faixa de domínio e do parâmetro D_0 depende apenas do tempo, diferentemente do cenário espacialmente dependente, em que os valores de ambos os parâmetros referem-se apenas à origem do domínio, onde a fonte está localizada.

As condições de contorno adotadas para o cenário de dispersão espacialmente dependente são exatamente as mesmas do cenário descrito na Seção 2.2, no entanto a condição inicial, é divergente, visto que não há influência do parâmetro de heterogeneidade do meio. Levando-se em conta o coeficiente γ , proporcional à variação da concentração do soluto, com dimensão inversa à distância, a condição inicial é descrita conforme Equação 2.12.

$$C(x, 0) = C^{in} \text{Exp}(-\gamma x). \quad (2.12)$$

A investigação da dependência paramétrica da equação da difusão unidimensional para o cenário descrito nesta subseção será contemplada nos Capítulos 3 e 4 do presente estudo.

2.3 Equação da difusão em 2+1 dimensões

A equação da difusão bidimensional leva em conta coeficientes longitudinais e transversais de velocidade do fluxo e coeficiente de dispersão, sendo descrito conforme Equação 2.13 (DJORDJEVICH e SAVOVIC, 2013):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c(x, y, t) &= \frac{\partial}{\partial x} [D_x(x, t) \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial x} - u(x, t) c(x, y, t)] \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} [D_y(y, t) \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} - v(y, t) c(x, y, t)]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

sendo:

$u(y, t)$ = Componente longitudinal de velocidade do fluxo;

$v(y, t)$ = Componente transversal de velocidade do fluxo;

$D_x(x, t)$ = Coeficiente de dispersão longitudinal;

$D_y(y, t)$ = Coeficiente de dispersão transversal;

2.3.1 Equação da condução do calor

Conforme descrito no Capítulo 1 e na Seção 2.1, a equação do calor é um caso específico da equação da difusão, resultante da combinação da equação da conservação da massa, e da Lei de Fick, ocorrendo quando há fluxo de energia térmica e o coeficiente D é constante.

A equação diferencial, referente à condução do calor, bidimensional é descrita na Equação 2.14 (BECKER e KAUSS, 2016).

$$\rho c_p \frac{\partial}{\partial t} T(x, y, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + Q \quad (2.14)$$

sendo:

c_p = Calor específico;

Q = Produção de calor.

κ_x e κ_y = Condutividade térmica nos eixos x e y , respectivamente.

Quando a transferência de calor ocorre de forma homogênea, a condição é denominada isotrópica, sendo assumido que os coeficientes κ_x e κ_y são equivalentes, possuindo assim uma solução mais simples. No entanto, para representação mais realística da condução do calor, deve se levar em conta que a mesma geralmente não ocorre de forma homogênea, e que as condições geralmente não são isotrópicas. Quando se trata de condição isotrópica, a equação pode ser simplificada, conforme Equação 2.15.

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x, y, t) = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{Q}{\rho c_p}. \quad (2.15)$$

Capítulo 3

Métodos numéricos

3.1 Método da diferença finita explícita

O método das diferenças finitas consiste basicamente na discretização de equações diferenciais parciais através de intervalos preestabelecidos em um conjunto de pontos de uma grade dentro da faixa de domínio.

As diferenças finitas podem ser empregadas com os esquemas de diferença central, progressiva ou regressiva, de acordo com o intervalo estabelecida para aproximação da função derivativa em relação à variável de interesse, conforme equações 3.1, 3.2 e 3.3., respectivamente (adaptado de CAUSON e MINGHAM, 2010).

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2 \Delta x} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}. \quad (3.3)$$

Para funções derivativas de segunda ordem, por sua vez, a aproximação por diferenças finitas é geralmente realizada pelo esquema da diferença central, conforme Equação 3.4 (adaptado de CAUSON e MINGHAM, 2010).

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1} - 2 u_i + u_{i-1}}{2 \Delta x^2}. \quad (3.4)$$

Ressalta-se que a aplicação do esquema das diferenças progressiva e regressiva para funções derivativas de primeira ordem implicam em erro de truncamento de primeira

ordem, e que o emprego do esquema da diferença central para funções derivativas tanto de primeira quanto de segunda ordem implicam em erro de truncamento de segunda ordem (adaptado de CAUSON e MINGHAM, 2010).

Para discretização das funções derivativas de primeira ordem, o método da diferença finita pode ser tanto explícito, quando é empregado o esquema da diferença progressiva para aproximação das funções derivativas temporais, ou implícito, quando é empregado o esquema da diferença regressiva para essas funções (DAVIS, 2010).

No presente estudo, foi empregado o método da diferença finita explícita com o esquema da diferença central para representação das funções $\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}$ e $\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}$, e da diferença progressiva para representação do termo $\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}$.

3.2 Emprego do método para cenário de dispersão em 1+1 dimensão

No presente estudo, o método da diferença finita explícita foi empregado para avaliação da dependência paramétrica da equação da difusão nos dois cenários simulados por Jaiswal et al. (2009) e por Savovic e Djordjevich (2013), descritos no Capítulo 2, de dispersão de soluto com uma fonte emissora do tipo pulso, a qual é desativada após um determinado período de tempo.

Para ambos os cenários simulados, os valores de referência utilizado pelos autores e para o presente estudo são os que constam da Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Valores de referência utilizados para os parâmetros da equação da difusão

C_0	C_{in}	t_0 (anos)	u_0 (km/ano)	D_0 (km ² /ano)	γ (km ⁻¹)	m (ano ⁻¹)	x_∞ (km)
1,0	0,01	1,8	0,25	0,14	0,01	0,1	20

sendo:

C_0 = Concentração na fonte emissora;

t_0 = Tempo em que a fonte emissora é desativada;

γ = Constante proporcional à concentração do soluto.

3.2.1 Cenário 1: Dispersão espacialmente dependente

A técnica da transformada de Laplace foi aplicada por Jaiswal et al. (2009) para o cenário de dispersão de soluto espacialmente dependente, caracterizado pela dispersão de soluto em meio heterogêneo com fluxo não uniforme, conforme Equação 3.5.

$$C(x, t) = \begin{cases} C_1(x, t) - C_2(x, t) + C_3(x, t) , & 0 < t \leq t_0 , \\ C_1(x, t) - C_1(x, t - t_0) - C_2(x, t) + C_3(x, t) , & t > t_0 , \end{cases} \quad (3.5)$$

em que:

$$\begin{aligned} C_1(x, t) &= \frac{C_0}{2} \left\{ (1 + ax)^{-1} \operatorname{erfc} \left[\frac{\ln(1 + ax)}{2a\sqrt{D_0 t}} - \beta\sqrt{t} \right] \right. \\ &\quad \left. + (1 + ax)^\delta \operatorname{erfc} \left[\frac{\ln(1 + ax)}{2a\sqrt{D_0 t}} + \beta\sqrt{t} \right] \right\} , \\ C_2(x, t) &= \frac{C_{in}}{C_0} C_1(x, t) , \\ C_3(x, t) &= \frac{C_{in}}{(1 + ax)} , \\ \omega_0 &= au_0 - a^2 D_0 , \\ \beta^2 &= \frac{(\omega_0/2a)^2}{D_0} + au_0 , \\ \delta &= \frac{u_0}{aD_0} . \end{aligned}$$

Savovic e Djordjevic (2013), por sua vez, apresentam solução numérica para o cenário, com o emprego da diferença finita explícita, adotando os passos preestabelecidos $\Delta x = 0,1$ km e $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ ano, representados por meio dos índices i e j , respectivamente, do seguinte modo:

$$C_{i,j+1} = (G_i - H_i) C_{i-1,j} + (G_i + H_i) C_{i+1,j} \quad (3.6)$$

$$+ (1 - 2G_i - J) C_{i,j} , \quad (3.7)$$

em que:

$$G_i = \frac{D_0(1 + ax_i)^2 \Delta t}{(\Delta x)^2} , \quad (3.8)$$

$$H_i = \frac{(2aD_0 - u_0)(1 + ax_i)\Delta t}{2 \Delta x} , \quad (3.9)$$

$$J = u_0 a \Delta t . \quad (3.10)$$

No presente estudo, é realizada uma expansão do estudo desenvolvido por Santana (2017), em que é realizada uma investigação detalhada e sistemática do comportamento da equação da difusão à medida em que os parâmetros a , u_0 e D são alterados independentemente para o cenário, considerando tanto a fonte ativada quanto a fonte desativada, com o emprego do método da diferença finita explícita e a adoção dos mesmos passos utilizados para x e t por Savovic e Djordjevic (2013). Ainda, é realizada uma comparação do método numérico com a solução analítica apresentada por Jaiswal et al. (2009).

3.2.2 Cenário 2: Dispersão temporalmente dependente

Conforme descrito no Capítulo 2, o cenário de dispersão temporalmente dependente é caracterização pela dispersão de soluto em meio homogêneo com fluxo uniforme. Para o cenário em questão, também foi empregado o método da diferença finita explícita por Savovic e Djordjevic (2013), considerando as condições iniciais e de contorno descritas no Capítulo 2, conforme Equação 3.7.

O método da diferença finita explícita também foi empregado por Savovic e Djordjevic (2013) para o cenário de dispersão temporalmente dependente adotando os mesmos passos preestabelecidos utilizados pelos autores. Considerando o meio homogêneo e a velocidade uniforme, e o uso do esquema da diferença central para funções derivativas espaciais de primeira e segunda ordem, e da diferença progressiva para a função derivativa de primeira ordem, a equação é reescrita na forma vetorial do seguinte modo:

$$C_{i,j+1} = (E_i - F_i) C_{i-1,j} + (1 - 2E_i) C_{i,j} + (E_i + F_i) C_{i+1,j} \quad (3.11)$$

em que:

$$E_i = \frac{D_0 \Delta t}{(1 - mt) \Delta x^2} , \quad (3.12)$$

$$F_i = \frac{-u_0 \Delta t}{2 \Delta x} . \quad (3.13)$$

Assim como realizado para o cenário de dispersão espacialmente dependente, também foi empregado o método da diferença finita explícita para a investigação da dependência paramétrica da equação da difusão no presente cenário à medida em que os parâmetros u_0 e D_0 são alterados independentemente, considerando a fonte emissora ativada e desativada com a utilização dos mesmos intervalos adotados por Savovic e Djordjevich (2013). Para as simulações, foram utilizados o compilador GFortran 95 e o software Wolfram Mathematica 11.1.1.

3.3 Emprego do método para dispersão em 2+1 dimensões

Conforme descrito no Capítulo 2, a equação da difusão bidimensional na variável espacial requer o emprego de coeficientes longitudinal e transversal relacionados à velocidade do fluxo e ao coeficiente de dispersão para sua resolução.

Ressalta-se que uma das limitações para resolução da equação da difusão bidimensional é a memória requerida para sua resolução quando há necessidade de armazenamento de dados referentes aos intervalos utilizados na simulação em uma matriz. Conforme Figura 3.1, verifica-se que com o uso do software Wolfram Mathematica para 10^5 intervalos de t , por exemplo, a memória requerida é de aproximadamente 1 GB, mais de 100 vezes superior ao requerido para a resolução da equação da difusão unidimensional nos cenários descritos na Seção 3.2. Para o caso tridimensional, por sua vez, a memória ultrapassa 1.000 GB, sendo necessária a utilização de técnicas que não requeiram o armazenamento dos resultados referente a cada passo adotado, de modo a compatibilizar a memória e o tempo computacional.

3.3.1 Equação do calor bidimensional

Conforme descrito no capítulo 2, a equação do calor governa a difusão térmica é um caso específico da equação da difusão, que ocorre quando há fluxo de energia térmica ao invés de fluxo de matéria, apresentando solução mais simples em relação à equação da difusão com coeficientes variáveis.

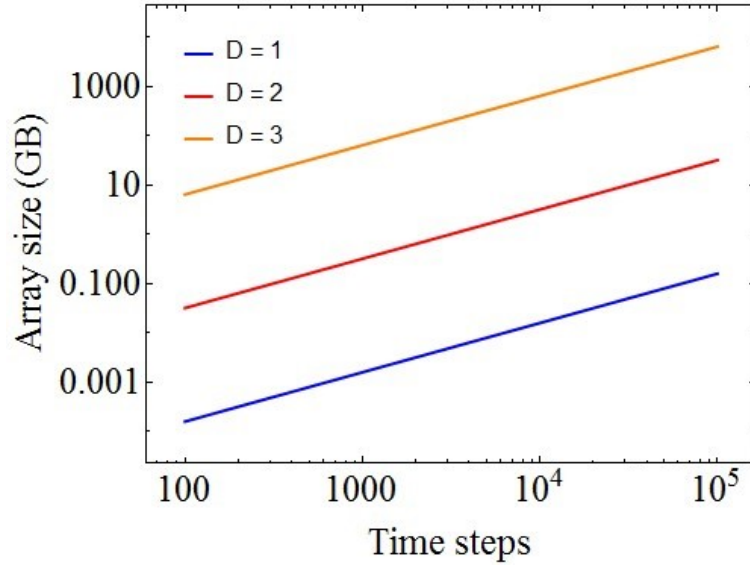


Figura 3.1: Memória ocupada de acordo com o número de passos utilizados nas iterações para os cenários de dispersão em uma, duas e em três dimensões.

Com o emprego do método da diferença finita explícita, a equação do calor bidimensional (Eq. 2.14) pode ser reescrita da seguinte forma (BECKER e KAUSS, 2016):

$$\frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n}{\Delta t} = \kappa \left(\frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) + \frac{Q_{i,j}^n}{\rho c_p}. \quad (3.14)$$

Definindo os coeficientes s_x e s_y , da seguinte forma, a equação do calor pode ser reescrita conforme Eq. 3.16.

$$\begin{aligned} s_x &= \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta x)^2}, \\ s_y &= \frac{\kappa \Delta t}{(\Delta y)^2} \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} T_{i,j}^{n+1} &= T_{i,j}^n + s_x (T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n) \\ &\quad + s_y (T_{i,j+1}^n - 2T_{i,j}^n + T_{i,j-1}^n) + \frac{Q_{i,j}^n}{\rho c_p}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

De modo análogo ao realizado para os cenários de dispersão de soluto em 1+1 dimensão, também foi realizada uma investigação detalhada e sistemática do comportamento da equação do calor à medida em que os parâmetros κ e ρ são alterados independentemente, com presença e ausência de fonte de calor. Após a validação com o código apresentado em Becker e Kauss (2016) para resolução da equação do calor bidimensional no software

Matlab, foi realizada investigação para as condições isotrópica e não-isotrópica, com a presença e a ausência da fonte de calor.

Os valores de referência utilizados para as simulações da equação do calor são apresentados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Valores de referência utilizados para os parâmetros da equação do calor.

$T_0(^{\circ}C)$	$\kappa (m^2/s)$	$c_p (J/kg.^{\circ}C)$	$\rho (kg/m^3)$
100,0	1,0	1,0	1,0

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1 Dependência paramétrica da equação da difusão em 1+1 dimensão

Inicialmente, foi realizada uma investigação na variação da solução da equação da difusão unidimensional na variável espacial à medida em que os valores dos parâmetros considerados independentes para os cenários abordados no Capítulo 2 são alterados com base nos valores de referência que constam da Tabela 3.1, levando-se em conta situações em que a fonte está tanto ativada quanto desativada.

4.1.1 Cenário 1: Dispersão de soluto espacialmente dependente Parâmetro de heterogeneidade do meio

Para avaliação da influência do parâmetro de heterogeneidade do meio, o qual está diretamente relacionado à densidade do mesmo com dimensão inversa à distância, na variação da concentração de soluto, foi verificado que para valores de t superiores a 1,8 ano, correspondente ao momento em que a fonte é desativada, a integração numérica só converge para uma solução estável para valores de a de até $1,32 \text{ km}^{-1}$, impossibilitando a aplicação do método para valores mais altos do referido parâmetro.

Neste contexto, foram realizadas simulações da variação de C/C_0 em função da distância comparando quatro valores distintos do parâmetro, sendo estes de $a=0,15$; $a=0,65$; $a=1,0$ e $a=1,32 \text{ km}^{-1}$. A simulação foi realizada para $t=0,7$ e $1,4$ ano, enquanto a fonte está ativada e para $t=2,1$ e $2,8$ anos, após a desativação da mesma, contemplando tanto a

solução analítica abordada por Jaiswal et al. (2009) quanto a solução numérica abordada por Savovic e Djordjevic (2013).

Conforme Figura 4.1, verifica-se que as soluções analíticas e numérica são compatíveis, e que a influência do parâmetro de heterogeneidade do meio apresenta variação em relação à distância da fonte emissora, visto que em sua proximidade a razão C/C_0 é mais elevada para meios com menor heterogeneidade e após uma determinada distância ocorre o inverso, ou seja, os valores de C/C_0 passam a ser mais altos para meios de maior heterogeneidade. Observa-se também que para a medida em que o tempo aumenta, a intersecção entre as curvas dos quatro valores de C/C_0 fica mais distante da fonte emissora, característica também observada em investigação realizada por Pereira (2014) para cenário de dispersão de soluto com fonte emissora contínua.

Após a desativação da fonte, também foram verificados maiores valores de C/C_0 para meios mais homogêneos próximo à fonte emissora e o inverso para distâncias maiores, havendo a mesma intersecção nas curvas de variação de C/C_0 em função da distância observada para a fonte ativada. No entanto, após a desativação da fonte, é observado que há um pico de máxima concentração próximo a sua localização, e que posteriormente, os valores começam a reduzir, demonstrando a redução de sua influência à medida em que a distância aumenta.

Também foi estimada a variação de C/C_0 em função do tempo, comparando os mesmos valores do parâmetro a , para distâncias fixas em relação à fonte emissora, sendo fixados os valores de $x=0,1$; $0,5$; $1,0$ e $2,0$ km. Conforme Figura 4.2, verifica-se que os valores de C/C_0 aumentam até 1,8 ano, momento em que a fonte é desativada e, em seguida, tendem a diminuir, exceto quando para distâncias maiores de x , quando há uma ligeira elevação dos valores de C/C_0 , equivalente ao pico de máxima concentração já observado nos gráficos apresentados na Figura 4.1. No entanto, mesmo para distâncias maiores em relação à fonte emissora, após o pico de máxima concentração, a curva de variação de C/C_0 em função do tempo passa a ser decrescente.

A Figura 4.2 também evidencia que apenas para $x = 0,1$ km, a concentração é mais elevada para menores valores do parâmetro a e que para as outras distâncias simuladas, os valores de C/C_0 são mais elevados para maiores valores do parâmetro a até um determinado período de tempo, quando passa a ser maior para maiores valores do parâmetro a .

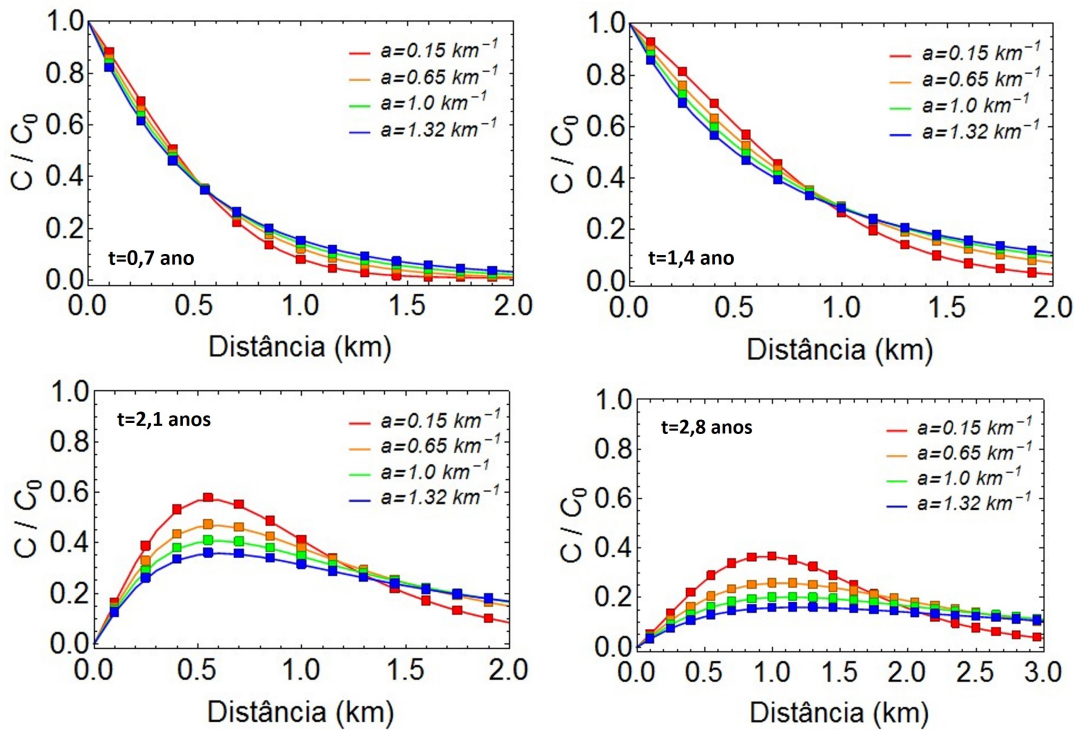


Figura 4.1: Efeito do parâmetro de heterogeneidade do meio na variação da concentração de soluto em função da distância - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.

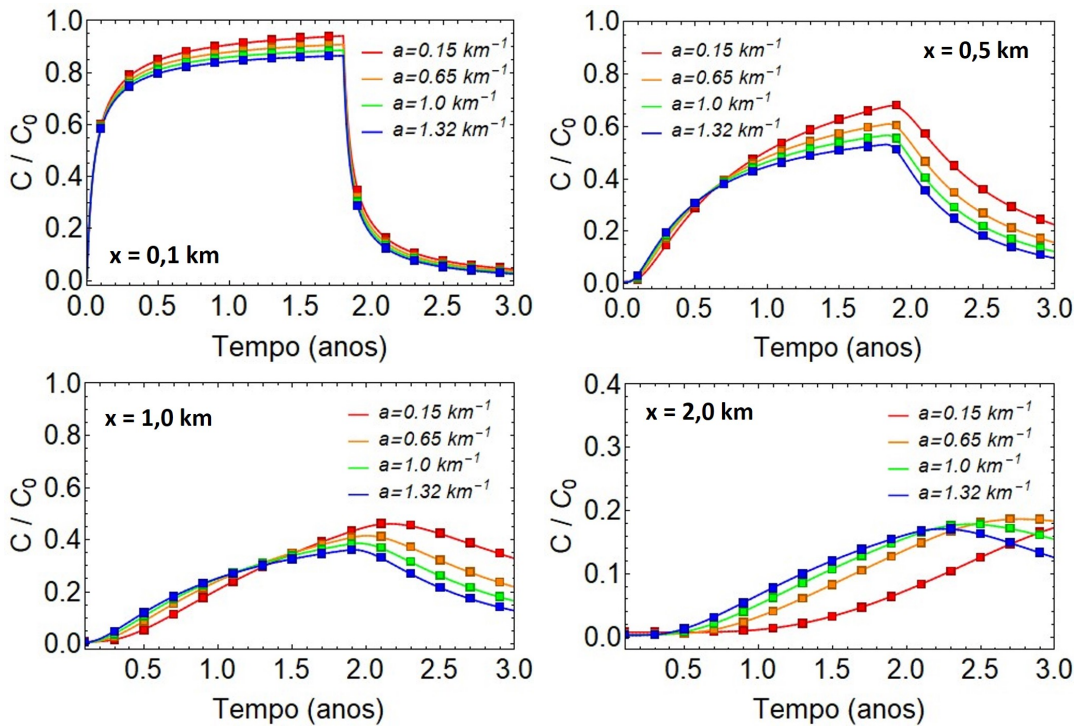
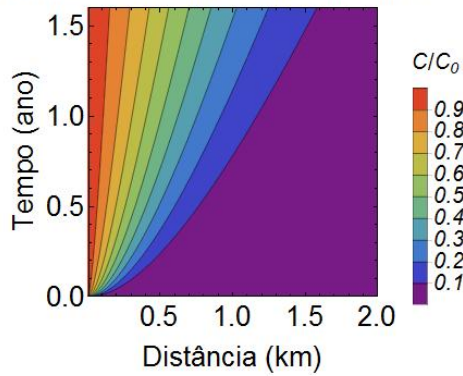
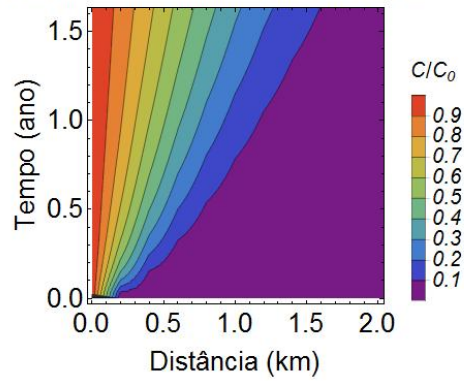
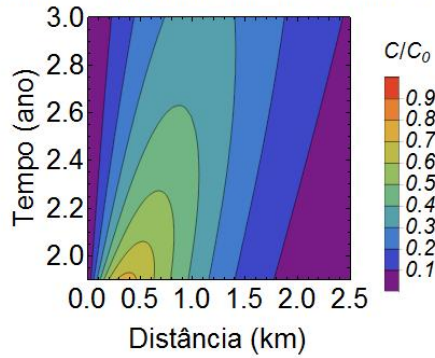
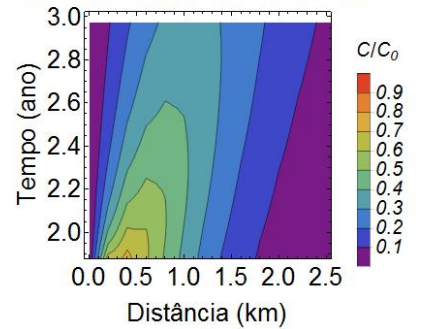
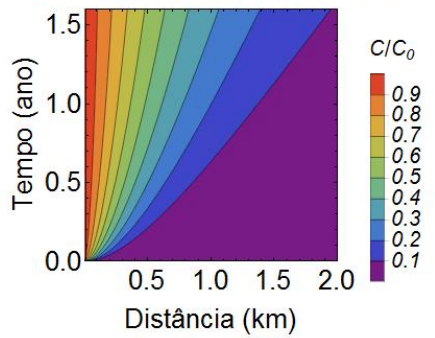
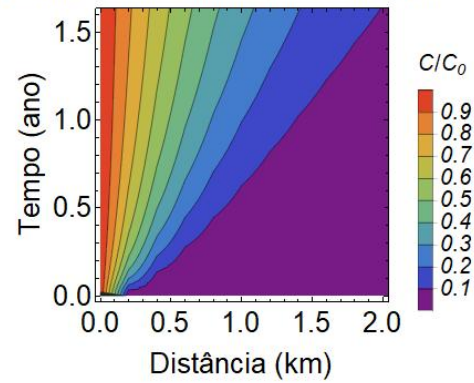
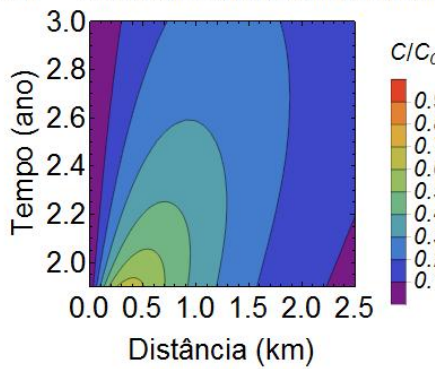
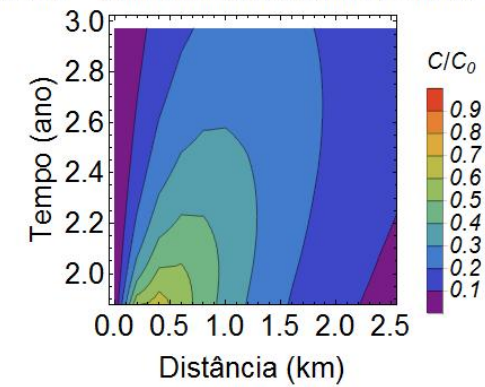


Figura 4.2: Efeito do parâmetro de heterogeneidade do meio na variação da concentração de soluto em função do tempo - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.

$a = 0.15 \text{ km}^{-1}$ – solução analítica para a fonte ativada $a = 0.15 \text{ km}^{-1}$ – solução numérica para a fonte ativada $a = 0.15 \text{ km}^{-1}$ – solução analítica para a fonte desativada $a = 0.15 \text{ km}^{-1}$ – solução numérica para a fonte desativada $a = 0.65 \text{ km}^{-1}$ – solução analítica para a fonte ativada $a = 0.65 \text{ km}^{-1}$ – solução numérica para a fonte ativada $a = 0.65 \text{ km}^{-1}$ – solução analítica para a fonte desativada $a = 0.65 \text{ km}^{-1}$ – solução numérica para a fonte desativada

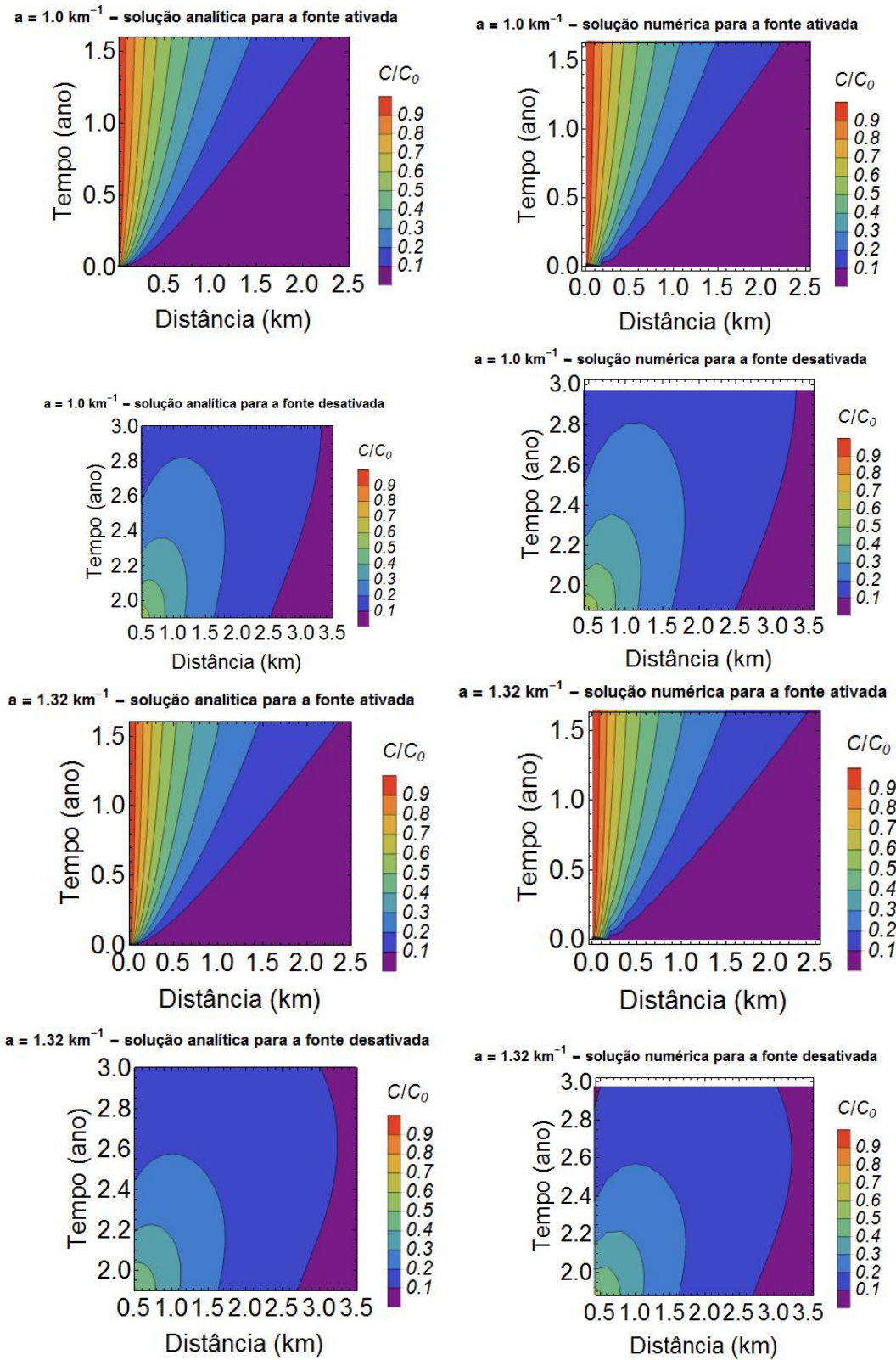


Figura 4.3: Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de heterogeneidade do meio para o cenário de dispersão espacialmente dependente.

Na Figura 4.3, por sua vez, são apresentados as variações de C/C_0 em função do tempo e da distância simultaneamente para os quatro valores de a , sendo apresentada também comparação das soluções analítica e numérica, ficando evidenciada a compatibilidade das soluções. Nas figuras apresentadas, a cor vermelha representa a máxima concentração, e a cor roxa representa concentração equivalente a zero, sendo observados maiores valores de C/C_0 nas proximidades da fonte e para maiores valores de t para a fonte ativada, bem como um ligeiro aumento e uma posterior redução dos valores de C/C_0 em função da distância para a fonte desativada, demonstrando a influência da concentração já existente.

De modo geral, observa-se que a influência do parâmetro de heterogeneidade do meio é similar para o cenário de fonte emissora do tipo pulso abordada por Jaiswal et al. (2009) e por Savovic e Djordjevic (2013), e para o cenário de fonte emissora contínua abordada em Kumar et al. (2010), Savovic e Djordjevic (2012) e Pereira (2014), diferindo apenas pelo ligeiro aumento de C/C_0 em relação à distância nas proximidades da fonte após a sua desativação.

Velocidade do fluxo na origem

Conforme descrito no Capítulo 2, para o cenário de dispersão espacialmente dependente, o parâmetro u_0 refere-se à velocidade na posição $x=0$ km, onde está localizada a fonte emissora.

Diferentemente do parâmetro de heterogeneidade do meio, foram verificadas limitações na solução numérica para o parâmetro de velocidade do fluxo na origem apenas para valores de u_0 superiores a 100 km/ano para valores de t em que a fonte está desativada, havendo assim um amplo domínio de convergência da solução.

De modo análogo ao realizado para o parâmetro de heterogeneidade do meio, também foram adotados quatro valores de u_0 , sendo eles $u_0 = 0,1$; $u_0 = 0,25$; $u_0 = 0,75$ e $u_0 = 1,25$ km/ano, e mantendo os valores de referência para os demais parâmetros conforme consta da Tabela 3.1.

Conforme Figura 4.4, verifica-se que valores mais elevados de velocidade do fluxo na origem implicaram em maiores valores de C/C_0 para o cenário simulado com a fonte ativada. Após a desativação da fonte, por sua vez, o efeito é similar àquele verificado para o parâmetro de heterogeneidade do meio, visto que nas proximidades da fonte, a concentração de soluto é mais elevada para menores valores de u_0 e após um pico de máxima

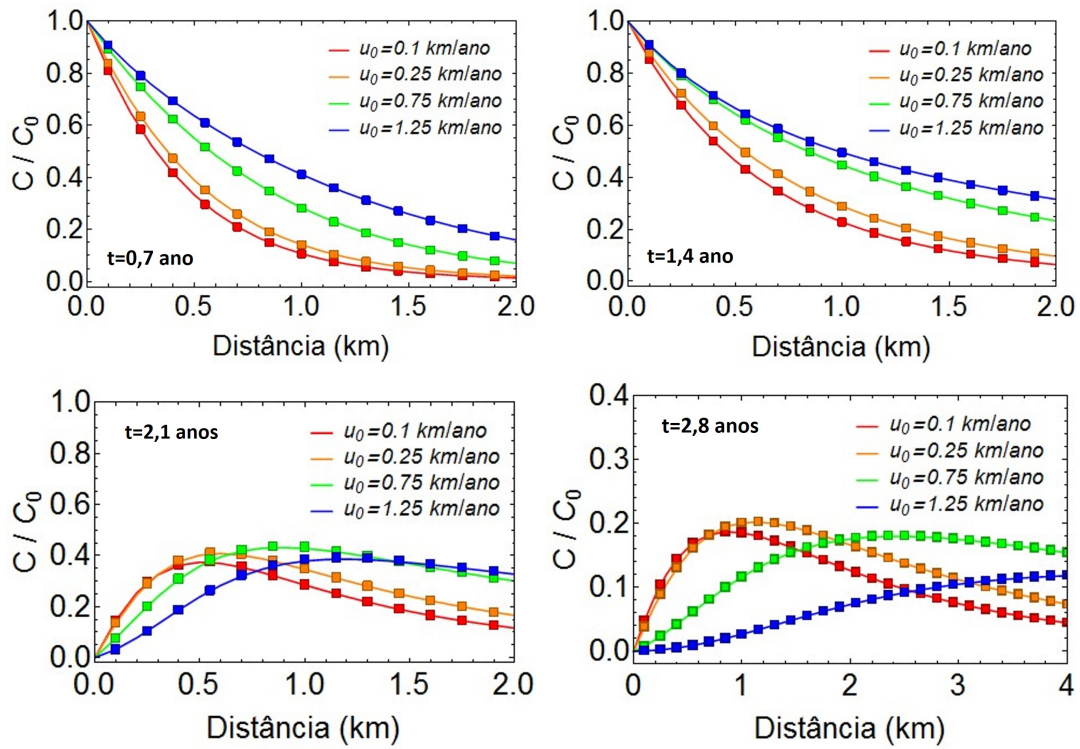


Figura 4.4: Efeito da velocidade do fluxo em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função da distância - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.

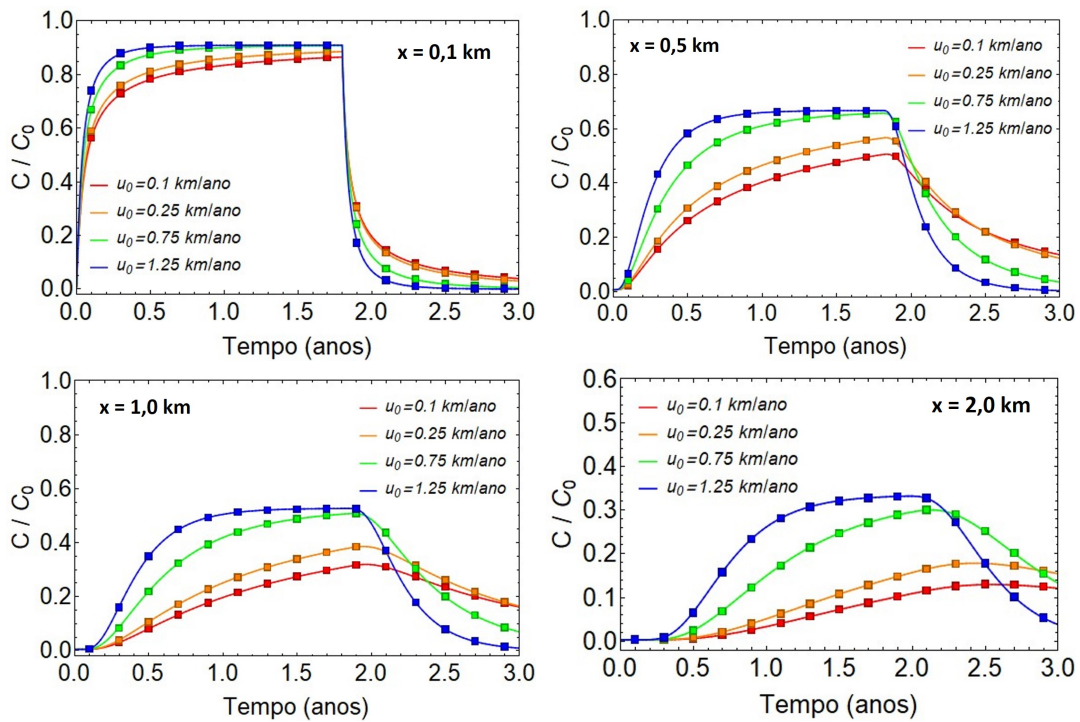
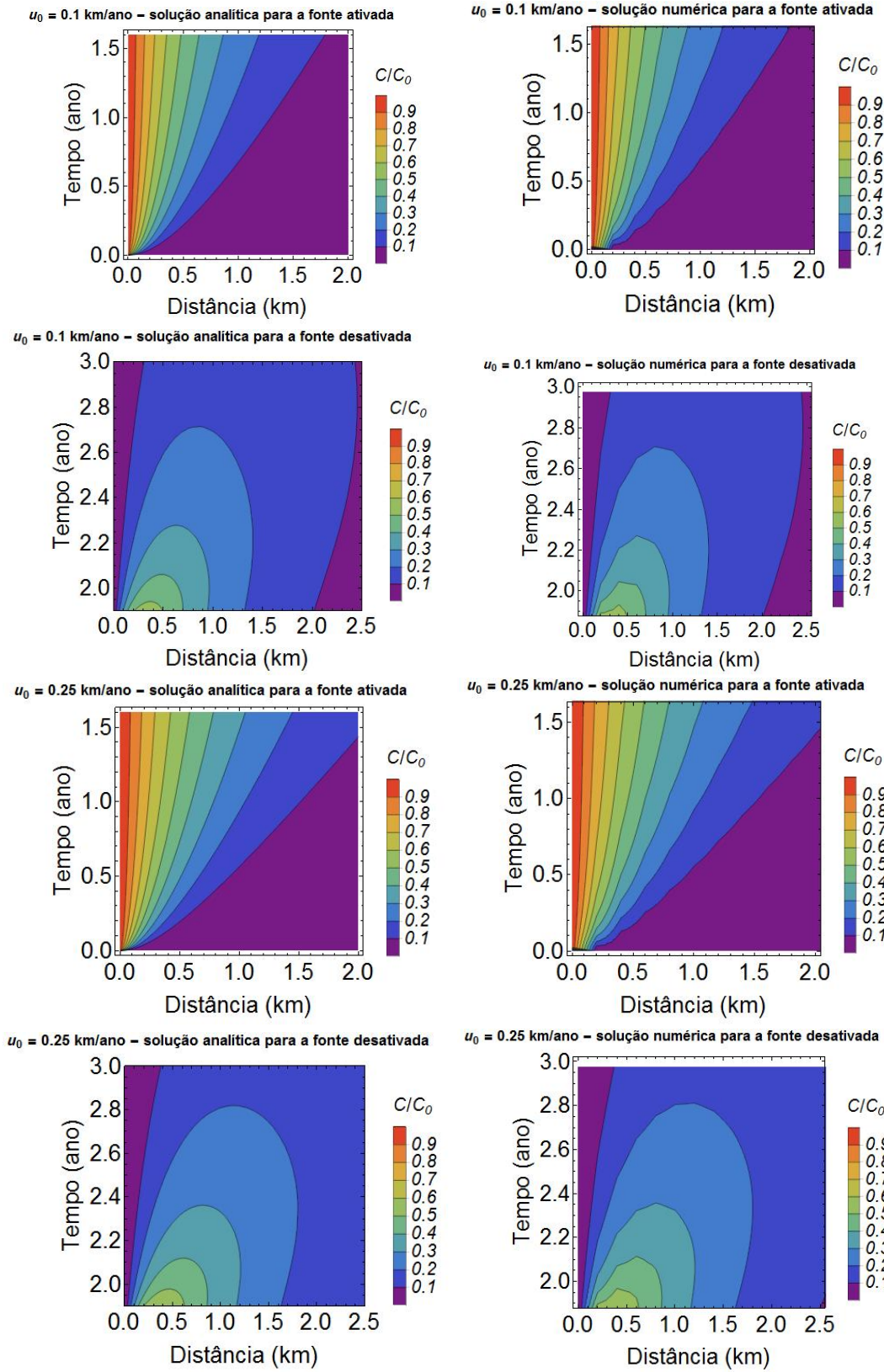


Figura 4.5: Efeito da velocidade do fluxo em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função do tempo - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.



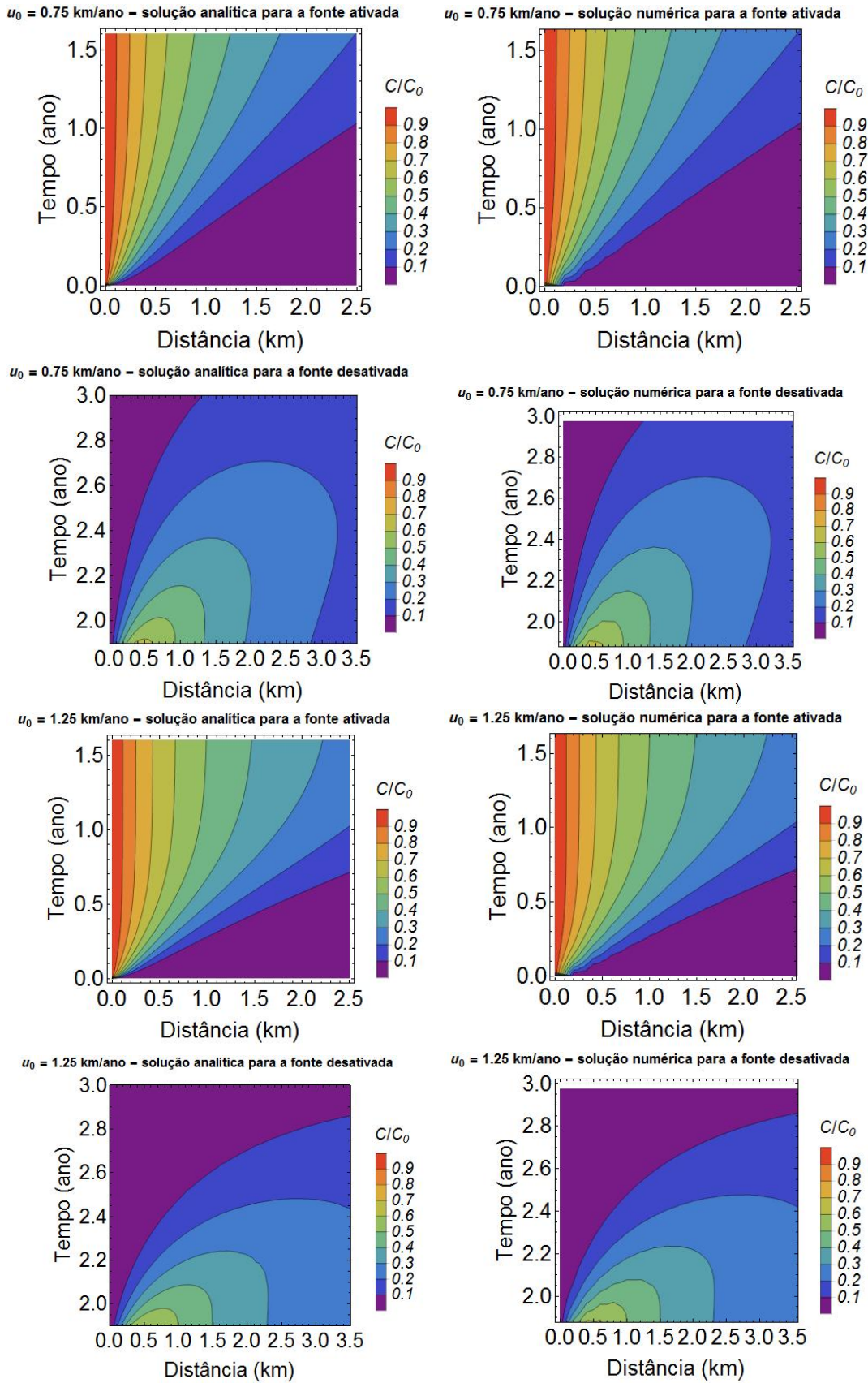


Figura 4.6: Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de velocidade do fluxo em $x = 0$ para o cenário de dispersão espacialmente dependente.

concentração, ocorre o inverso, ou seja, maiores valores de u_0 implicam em condições mais elevadas.

Na Figura 4.5 é apresentada a variação de C/C_0 em função do tempo, comparando os quatro valores de u_0 para as mesmas distâncias fixas adotadas para o parâmetro de heterogeneidade do meio, ou seja, $x=0,1$; $0,5$; $1,0$ e $2,0$ km, ficando evidenciado que enquanto a fonte está ativada, os valores de concentração são mais elevados para maiores valores do parâmetro u_0 , e que após a desativação passa a ocorrer o inverso, ou seja, concentrações mais elevadas para menores valores de u_0 . Assim como observado para o parâmetro de heterogeneidade do meio, a curva de variação de C/C_0 em função do tempo é crescente quanto a fonte está ativada e decrescente após o tempo em que ocorre o pico de máxima concentração posterior à desativação da fonte.

A Figura 4.6, referente à distribuição dos valores de C/C_0 em função da distância e do tempo, simultaneamente, também evidencia que para a fonte ativada, maiores valores de u_0 implicam em maiores concentrações e que para a fonte desativada há um valor máximo de C/C_0 na proximidade da fonte e, posteriormente, esse valor começa a ser reduzido indicando que à medida em que a distância em relação à fonte emissora aumenta, as condições passam a ser mais favoráveis para a dispersão.

Coefficiente de dispersão na origem

Assim como observado para o parâmetro de heterogeneidade do meio, também foram verificadas limitações na aplicação do método numérico para o coeficiente de dispersão na posição $x=0$ km, representado por D_0 , sendo verificado que tanto com a fonte ativada quanto com a mesma desativada, o método converge para uma solução estável apenas para valores muito baixos do referido parâmetro, de até $0,24 \text{ km}^2/\text{ano}$, indicando assim uma alta sensibilidade para o parâmetro, o qual representa a suscetibilidade do meio para o transporte de partículas.

Considerando o domínio de convergência para o parâmetro D_0 , foram realizadas simulações da variação de C/C_0 em função do tempo com os valores de referência da Tabela 3.1, comparando quatro valores do parâmetro, sendo estes de $D_0 = 0,03$; $D_0 = 0,08$; $D_0 = 0,14$ e $D_0 = 0,21 \text{ km}^2/\text{ano}$.

Conforme Figura 4.7, verifica-se que a variação de C/C_0 em função do espaço e do tempo em relação ao coeficiente de dispersão é muito similar à que foi observada para

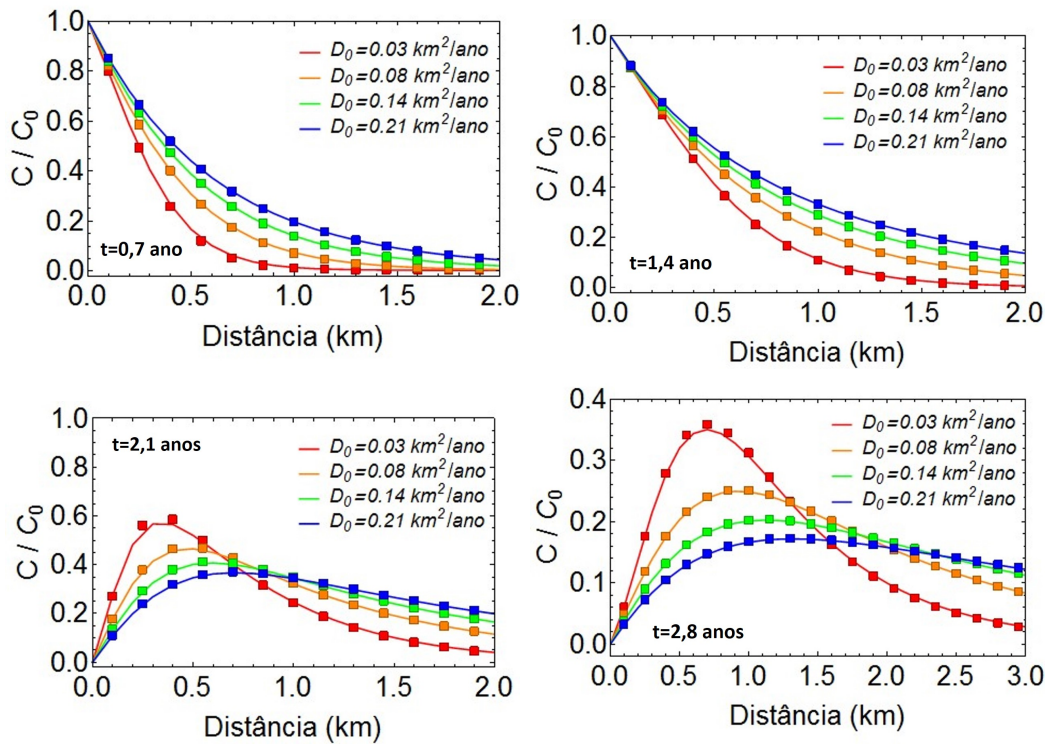


Figura 4.7: Efeito do coeficiente de dispersão em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função da distância - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.

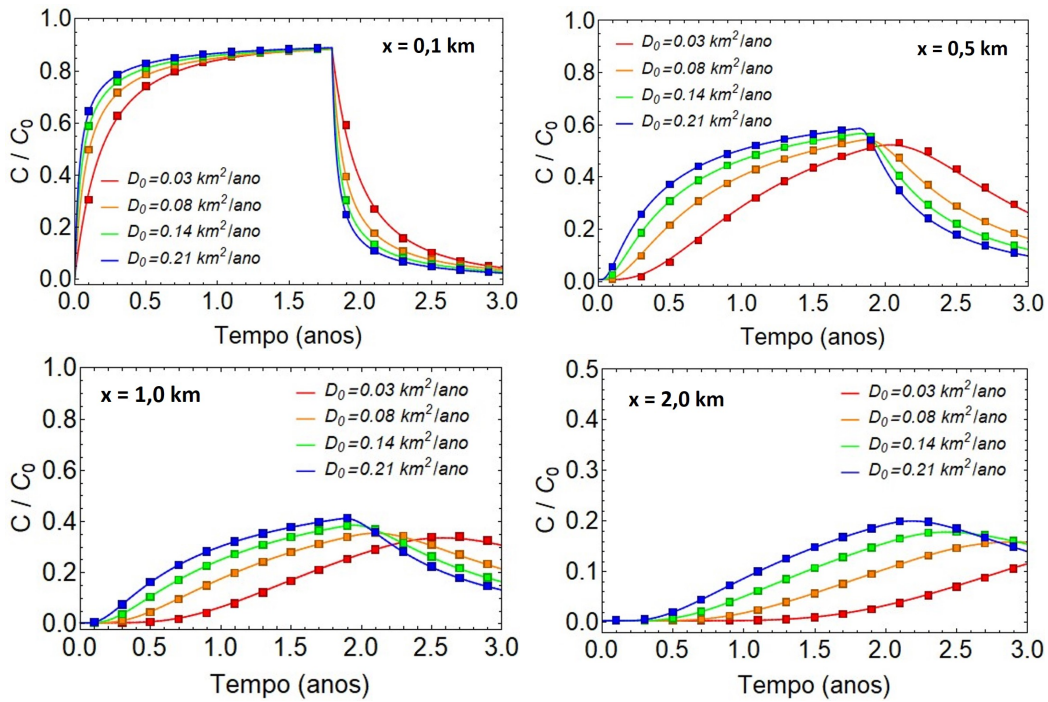


Figura 4.8: Efeito do coeficiente de dispersão em $x = 0$ na variação da concentração de soluto em função do tempo - solução analítica representada por pontos e solução numérica por curvas.

a velocidade do fluxo na origem, ou seja, com a fonte ativada, a concentração apresenta valores mais elevados para maiores valores de D_0 , e com a fonte desativada também há um pico de máxima concentração e uma intersecção nas curvas, sendo que próximo à fonte os valores de C/C_0 são mais elevadas para maiores valores de D_0 e após uma certa distância são mais elevadas para maiores valores de D_0 .

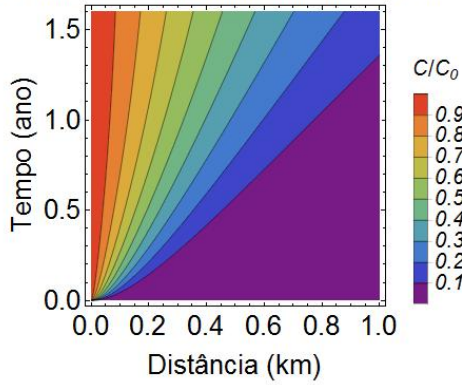
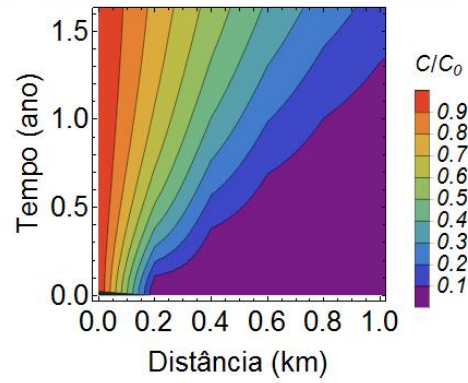
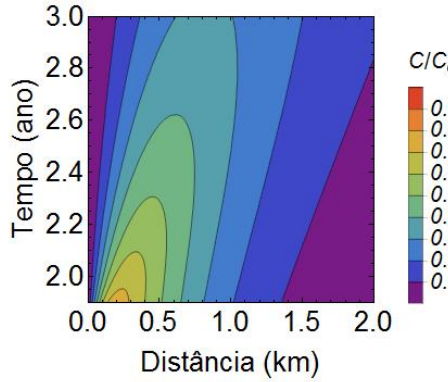
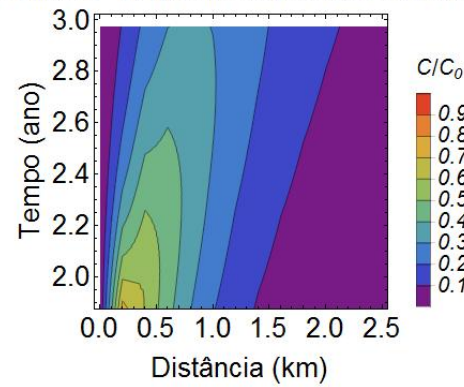
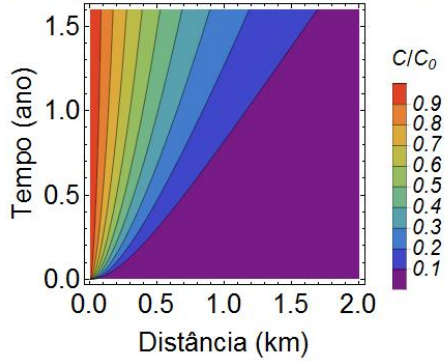
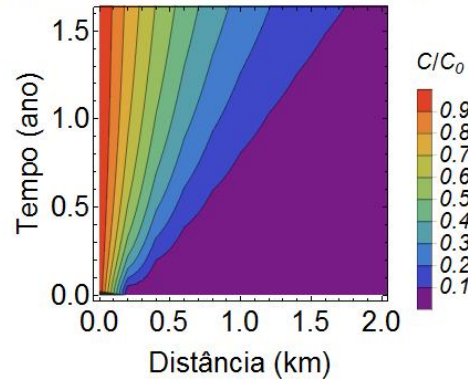
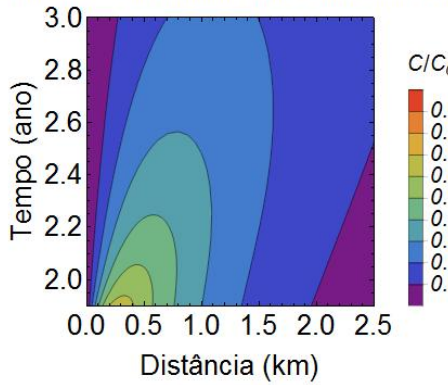
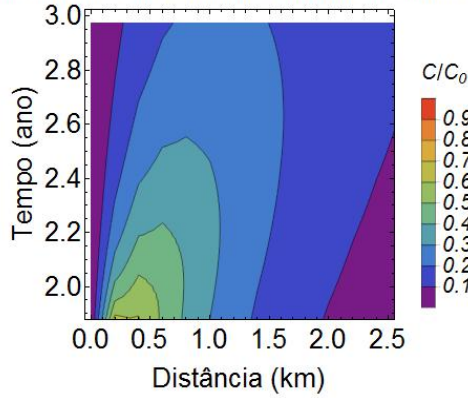
Assim como realizado para os parâmetros de heterogeneidade do meio e velocidade do fluxo na origem, também foram realizadas simulações da variação de C/C_0 em função do tempo para os mesmos valores fixos de x , comparando os quatro valores de D_0 . A Figura 4.8 evidencia que o comportamento é bem semelhante à velocidade do fluxo na origem, ou seja, os valores de concentração são mais elevados para maiores valores do parâmetro D_0 quando a fonte está ativada, e após a desativação passa a ocorrer o inverso, ou seja, os níveis de concentrações passam a ser mais elevados para menores valores de D_0 . Semelhantemente ao observado para os demais parâmetros, quando a fonte está ativada, a curva de C/C_0 é crescente em relação ao tempo, e após o tempo em que ocorre o pico de máxima concentração, passa a ser decrescente.

A Figura 4.9 evidencia a boa concordância entre as soluções analítica e numérica, assim como verificado para os parâmetros de heterogeneidade do meio e velocidade do fluxo na origem, e o efeito similar produzido pelos parâmetros, especialmente após a desativação da fonte, quando há um pico de máxima concentração próximo a fonte e, posteriormente, os valores de C/C_0 começam a diminuir até não haver mais nenhuma influência da fonte.

Ressalta-se que em estudo desenvolvido por Santana (2017), que teve participação e colaboração deste autor, também é avaliada a dependência paramétrica da equação da difusão para o cenário de dispersão espacialmente dependente, sendo realizadas simulações com para $t=0,5; 1,0; 1,5; 2,0; 2,5$ e $3,0$ anos, comparando 5 valores de cada parâmetro, distintos dos que constam do presente estudo.

Tempo de estabilização do meio

Para o cenário de dispersão de soluto considerado espacialmente dependente simulado por Jaiswal et al. (2009) e por Savovic e Djordjevic (2013), foi estimada a distribuição de concentração para valores de t superiores à desativação da fonte, de modo a possibilitar uma investigação do momento em que a concentração do soluto passa a ser desprezível.

$D_0 = 0.03 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução analítica para a fonte ativada $D_0 = 0.03 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução numérica para a fonte ativada $D_0 = 0.03 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução analítica para a fonte desativada $D_0 = 0.03 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução numérica para a fonte desativada $D_0 = 0.08 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução analítica para a fonte ativada $D_0 = 0.08 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução numérica para a fonte ativada $D_0 = 0.08 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução analítica para a fonte desativada $D_0 = 0.08 \text{ km}^2/\text{ano}$ – solução numérica para a fonte desativada

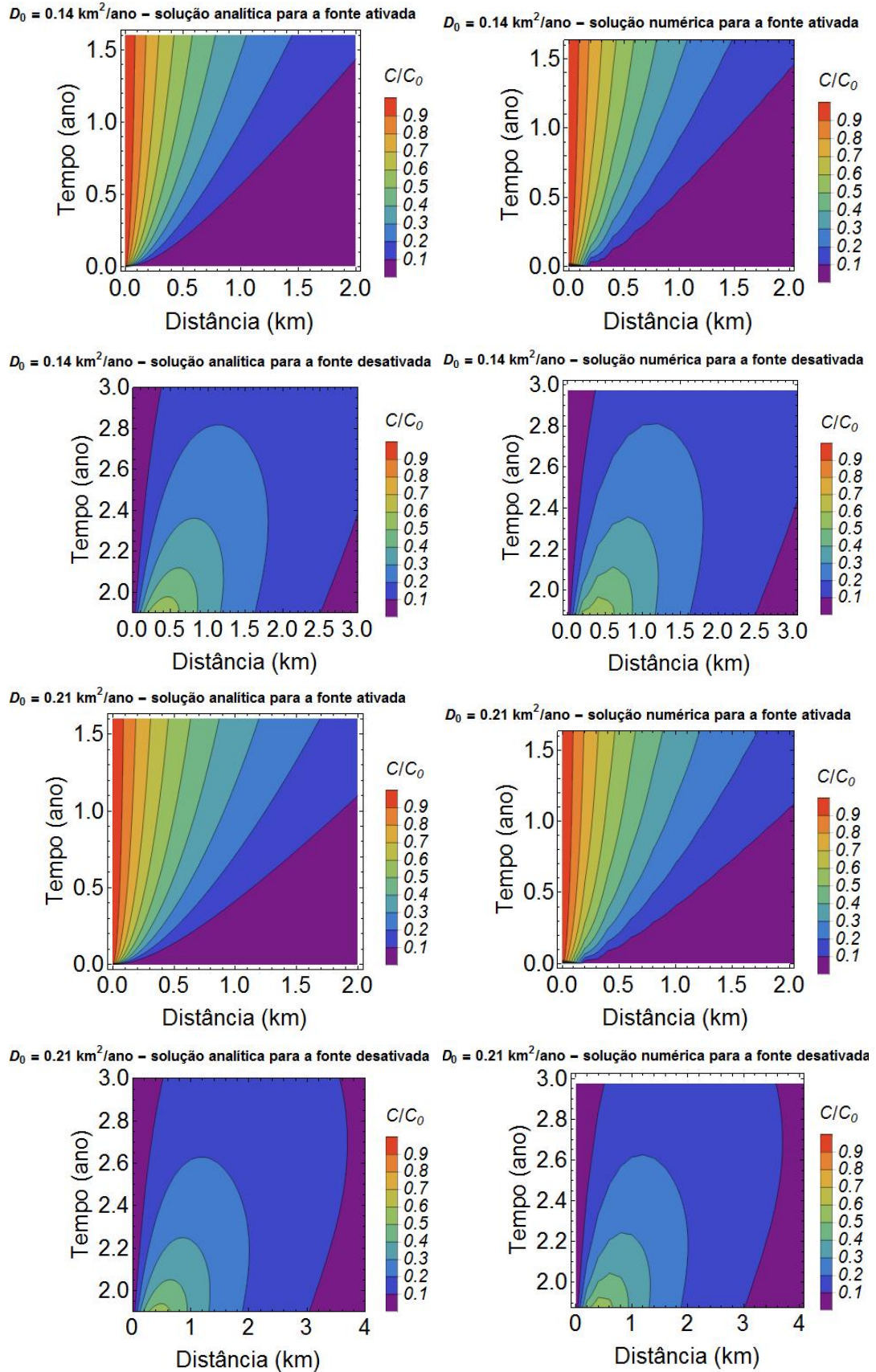


Figura 4.9: Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de coeficiente de dispersão em $x = 0$ para o cenário de dispersão espacialmente dependente.

Conforme Figura 4.10, referente às soluções analítica e numérica da distribuição de concentração em função da distância e do tempo para os valores de referência adotados neste estudo, fica evidenciado que após 4,0 anos os valores de C/C_0 são inferiores a 0,1 em toda a faixa de domínio, indicando a estabilização do meio.

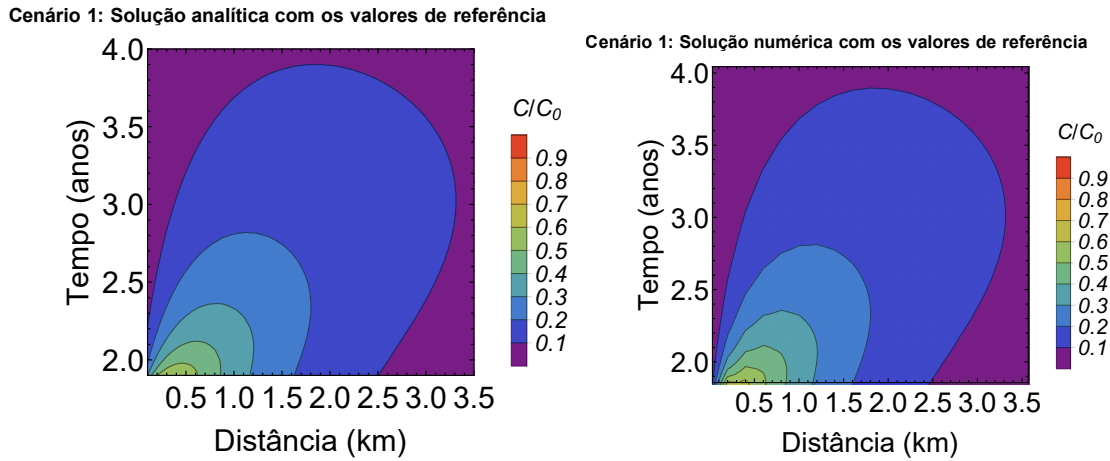


Figura 4.10: Distribuição da concentração em função da distância e do tempo para os valores de referência após a desativação da fonte para o cenário de dispersão espacialmente dependente.

4.1.2 Cenário 2: Dispersão de soluto temporalmente dependente

Considerando que para o cenário de dispersão de soluto temporalmente dependente, o meio é considerado homogêneo, a investigação da dependência paramétrica envolveu apenas os parâmetros velocidade do fluxo uniforme e coeficiente de dispersão, utilizando os mesmos valores adotados para o cenário de dispersão espacialmente dependente.

Velocidade do fluxo uniforme

Para o cenário de dispersão temporalmente dependente, o parâmetro u_0 refere-se à velocidade do fluxo uniforme, característica do cenário simulado por Jaiswal et al. (2009) e por Savovic e Djordjevic (2013), conforme abordado no Capítulo 2.

Assim como no cenário de dispersão espacialmente dependente, também foi verificado um amplo domínio de convergência da solução numérica, visto que foram verificadas limitações na aplicação do método apenas para valores de u_0 superiores a 400 km/ano após a desativação da fonte emissora.

Com o emprego da solução numérica abordada na Subseção 3.2.2, foi verificado conforme Figura 4.11, que quando a fonte está ativada, os valores de C/C_0 são mais elevados para valores mais altos de velocidade do fluxo uniforme, atingindo inclusive valores próximos a 1,0, o qual corresponde à concentração da fonte emissora. Para $u_0 = 1,25$ km/ano, por exemplo, o decaimento da curva de variação de C/C_0 em função da distância para $t=1,4$ ano só fica evidente para distâncias superiores a 0,5 km, indicando alta influência da fonte emissora.

Para a fonte desativada, pode ser observado comportamento semelhante ao verificado para o cenário de dispersão espacialmente dependente, ou seja, maiores valores de C/C_0 para menores valores de u_0 nas proximidades da fonte, e o inverso após um pico de máxima concentração. No entanto, foi verificado que este pico de máxima concentração, decorrente do tempo em que a fonte estava ativada, é superior ao observado para o cenário de dispersão espacialmente dependente, sendo que a razão C/C_0 também chega próximo a 1,0 para $u_0 = 1,25$ km/ano, demonstrando que um fluxo uniforme de alta velocidade pode dificultar a dispersão.

Para o presente cenário, também foi estimada a variação de C/C_0 em função do tempo, comparando os quatro valores do parâmetro u_0 , para as mesmas distâncias fixas em relação à fonte emissora simuladas no cenário de dispersão espacialmente dependente, ou seja, para $x=0,1$; 0,5; 1,0 e 2,0 km.

Conforme Figura 4.12, verifica-se que para $x=0,1$ e 0,5 km, os valores de C/C_0 aumentam até 1,8 ano, momento da desativação da fonte, chegando próximo a 1,0 para $u_0=1,25$ km/ano e, posteriormente, passam a diminuir a medida em que o tempo aumenta. Para $x=1,0$ e 2,0 km, por sua vez, verifica-se que mesmo após a desativação da fonte, ainda há uma elevação no valor de C/C_0 , equivalente ao pico de máxima concentração observado nos gráficos apresentados na Figura 4.11, e que posteriormente, a curva de variação de C/C_0 em função do tempo passa a ser decrescente.

Nos gráficos de variação de C/C_0 em função da distância e do tempo apresentados na Figura 4.13, fica evidenciado que valores mais altos de velocidade implicam em uma concentração bem mais elevada que o cenário de dispersão espacialmente dependente, especialmente nas proximidades da fonte, demonstrando que um fluxo uniforme pode não ser favorável à dispersão de um poluente.

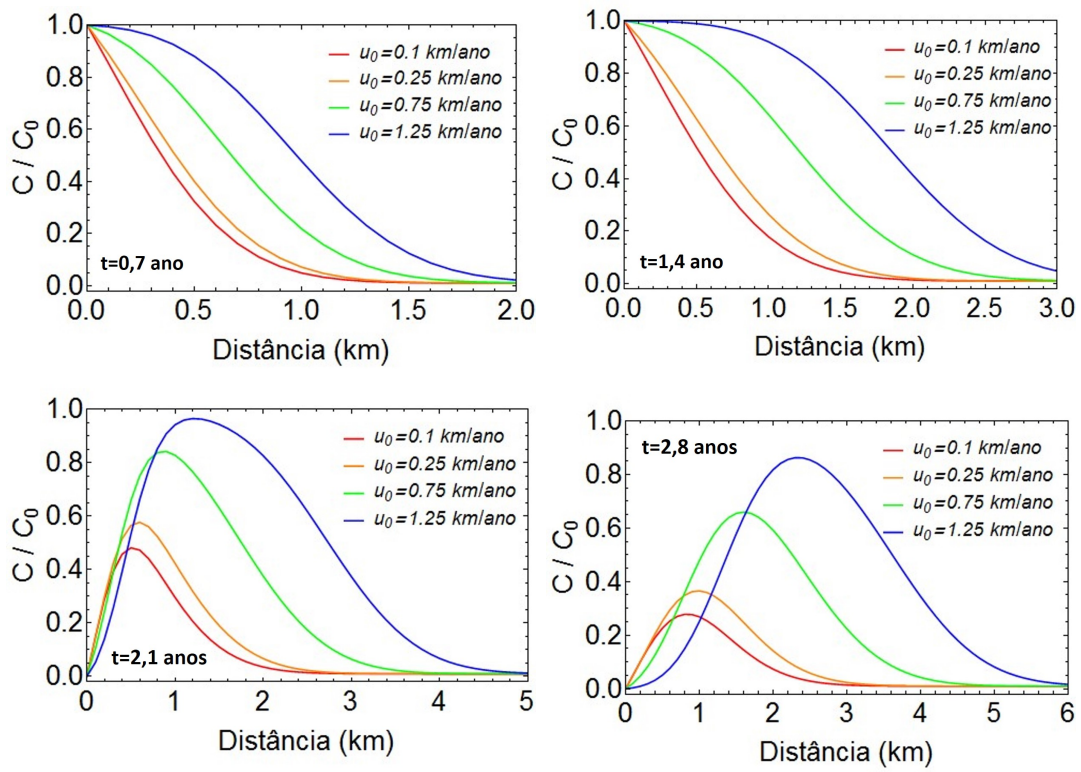


Figura 4.11: Efeito da velocidade do fluxo uniforme na variação da concentração de soluto em função da distância para o cenário de dispersão temporalmente dependente.

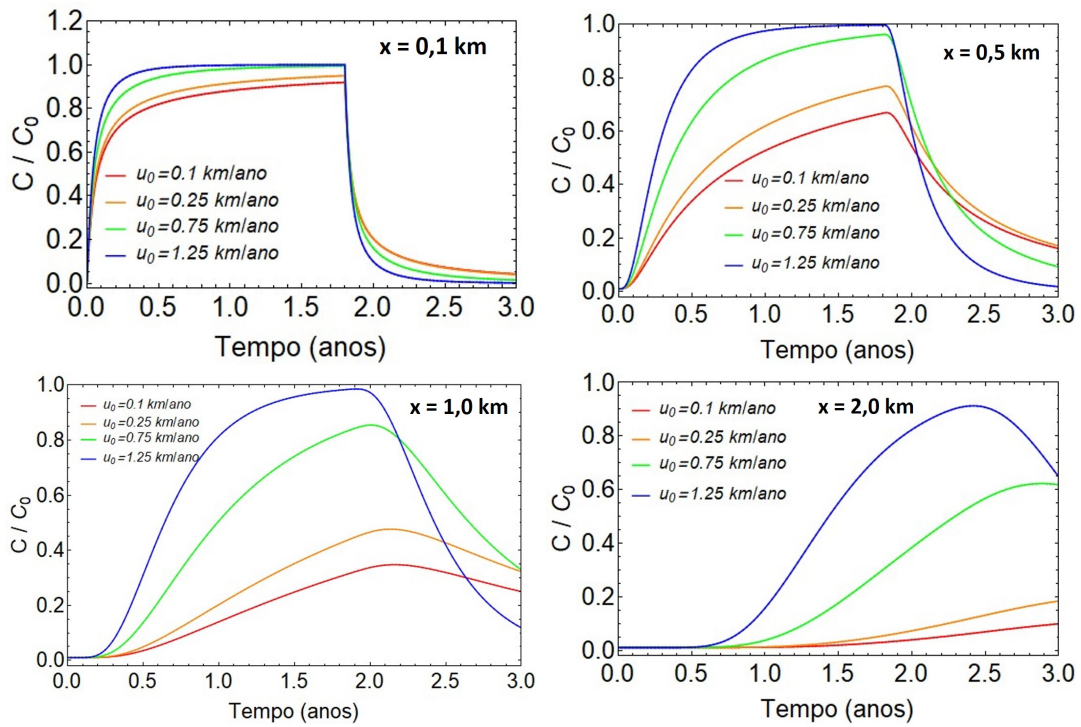


Figura 4.12: Efeito da velocidade do fluxo uniforme na variação da concentração de soluto em função do tempo para o cenário de dispersão temporalmente dependente.

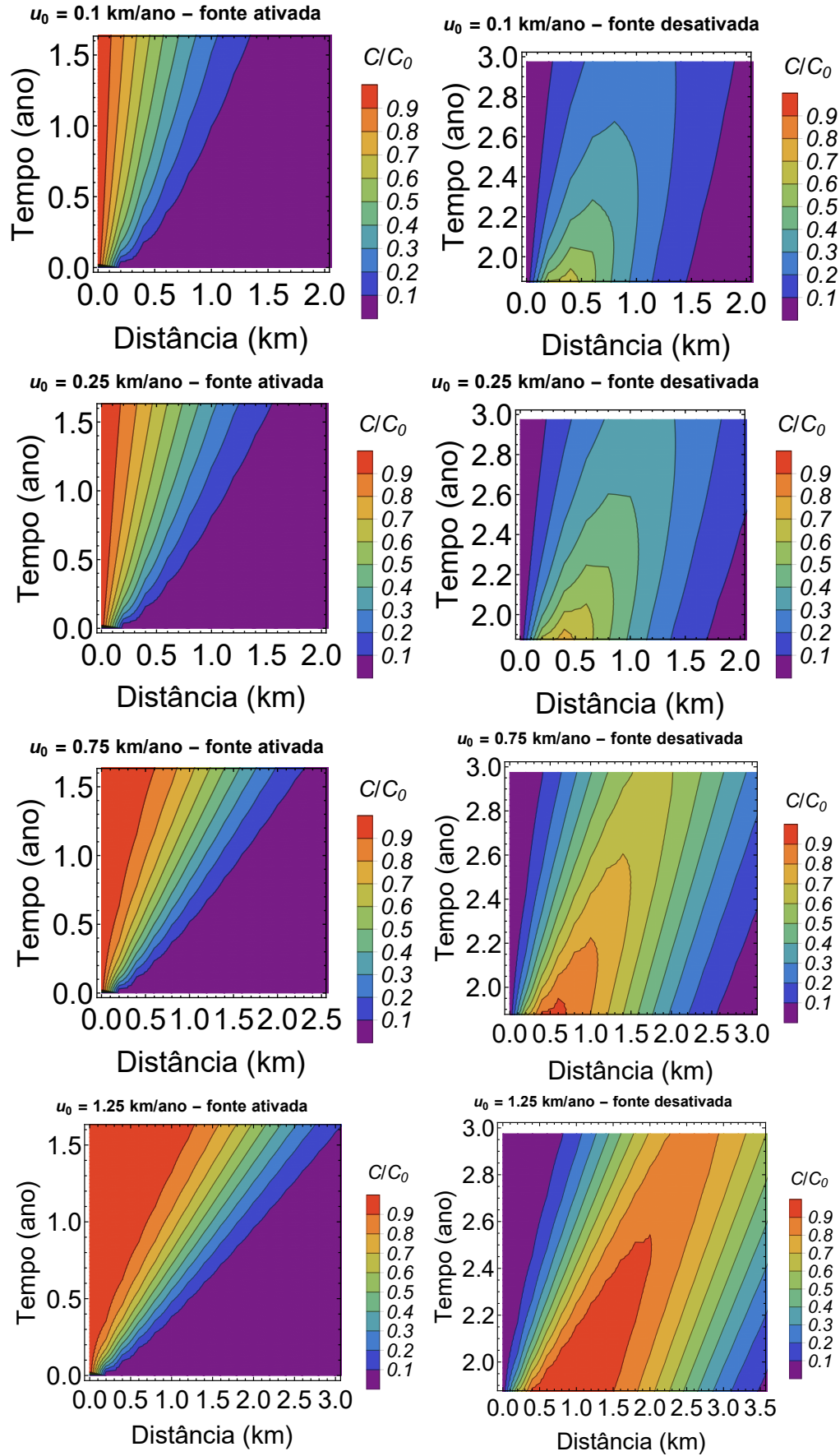


Figura 4.13: Distribuição de C/C_0 em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores de velocidade do fluxo uniforme para o cenário de dispersão temporalmente dependente.

Coefficiente de dispersão inicial

Para o cenário de dispersão temporalmente dependente, o parâmetro D_0 refere-se ao coeficiente de dispersão inicial, ou seja no momento em que $t=0$ ano, conforme descrito no Capítulo 2.

Diferentemente do cenário de dispersão espacialmente dependente, para o qual foi observado um domínio bem restrito de convergência para o parâmetro D_0 , para o cenário de dispersão temporalmente dependente, a solução numérica apresenta limitações apenas para valores de D_0 superiores a 85,0 km²/ano após a desativação da fonte.

Assim como observado no cenário de dispersão espacialmente dependente, a influência do coeficiente de dispersão é muito similar ao da velocidade do fluxo, sendo que quando a fonte está ativada, maiores valores de D_0 implicam em maiores valores de C/C_0 e que com a fonte desativada, menores valores de D_0 implicam em maiores valores de C/C_0 apenas nas proximidades da fonte, ocorrendo o inverso após um pico de máxima concentração.

A Figura 4.14 mostra que embora a influência do coeficiente de dispersão na variação de C/C_0 seja semelhante à observada para o cenário de dispersão espacialmente dependente, a atenuação de C/C_0 em função da distância é ligeiramente mais lenta tanto com a fonte ativada quanto com a fonte desativada após o pico de máxima concentração, o qual também possui valores mais elevados em relação ao cenário descrito na Subseção 4.1.1.

Na Figura 4.15, é apresentada a variação de C/C_0 em função do tempo, comparando os quatro valores do parâmetro D_0 , para as mesmas distâncias fixas em relação à fonte emissora simuladas nos demais parâmetros, mostrando um comportamento semelhante ao observado para a velocidade do fluxo constante, exceto para $x = 2,0$ km, em que se observa que as curvas de variação de C/C_0 em função do tempo continuam crescentes para todos os valores de D_0 do período de desativação da fonte até 3,0 anos, ficando porém abaixo de 0,3. De modo geral, observa-se que os valores de C/C_0 são mais elevados para maiores valores de D_0 enquanto a fonte está ativada, e que após a desativação da mesma e o pico de máxima concentração, passa a ocorrer o inverso, ou seja, os níveis de concentração passam a ser mais elevados para menores valores de D_0 .

A Figura 4.16, referente referente à variação de C/C_0 em função da distância e do tempo simultaneamente, mostra um efeito muito semelhante ao da velocidade do fluxo uniforme tanto para a fonte ativada quanto para a fonte desativada. Para ambas as variáveis, foi verificada uma atenuação mais lenta de C/C_0 em função da distância com a

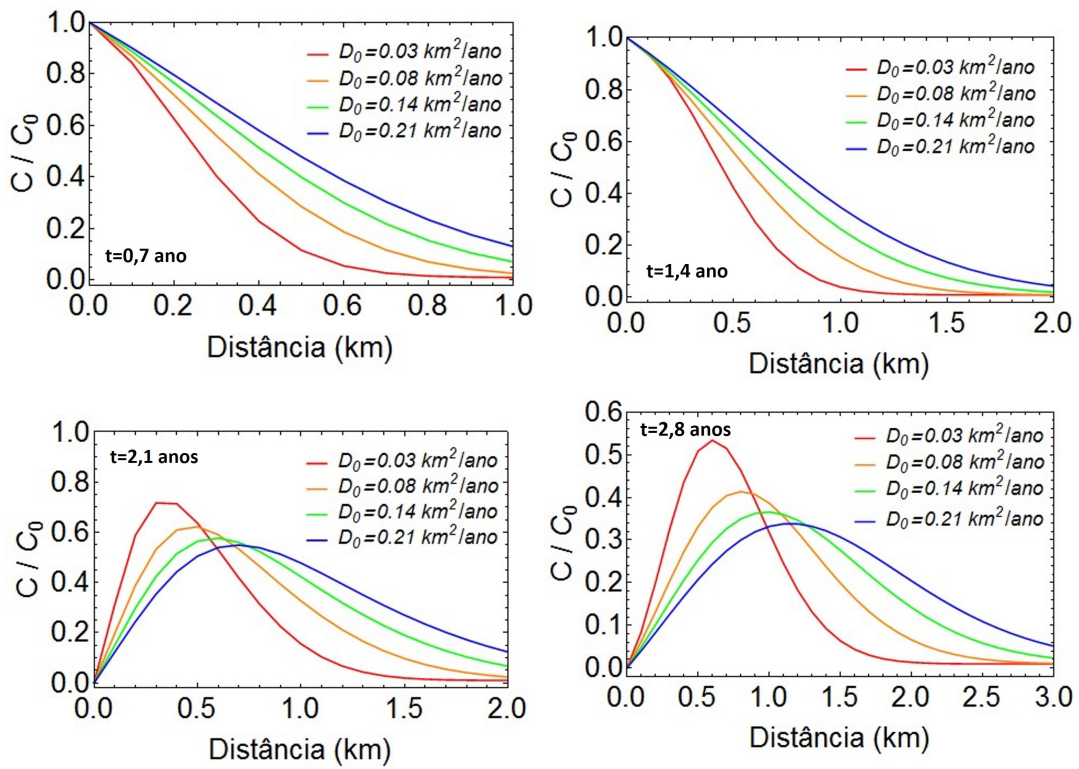


Figura 4.14: Efeito do coeficiente de dispersão inicial na variação da concentração de soluto em função da distância para o cenário de dispersão temporalmente dependente.

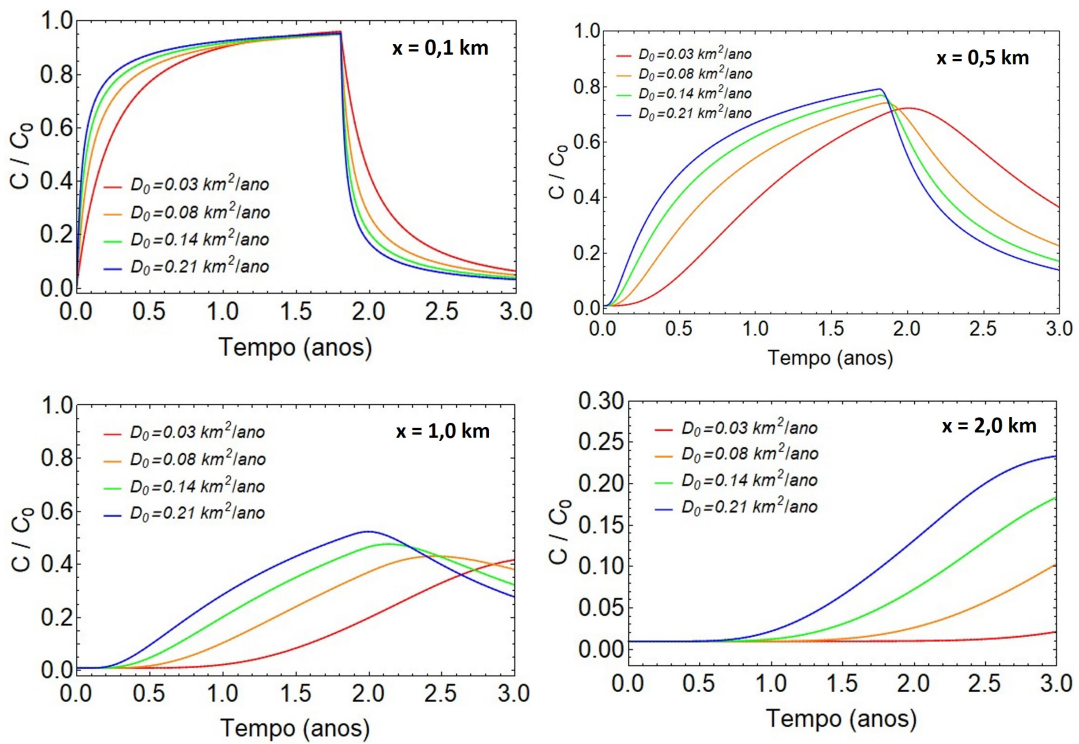


Figura 4.15: Efeito do coeficiente de dispersão inicial na variação da concentração de soluto em função do tempo para o cenário de dispersão temporalmente dependente.

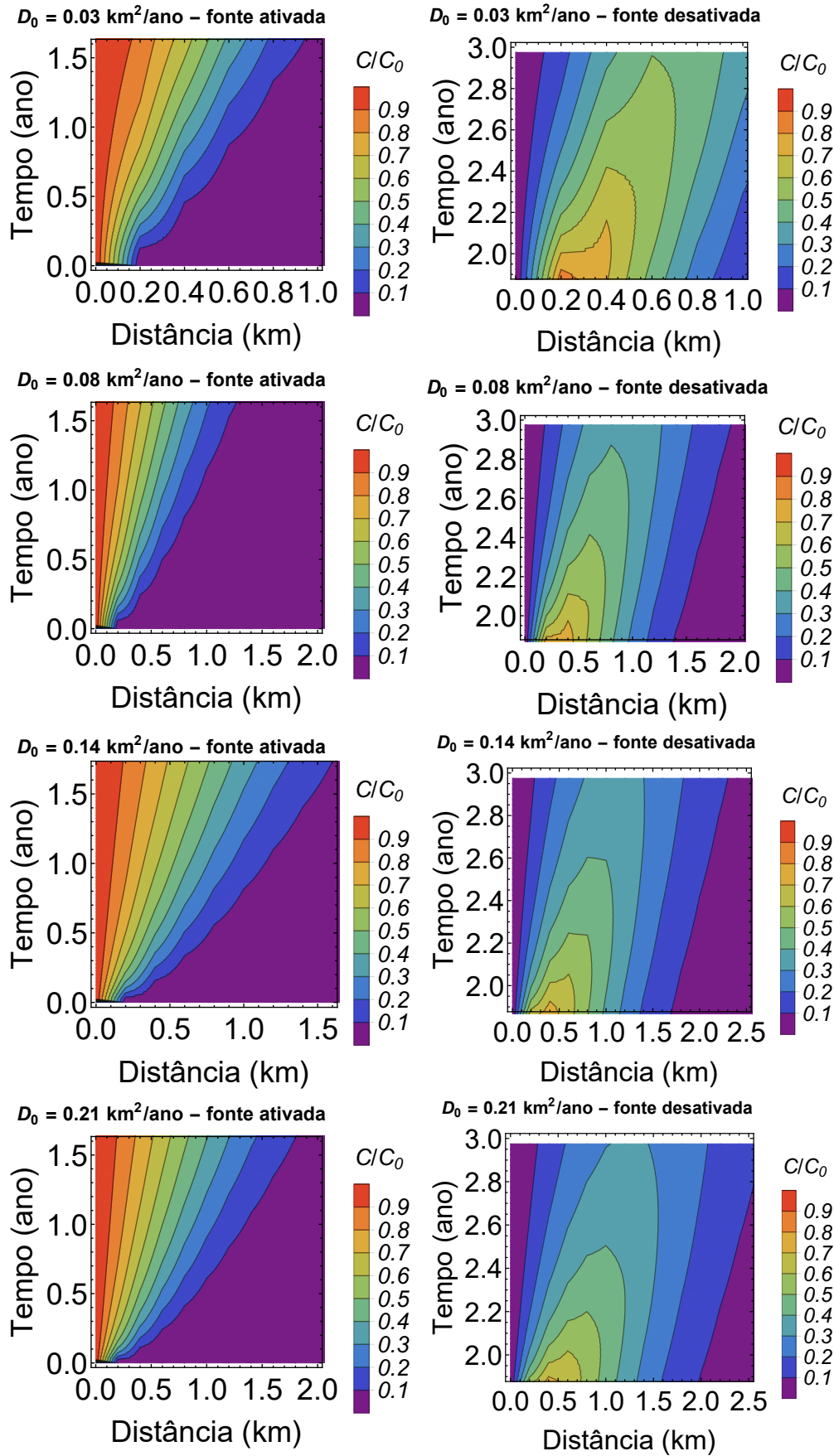


Figura 4.16: Distribuição da concentração em função da distância e do tempo, comparando diferentes valores do coeficiente de dispersão inicial para o cenário de dispersão temporalmente dependente.

fonte ativada e desativada, indicando que um fluxo instável em meio heterogêneo como o descrito na seção 4.1.1 pode favorecer a dispersão de uma substância de interesse.

Outro fator que pode ser observado tanto para o cenário de dispersão espacialmente dependente quanto para o cenário quanto para o cenário de dispersão temporalmente dependente é que não há um aumento expressivo nos valores de C/C_0 em função do tempo para os valores adotados de D_0 , diferentemente do observado para a velocidade do fluxo uniforme em que há uma perceptível influência do tempo de emissão ou após a desativação da fonte nos valores de C/C_0 .

Tempo de estabilização do meio

De modo análogo ao realizado para o cenário de dispersão temporalmente dependente, também foi estimada a distribuição de concentração para valores de t superiores à desativação da fonte para o cenário de dispersão temporalmente dependente, de modo a possibilitar uma investigação do momento em que a concentração do soluto passa a ser desprezível.

A Figura 4.17, referente à distribuição da concentração em função da distância e do tempo, com base na solução numérica, mostra que com os valores de referência adotados neste estudo, os valores de C/C_0 são inferiores a 0,1 apenas após 8,0 anos para este cenário, o dobro do tempo observado para estabilização do meio no cenário de dispersão espacialmente dependente descrito na Subseção 4.1.1.

4.2 Dependência paramétrica da equação do calor bi-dimensional

Após as simulações realizadas para dispersão em uma dimensão na variável espacial e uma na variável espacial (1+1 dimensão), foi empregado o método da diferença finita explícita, conforme abordado no Capítulo 3, para resolução da equação de condução do calor bidimensional com base no código apresentado por Becker e Kauss (2016) na linguagem do Matlab, o qual foi aplicado com a utilização do software Wolfram Mathematica 11.1.1 (WOLFRAM, 2012), utilizando os valores de referência apresentados na Tabela 3.2.

Foi realizada investigação detalhada da variação da temperatura em função da condutividade térmica (κ) para condições isotrópica e não isotrópica, sem a presença de fonte

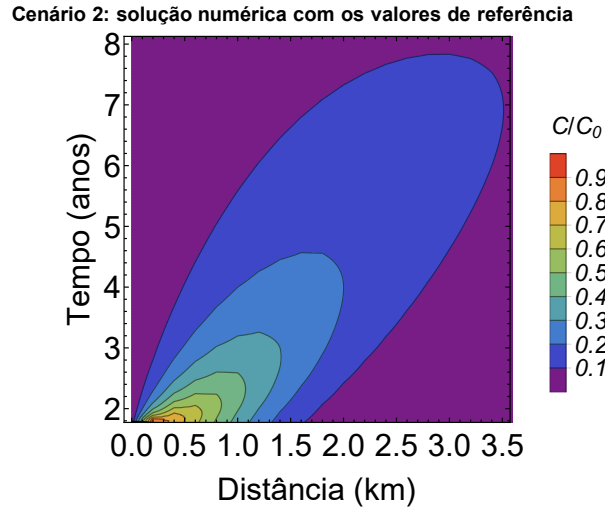


Figura 4.17: Distribuição da concentração em função da distância e do tempo para os valores de referência após a desativação da fonte para o cenário de dispersão temporalmente dependente.

de calor, e posteriormente foi avaliada a influência da densidade (ρ) na variação de temperatura com a presença de fonte de calor. Para todas as simulações, foram contemplados os intervalos $\Delta x = 0,1$ m; $\Delta y = 0,1$ m e $\Delta t = 0,001$ s, e uma faixa de domínio de 5 metros nos eixos x e y .

4.2.1 Influência da condutividade térmica para a condição isotrópica

Inicialmente, foi realizada simulação da equação do calor em condição isotrópica, ou seja, considerando o mesmo coeficiente de condutividade térmica (κ) nos eixos x e y , sem a presença de fonte de calor, para um corpo com temperatura inicial de 100° C.

Mantendo as demais variáveis da equação do calor fixas, com os valores de referência apresentados na Tabela 3.2, e adotando-se que $Q = 0$ J, em função da ausência de fonte de calor, foram comparados os valores de κ correspondente a 0,1; 0,5; 1,0 e 2,0 m^2/s e valores de t correspondente a 0,1; 0,5; 1,0 e 2,0 segundos, de modo a possibilitar a avaliação da influência do parâmetro na variação da temperatura.

As Figuras 4.18 a 4.21, referentes à distribuição de temperatura em função do espaço após 0,5 s para diferentes valores de κ , evidenciam que os resultados obtidos por meio do software Wolfram Mathematica 11.1 foram os mesmos em relação ao obtido com a

utilização do código apresentado em Becker e Kauss (2016) com a utilização do software Matlab.

As Figuras 4.22 a 4.25, por sua vez, referentes à distribuição de temperatura em função do espaço após 1,0 s para os mesmos valores de κ , em relação aos apresentados nas Figuras 4.18 a 4.21 mostram que os valores da temperatura tendem a reduzir com o aumento do tempo, e que as soluções obtidas por meio dos softwares Wolfram Mathematica 11.1 e Matlab também são compatíveis para $t=1,0$ s.

As Figuras 4.26 a 4.29 referentes à variação da temperatura com a distância após 0,1; 0,5; 1,0 e 2,0 s, respectivamente, comparando os mesmos valores de κ apresentados nas Figuras 4.18 a 4.25, evidenciam que quanto maior o tempo de condução de calor, maior a influência da condutividade térmica na temperatura. Após 0,1 s, por exemplo, verifica-se que a temperatura reduz ligeiramente à medida em que o valor de κ aumenta, mantendo-se porém acima de 50°C , correspondente a metade da temperatura inicial. Para $t=2,0$ s, por sua vez, observa-se que com $\kappa = 0,1\text{ m}^2/\text{s}$, a distribuição de temperatura em toda a faixa de domínio é próximo a 100°C e com $\kappa = 2,0\text{ m}^2/\text{s}$, a temperatura em toda a faixa de domínio é inferior a 5°C .

De modo geral, verifica-se que valores mais elevados de temperatura distribuídas na faixa de domínio quanto o corpo possui menores valores de condutividade térmica e menor tempo de transferência.

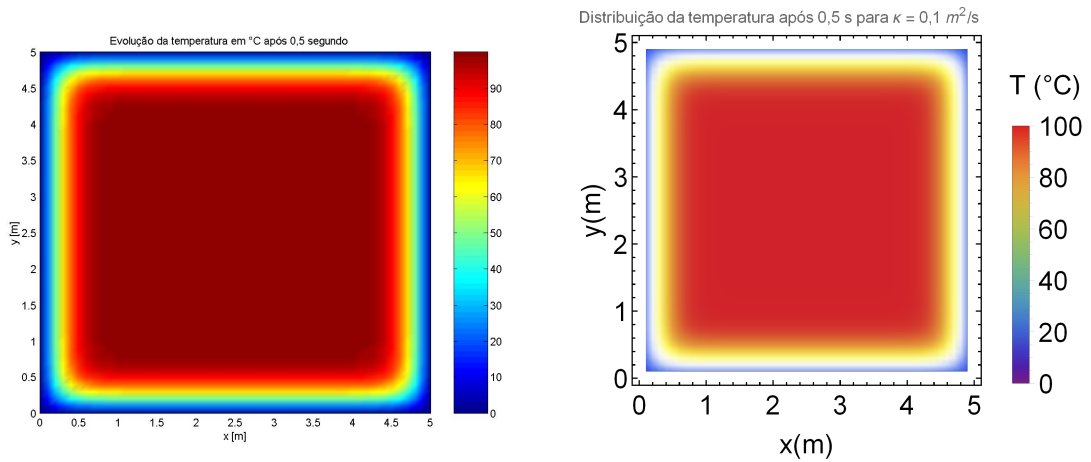


Figura 4.18: Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 0,1\text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

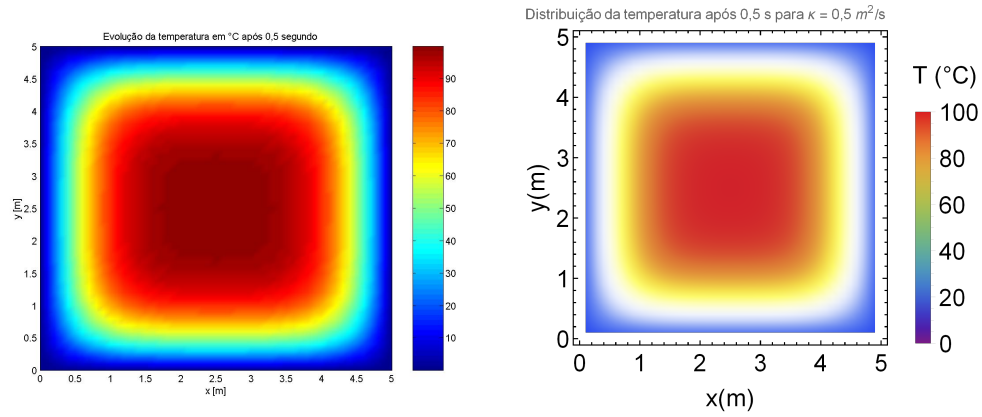


Figura 4.19: Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 0,5 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

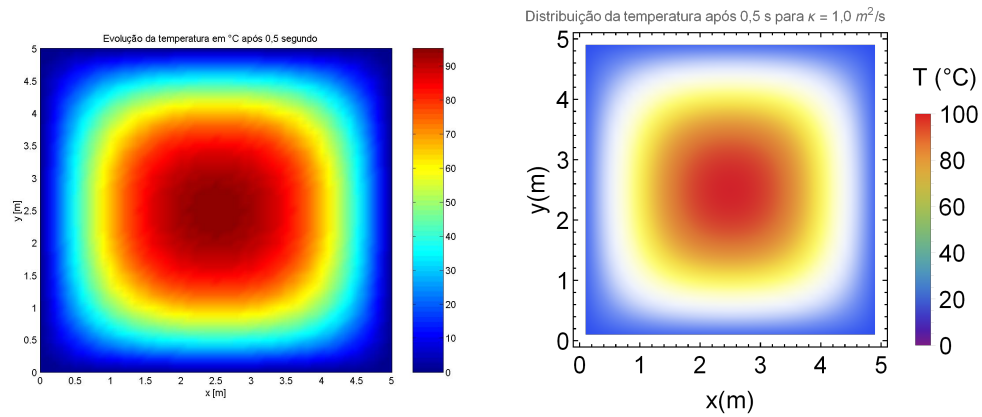


Figura 4.20: Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 1,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

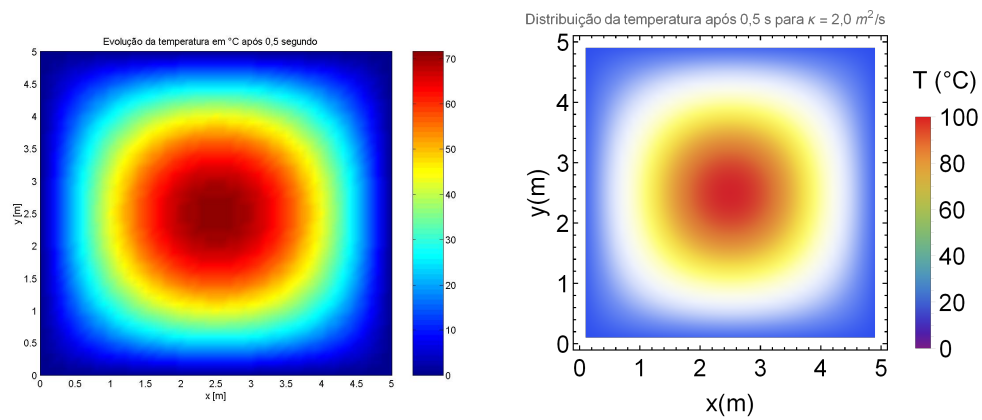


Figura 4.21: Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa = 2,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

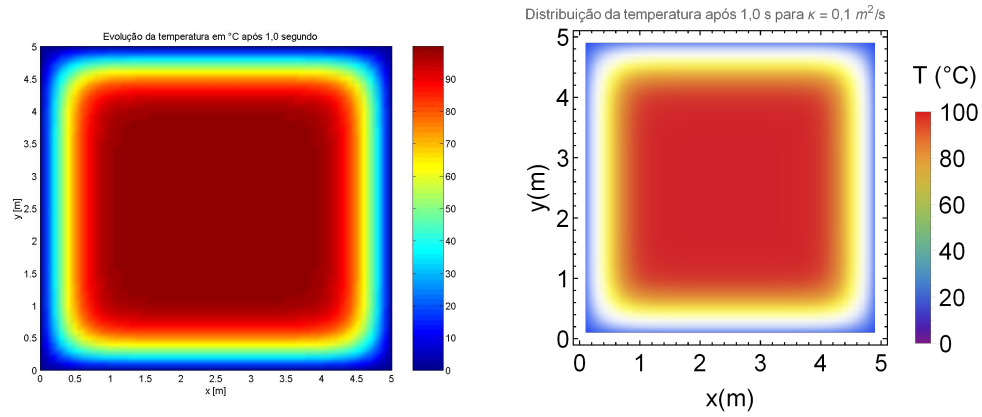


Figura 4.22: Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

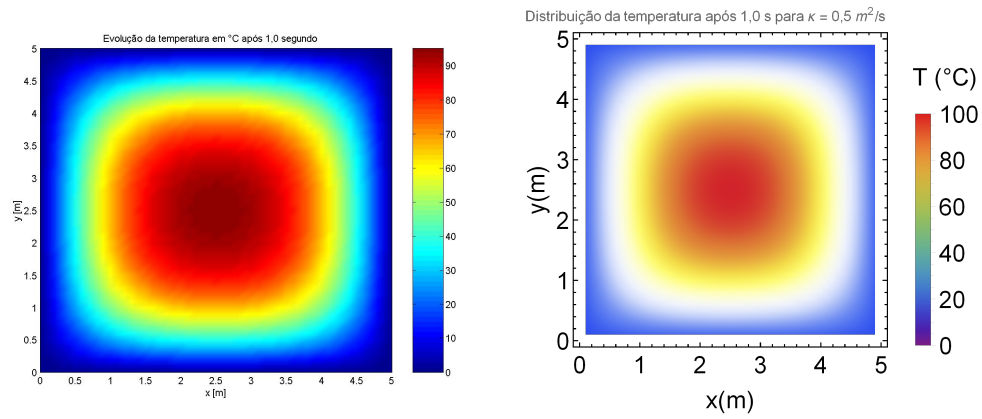


Figura 4.23: Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 0,5 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

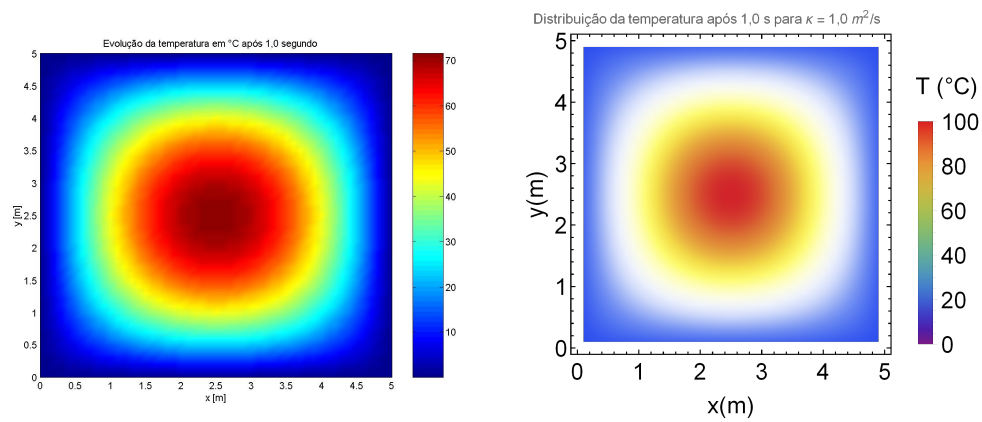


Figura 4.24: Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 1,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

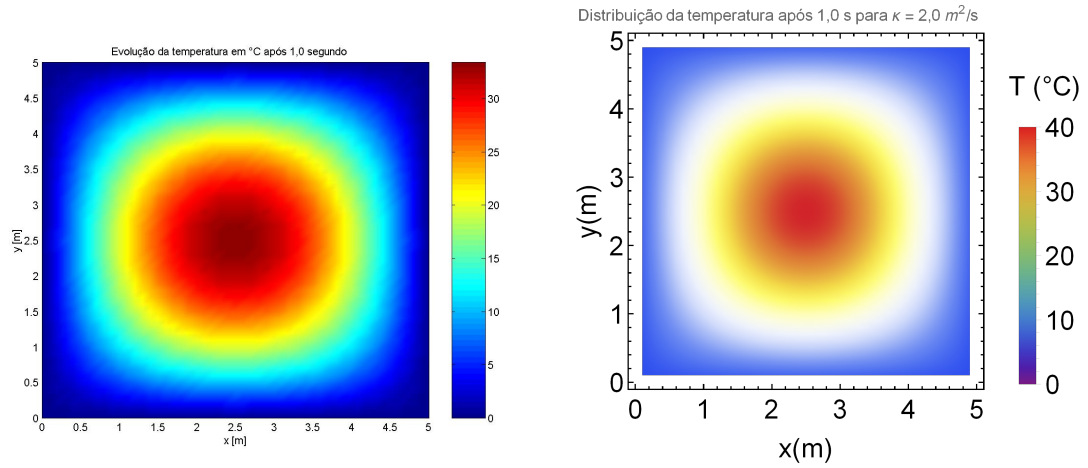


Figura 4.25: Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa = 2,0 \text{ m}^2/\text{s}$ (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

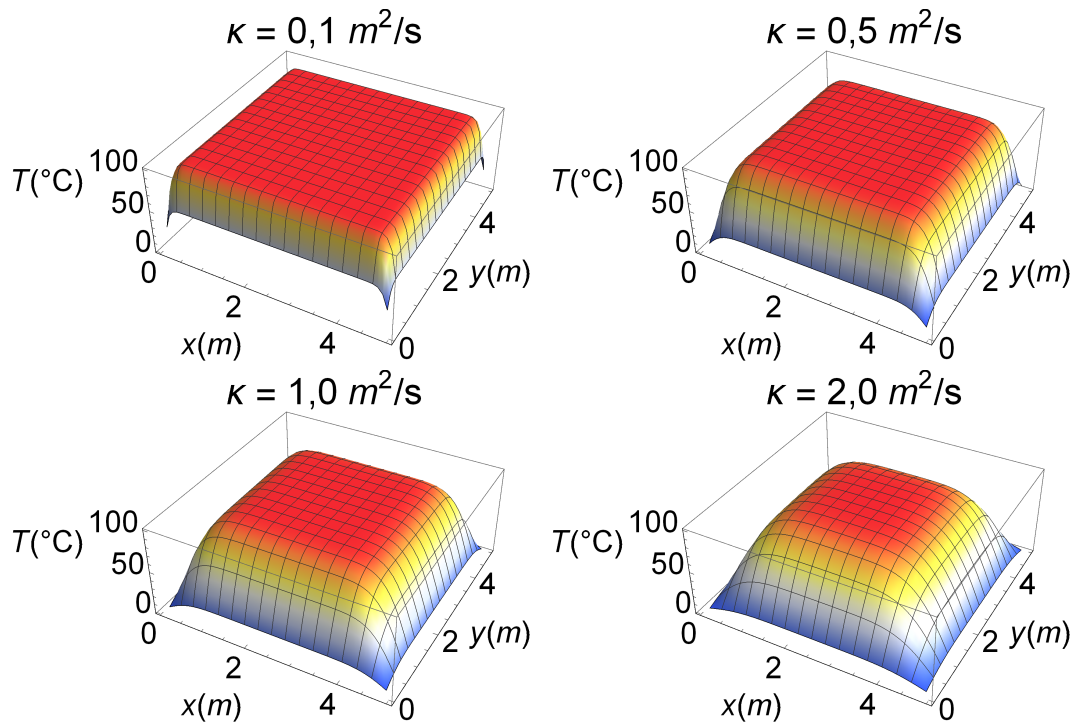


Figura 4.26: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=0,1$ segundo.

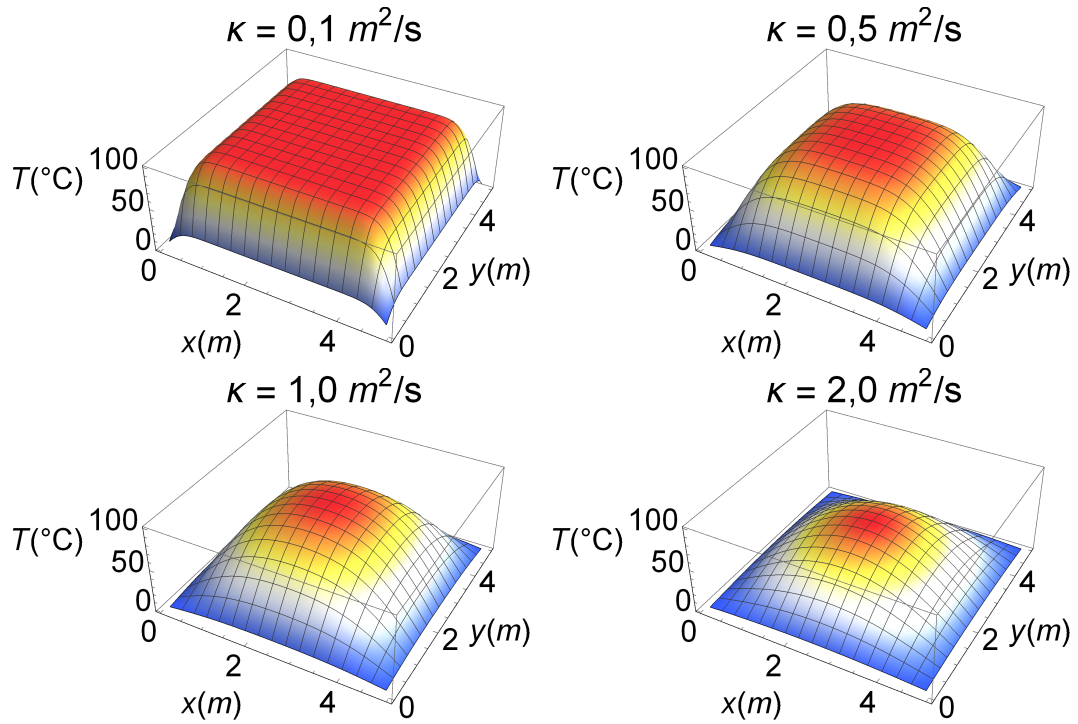


Figura 4.27: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=0,5$ segundo.

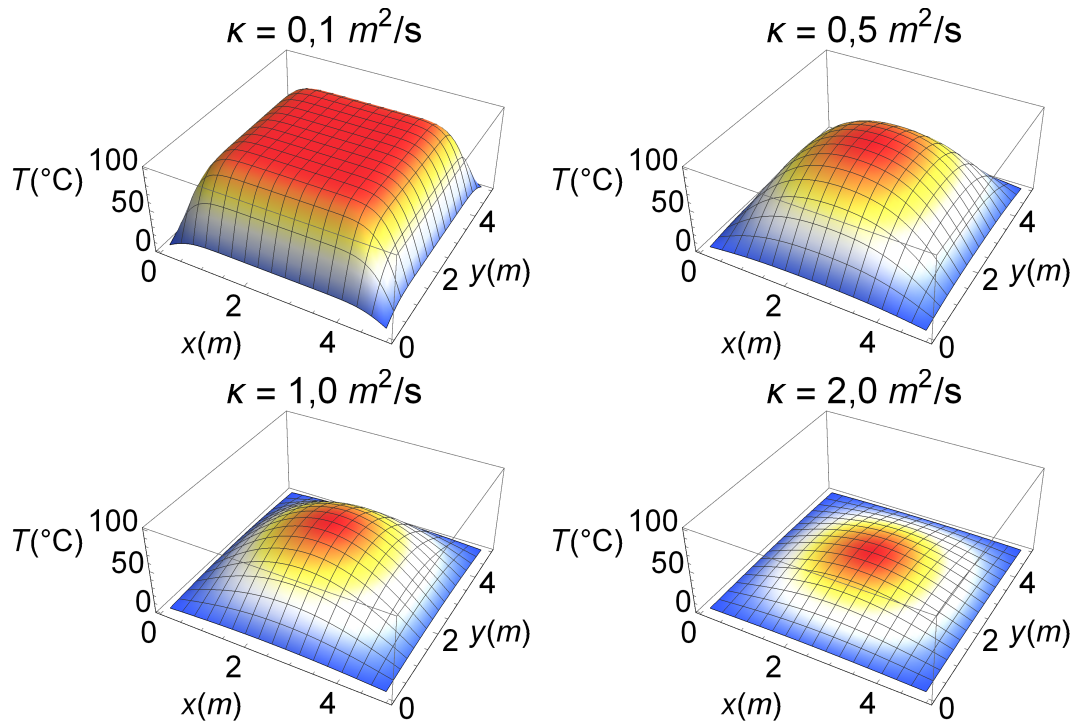


Figura 4.28: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=1,0$ segundo.

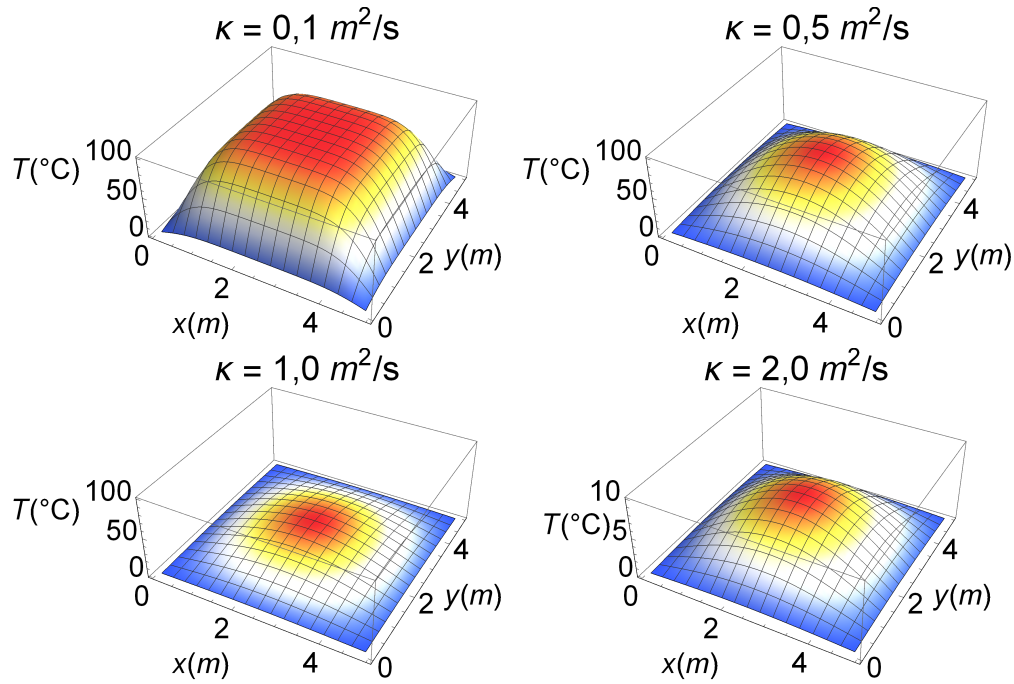


Figura 4.29: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ para $t=2,0$ segundos.

4.2.2 Influência da condutividade térmica para a condição não isotrópica

De modo análogo ao realizado para a condição isotrópica, também foram realizadas simulações para a condição não isotrópica, ou seja, com condução de calor heterogênea ao longo do corpo, considerando a temperatura inicial de 100°C e a ausência de fonte de produção de calor.

Conforme Figuras 4.30 a 4.35, também foi realizado um comparativo entre as soluções obtidas por meio do código apresentado em Becker e Kauss (2016) e com a utilização do software Wolfram Mathematica 11.1, para três combinações de valores distintos de κ_x e κ_y após 0,5 e após 1,0 s.

As Figuras 4.36 a 4.39, por sua vez, apresentam a variação da temperatura com a distância após 0,1; 0,5; 1,0 e 2,0 s, combinando os valores de κ_x correspondente a 0,3; 0,8; e $1,5\text{ m}^2/\text{s}$ com os valores de κ_y correspondente a 0,1; 1,0; e $2,0\text{ m}^2/\text{s}$.

Assim como observado para a condição isotrópica, observa-se que quanto maior o tempo da condução de calor, maior é a influência do parâmetro κ na variação da temperatura, sendo verificado também a expressiva influência dos coeficientes referentes à difusividade térmica nos eixos x e y .

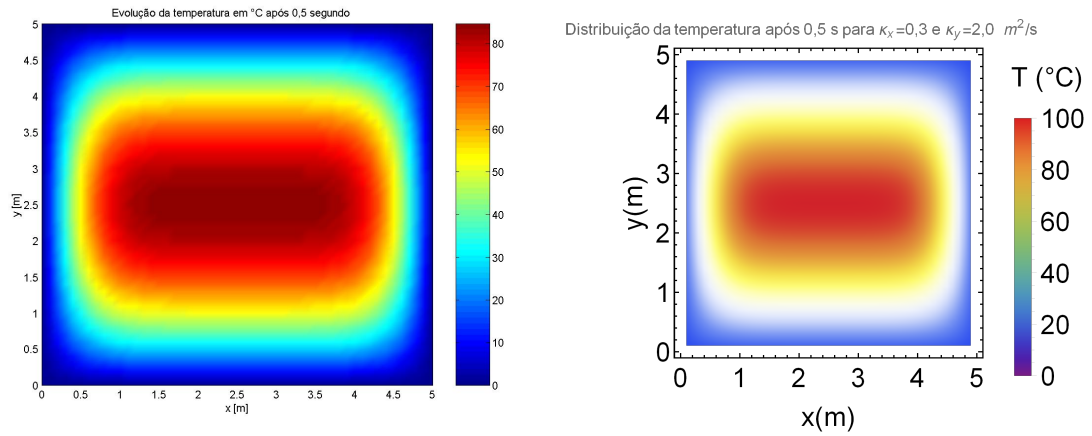


Figura 4.30: Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa_x=0,3$ m^2/s e $\kappa_y=2,0$ m^2/s (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

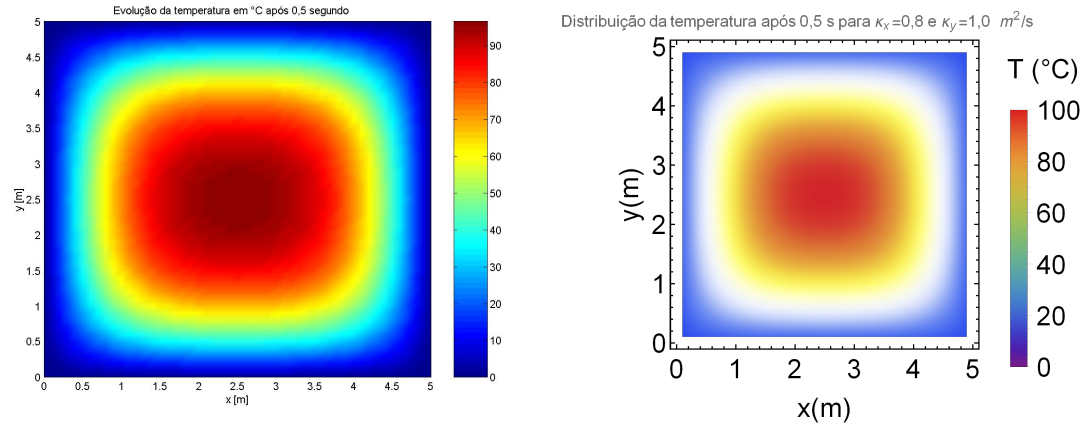


Figura 4.31: Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa_x=0,8$ m^2/s e $\kappa_y=1,0$ m^2/s (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

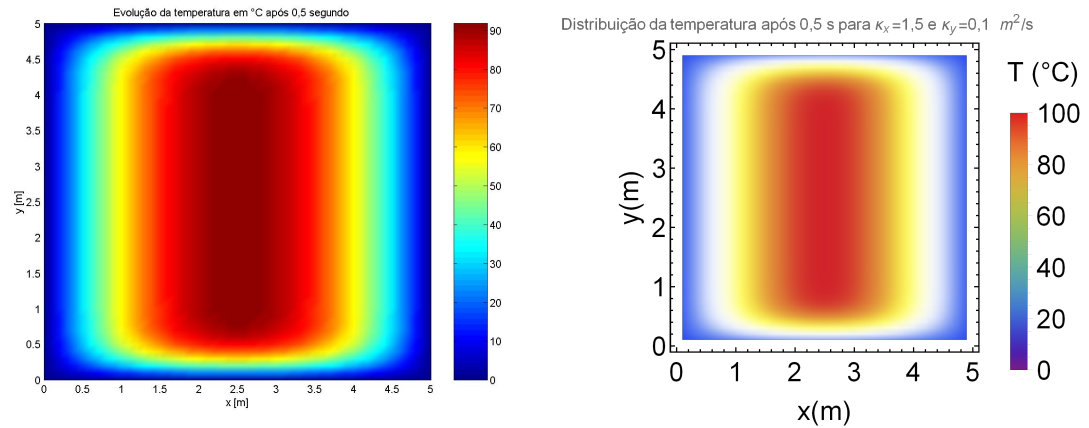


Figura 4.32: Distribuição da temperatura após 0,5 s com $\kappa_x=1,5$ m^2/s e $\kappa_y=0,1$ m^2/s (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

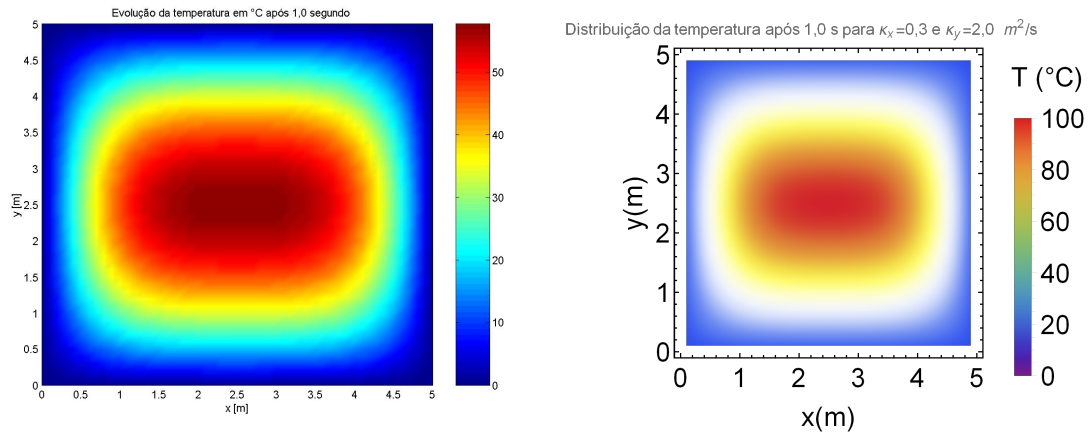


Figura 4.33: Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa_x=0,3$ m^2/s e $\kappa_y=2,0$ m^2/s (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

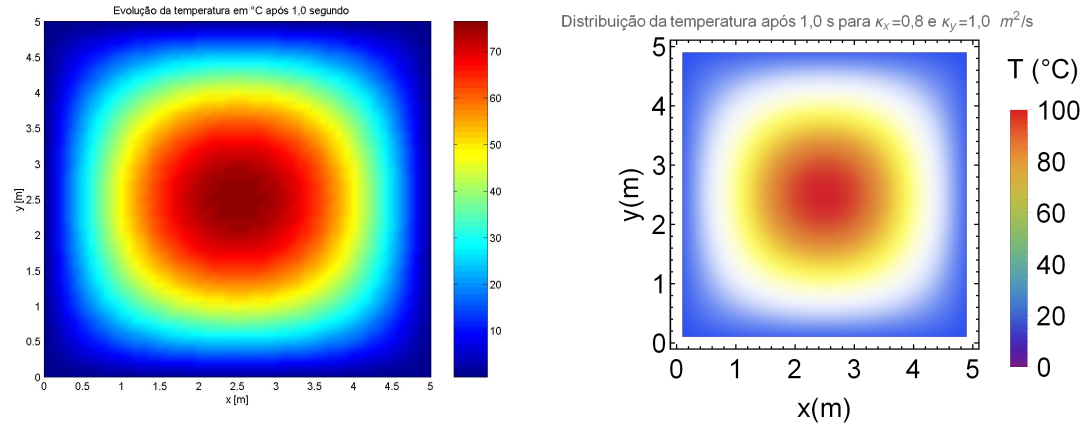


Figura 4.34: Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa_x=0,8$ m^2/s e $\kappa_y=1,0$ m^2/s (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

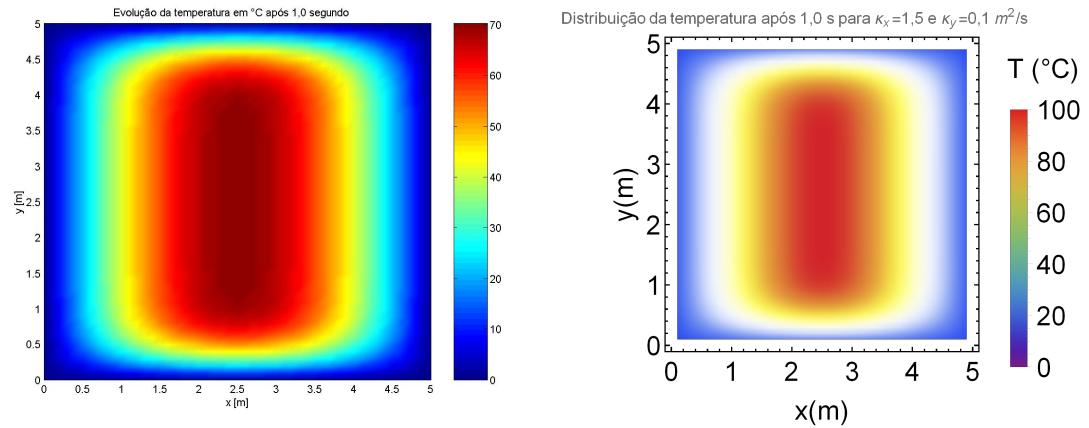


Figura 4.35: Distribuição da temperatura após 1,0 s com $\kappa_x=1,5$ m^2/s e $\kappa_y=0,1$ m^2/s (solução obtida pelo Matlab à esquerda e pelo Wolfram Mathematica à direita).

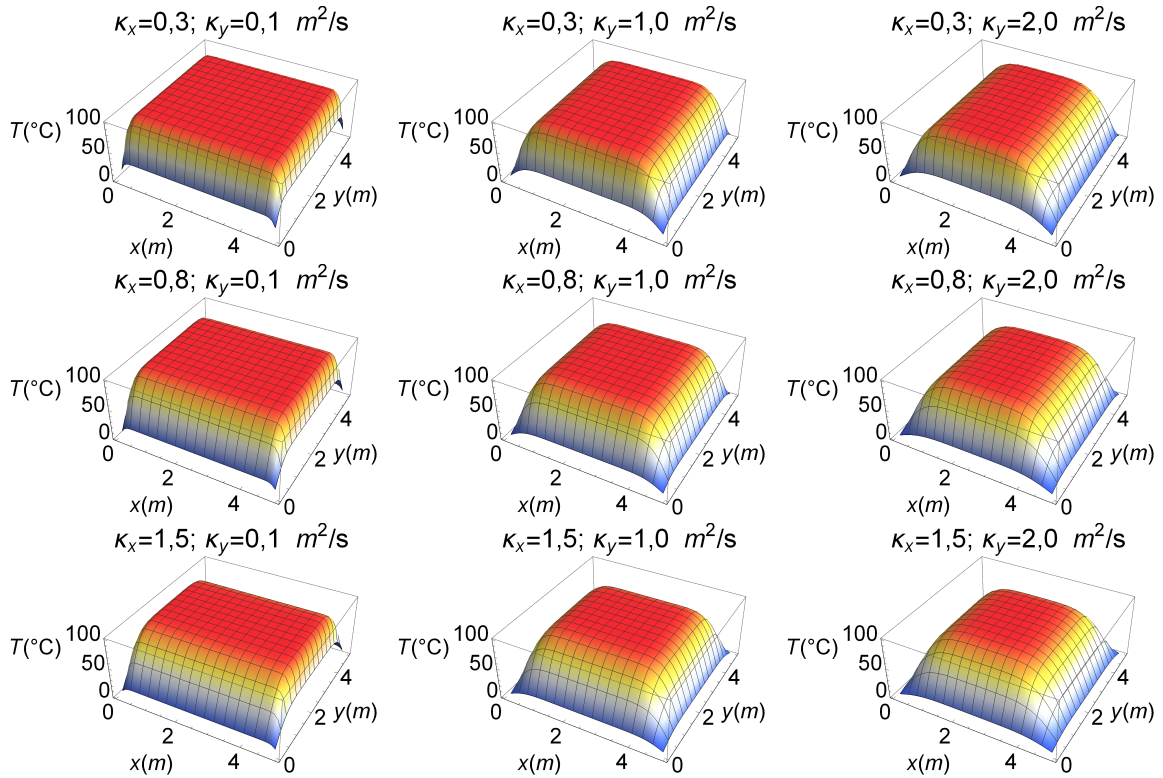


Figura 4.36: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t=0,1$ segundo.

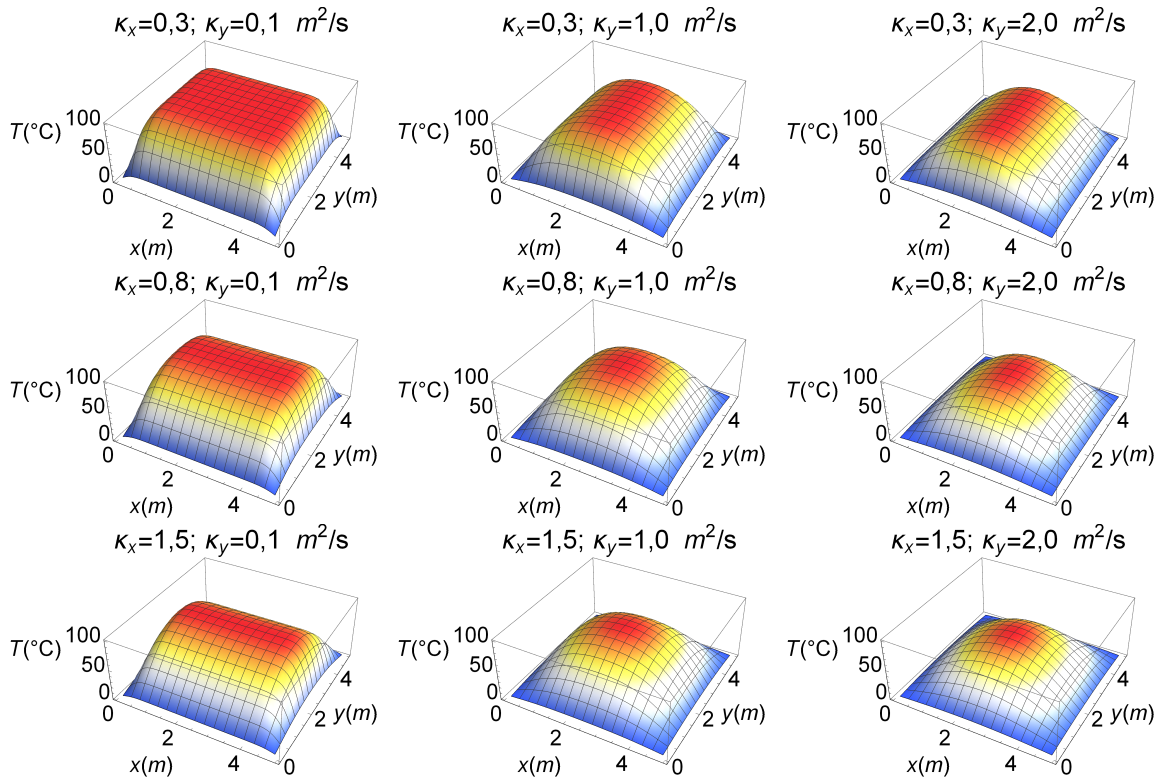


Figura 4.37: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t=0,5$ segundo.

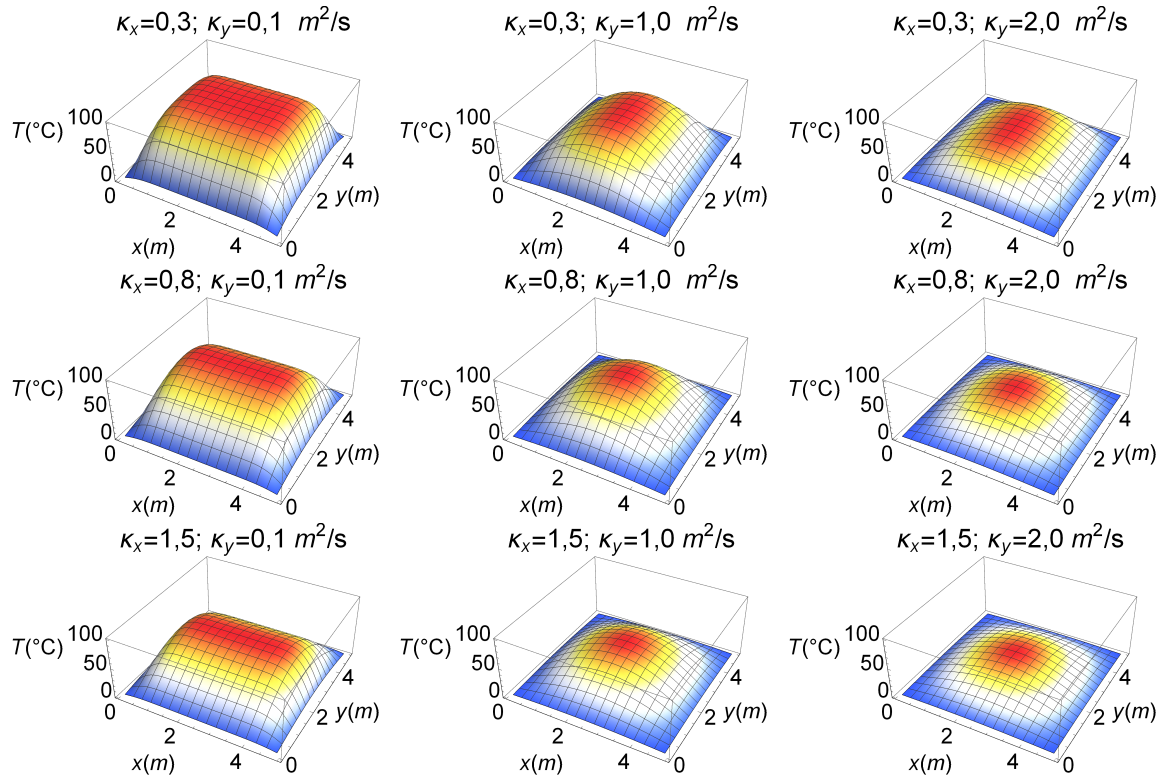


Figura 4.38: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t=1,0$ segundo.

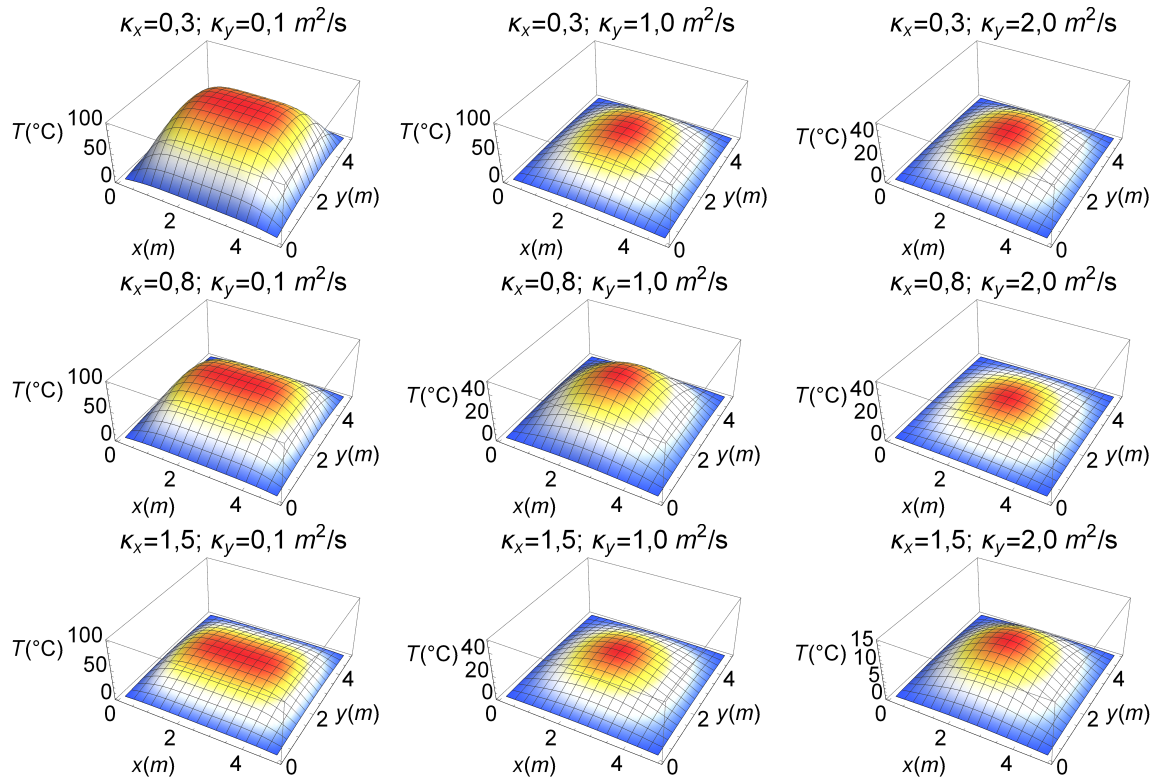


Figura 4.39: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de κ_x e κ_y para $t=2,0$ segundos.

4.2.3 Influência da densidade com a presença de fonte de calor

Após a investigação da influência da difusividade térmica sem a produção de calor, foi considerada a existência de uma fonte de produção de calor de 50 J, e verificada a dependência paramétrica da temperatura em função da densidade do corpo, comparando os valores de $\rho=0,1; 0,5; 1,0$ e $2,0 \text{ kg/m}^3$ para $t=0,1; 0,5; 1,0$ e $2,0$ segundos, para os valores de referência apresentados Tabela 3.2, exceto a temperatura inicial, a qual foi considerada como sendo de 50° C .

As Figuras 4.40 a 4.43 evidenciam que um corpo com menor densidade tem aquecimento mais rápido, sendo observado que quando ρ equivale a $0,1 \text{ kg/m}^3$, por exemplo, a temperatura máxima é inferior a 100° C para $t=0,1\text{s}$ e superior a 700° C para $t=2,0\text{s}$. À medida em que o valor de ρ aumenta, o aquecimento se torna mais lento, sendo que para ρ equivalente a $2,0 \text{ kg/m}^3$, por exemplo, os valores observados da temperatura na faixa de domínio para $0,1 \text{ s}$ são próximos aos observados para $2,0 \text{ s}$.

Para valor de t fixo, por sua vez, foram observadas maiores temperaturas para menores valores de densidade, assim como observado para a condutividade térmica.

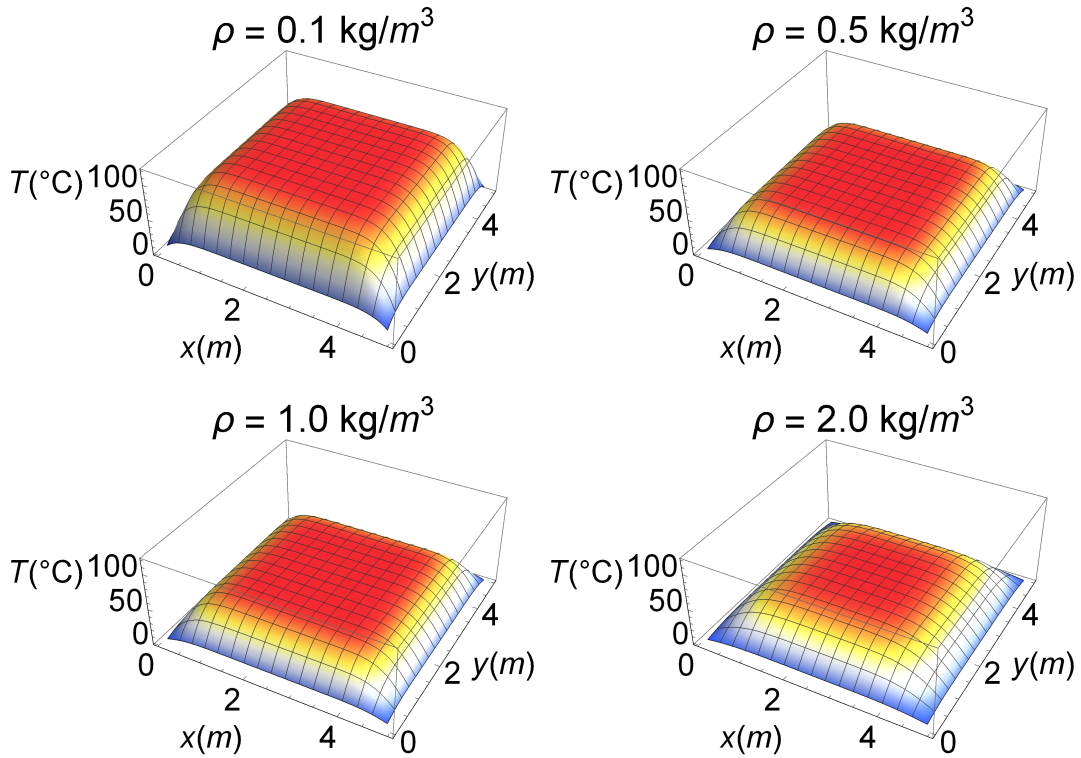


Figura 4.40: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t=0,1$ segundo.

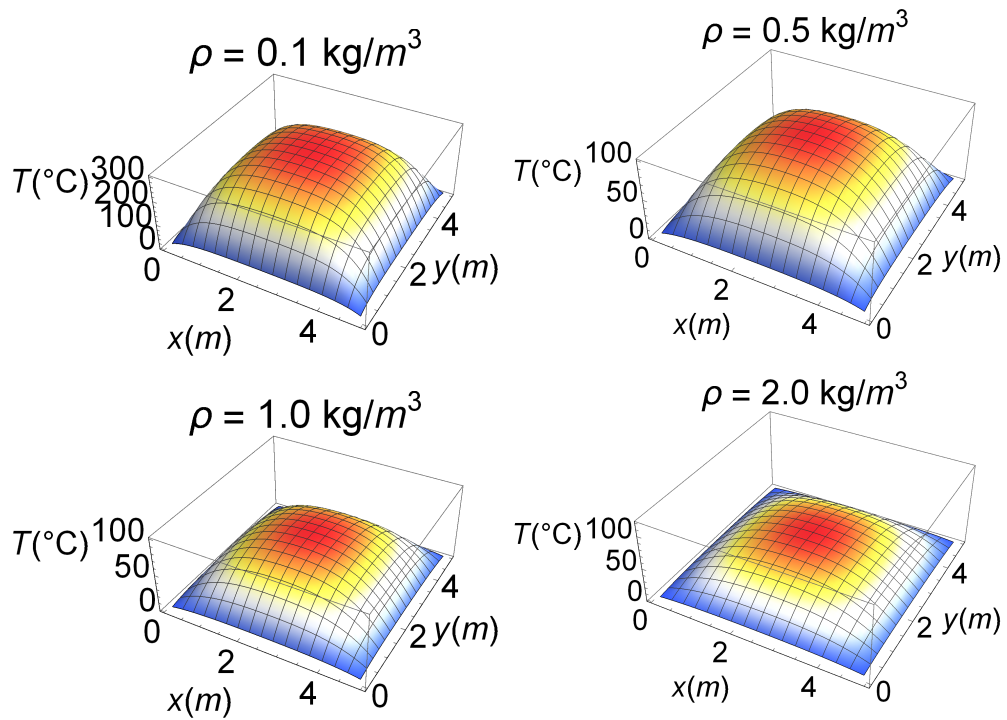


Figura 4.41: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t=0,5$ segundo.

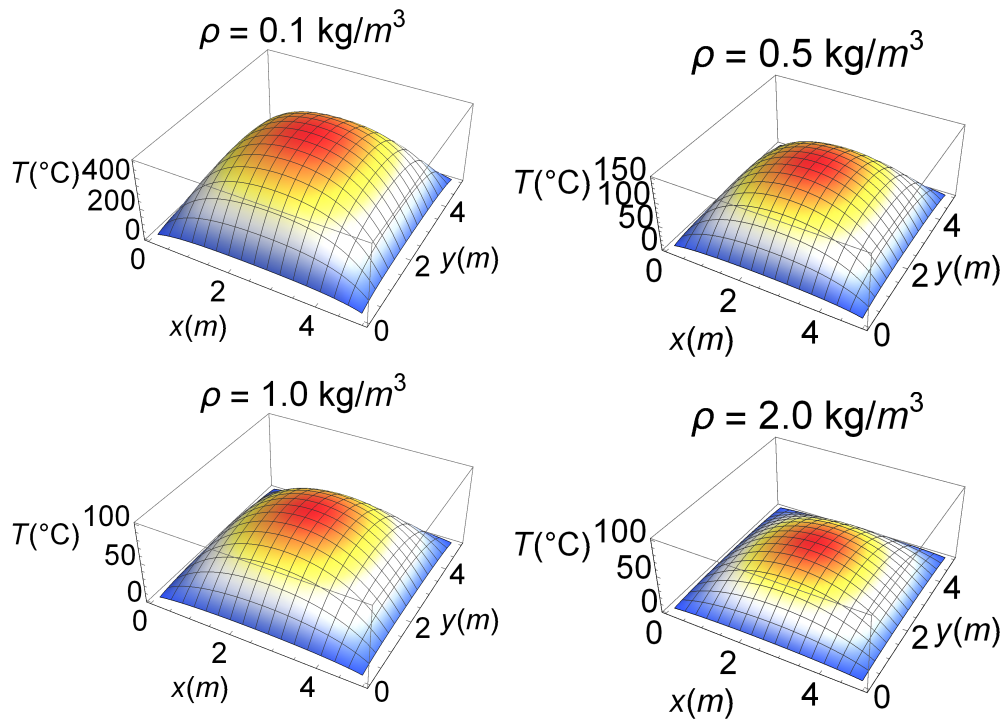


Figura 4.42: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t=1,0$ segundo.

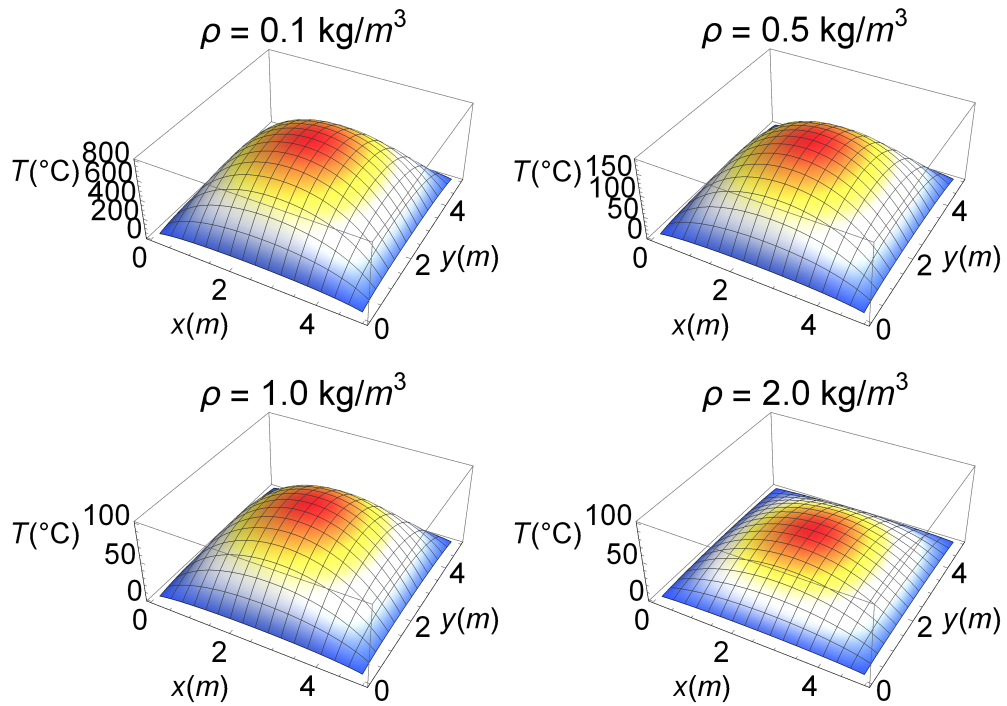


Figura 4.43: Distribuição da temperatura em função da distância, comparando diferentes valores de ρ para $t=2,0$ segundos.

O estudo evidenciou que de modo geral, há uma grande variação na dependência paramétrica da equação do calor bidimensional, visto que valores mais baixos dos parâmetros de condutividade térmica e densidade produzem uma variação muito mais expressiva na distribuição de temperatura na faixa de domínio em função do tempo.

O método numérico apresentou resultados satisfatórios para a análise da dependência paramétrica da equação do calor bidimensional, possibilitando avaliar as condições em que a transferência de calor é favorecida ou dificultada.

Capítulo 5

Conclusões

O presente estudo contemplou o emprego do método da diferença finita explícita para a avaliação da dependência paramétrica da equação da difusão unidimensional na variável espacial em dois cenários de dispersão de soluto do tipo pulso, sendo estes espacialmente dependente e temporalmente dependente, e da equação do calor bidimensional nas condições isotrópica e não isotrópica, com e sem a presença de fonte de calor.

Para o cenário de dispersão de soluto espacialmente dependente em meio não homogêneo com fluxo instável, foi realizada uma expansão do estudo desenvolvido por Santana (2017), sendo verificado que quando a fonte está ativada, maiores valores de velocidade do fluxo e coeficiente de dispersão na origem implicaram em maiores valores de C/C_0 , e que a influência do parâmetro de heterogeneidade do meio depende da distância em relação à fonte, visto que os valores de C/C_0 são mais elevados para menores valores de heterogeneidade do meio nas proximidades da fonte e para maiores valores do parâmetro após uma determinada distância. Com a fonte desativada, por sua vez, as influências dos parâmetros de heterogeneidade do meio, de velocidade inicial do fluxo e do coeficiente de dispersão são muito semelhantes, sendo verificado que valores mais elevados dos três parâmetros implicam em concentrações menores nas proximidades da fonte e maiores após a distância onde há um pico de máxima concentração.

A variação da concentração em função da distância e do tempo observada para o cenário de dispersão temporalmente dependente em meio homogêneo com fluxo uniforme foi semelhante à observada para o cenário de dispersão espacialmente dependente em meio não homogêneo com fluxo instável, ou seja, maiores valores de velocidade do fluxo uniforme e do coeficiente de dispersão inicial implicaram em maiores valores de C/C_0 com a

fonte ativada e menores valores de C/C_0 apenas nas proximidades da fonte após a desativação da mesma, sendo observado o inverso após uma determinada distância onde há o pico de máxima concentração. No entanto, observou-se que valores mais elevados de velocidade do fluxo uniforme no cenário de dispersão espacialmente dependente implicaram em níveis de concentração muito maiores em relação ao observado para o cenário de dispersão temporalmente dependente. Considerando que o tempo estimado para remediação do meio deste cenário foi praticamente o dobro do verificado para o cenário de dispersão espacialmente dependente em meio heterogêneo com fluxo instável, ficaram evidenciadas as condições que favorecem e dificultam a dispersão.

O método da diferença finita explícita também se mostrou satisfatório para análise da dependência paramétrica da equação do calor bidimensional, sendo verificado que menores valores de condutividade térmica e de densidade implicam em temperaturas mais elevadas na faixa de domínio, sendo que a influência de tais parâmetros vai se tornando mais expressiva a medida em que o tempo de condução aumenta. Quando não há fonte de calor, foi observado que a redução da temperatura de um corpo em relação ao tempo é mais expressiva quando os valores de condutividade térmica são menores, e quando há fonte de calor, o aquecimento do corpo em relação ao tempo é mais expressivo para menores valores de densidade.

Levando-se em conta que a equação do calor é um caso específico da equação da difusão, este estudo pode ser utilizado como base para o desenvolvimento de modelos bi e tridimensional da equação da difusão completa, que possa vir a ser empregada no planejamento de fontes de poluição ambiental e no gerenciamento da qualidade dos recursos ambientais.

Ressalta-se que o presente estudo foi apresentado na *Conference on the Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations (NUMDIFF-15)*, ocorrida em setembro de 2018 no município de Halle-Saale, na Alemanha, sendo contemplada uma apresentação de 20 minutos e 5 minutos de discussão.

Referências Bibliográficas

- AHMED, M.; ZAINAB, Q.U.A.; QAMAR, S. Analysis of one-dimensional advection–diffusion model with variable coefficients describing solute transport in a porous medium. *Transp Porour Med*, 47, 327-344, 2017.
- ANTONIONI, G. et al. Comparison of CFD and operational dispersion models in an urban-like environment. *Atmospheric Environment* 47, 365-372, 2012.
- ASWIN, V.S., AWASTHIA, A.; ANU, C. A comparative study of numerical schemes for convection-diffusion equation. *Procedia Engineering* 127, 621-627. International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, 2015.
- BARBON, A. Simulação das emissões atmosféricas sobre o município de Araucária com uso do modelo AERMOD. 2008. 172p. Tese (Doutorado). Universidade Positivo, Curitiba-PR.
- BASTOS, J. et al. Intake fraction estimates for on-road fine particulate matter (PM_{2.5}) emissions: Exploring spatial variation of emissions and population distribution in Lisbon, Portugal. *Atmospheric Environment*, 190, 284-293, 2018.
- BECKER, T.W.; KAUSS. B.J.P. Numerical Modeling of Earth Systems: An introduction to computational methods with focus on solid Earth applications of continuum mechanics. USC GEOL557: Modeling Earth Systems, 2016, 222 p.
- CASSOL, M.; WORTMANN, S.; RIZZA, U. Analytic modeling using of two-dimensional transient atmospheric pollutant dispersion by GITT and Laplace transform techniques. *Environmental Modelling and Software*. 24, 144-151, 2009.
- CAUSON, D.M.; MINGHAM, C.G. Introductory finite difference methods for PDEs. *Maersk International Technology Science Programme*, 2010, 144 p.
- COSTA, C.P. et al. A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere. *J Eng Math* 74, 159-173, 2012.

- DAVIS, M. Finite difference methods. Imperial College London, 2010, 40 p.
- DJORDJEVICH, A.; SAVOVIC, S. Solute transport with longitudinal and transverse diffusion in temporally and spatially dependent flow from a pulse-type source. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 65, 321-326, 2013.
- DUBOIS, Y.; COMMERÇON, B. An implicit scheme for solving the anisotropic diffusion of heat and cosmic rays in the RAMSES code. *Astronomy & Astrophysics*, 585, A138, 10 p., 2016, 2013, DOI: 10.1051/0004-6361/201527126.
- GHAREHBAGHI, A. Explicit and implicit forms of differential quadrature method for advection-diffusion equation with variable coefficients in semi-infinite domain. *Journal of Hydrology*, 541, 935-940, 2016.
- GOUSSEAU, P.; BLOCKEN, B.; VAN HEIJST, G.J.F. CFD Simulation of pollutant dispersion around isolated buildings: on the role of convective and turbulent mass fluxes in the prediction accuracy. *Journal of Hazardous Materials* 194, 422-434, 2011.
- GRYNING, S.E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *J. Appl. Meteorol.* 23, 651-654, 1984.
- HO et al. Health impacts of the Southeast Asian haze problem – A time-stratified case crossover study of the relationship between ambient air pollution and sudden cardiac deaths in Singapore. *International Journal of Cardiology*, Volume 271, 15, 352-358, 2018.
- JAISWAL, D. K. et al. Analytical solutions for temporally and spatially dependent solute dispersion of pulse type input concentration in one-dimensional semi-infinite media. *Journal of Hydro-environment Research*, v. 2, n. 4, p. 254-263, abr. 2009.
- KAABECHE, K.; BELBAKI, A. Coupling effect of non-linearity and chemical heterogeneity on reactive solute transport in a fixed bed, *Chemical Engineering Transactions* 32, 1549-1554, 2013, DOI: 10.3303/CET1332259.
- KUMAR, A.; JAISWALL, D. K.; KUMAR, N. Analytical solutions to one-dimensional advection-diffusion equation with variable coefficients in semi-infinite media. *Journal of Hydrology* 380, 330-337, 2010.
- LIN, H. et al. Gaseous air pollution and acute myocardial infarction mortality in Hong Kong: A time-stratified case-crossover study. *Atmospheric Environment*, 76, 68-73, 2013.

- LORA, E.E.S. Prevenção e controle da poluição nos setores energético, industrial e de transporte. 2 Ed. RJ: Interciência, 2002, 862p.
- MARTÍNEZ, A.R.; ROUBINET, D.; TARTAKOVSKY, D.M. Analytical models of heat conduction in fractured rocks. *Journal of Geophysics Research: Solid Earth*, 119, 83-89, 2013.
- MAZAHERI, M.; SAMANI, J.M.V.; SAMANI, H.M.V. Analytical Solution to one-dimensional advection-diffusion equation with several point sources through arbitrary time-dependent emission rate patterns. *Journal of Agricultural Science and Technology*, 15, 1231-1245, 2013.
- MAZZEO, N.A.; VENEGAS, L.E.. Design of an air quality surveillance system for Buenos Aires City integrated by a NOx monitoring network and atmospheric dispersion models. *Environmental Model Assess.* 13, 349-356, 2008.
- MOHAMMADMORADI, P. et al. Solvent diffusion and dispersion in partially saturated porous media: an experimental and numerical pore-level study. *Chemical Engineering Science*, 191, 300-317, 2018.
- MUNIR, S.; HABEEBULLAH, T.M. Vehicular emissions on main roads in Makkah, Saudi Arabia – a dispersion modelling study. *Arabian Journal of Geosciences*, 11, 531, 14 p., 2018.
- PEREIRA, M. F. Estudo numérico da equação da difusão unidimensional, 2014, 68 p. Dissertação (mestrado). Faculdade de Tecnologia, Unicamp, Limeira-SP.
- PEREIRA, M. F.; POZZA, S.A.; TIMÓTEO, V.S. Numerical methods for the evaluation of pollutant dispersion based on advection-diffusion equationm *Chemical Engineering Transactions*, 39, 799-804, 2014, DOI:10.3303/CET1439134.
- PETTRES, R.; LACERDA, L.A.; CARRER, J.A.M. A boundary element formulation for the heat equation with dissipative and heat generation terms. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 51, 191-198, 2015.
- POVSTENKO, Y. Generalized boundary conditions for the time-fractional advection diffusion equation. *Entropy*, 17, 4028-4039, 2015.

RIETH, A.; KOVÁCS, R.; FÜLÖP, T. Implicit numerical schemes for generalized heat conduction equations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 126, 1177-1182, 2018.

SAGRADO, A. et al. Numerical and experimental modelling of pollutant dispersion in a street canyon. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* 90, 321-339, 2002.

SANTANA, T. A. L. Dependência paramétrica da equação da difusão em 1+1 dimensões, 2017, 40 p. Dissertação (mestrado). Faculdade de Tecnologia, Unicamp, Limeira-SP.

SAVOVIC, S.; DJORDJEVICH, A. Finite difference solution of the one-dimensional advection-diffusion equation with variable coefficients in semi-infinite media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 55, 4291-4294, 2012.

SAVOVIC, S.; DJORDJEVICH, A. Numerical solution for temporally and spatially dependent solute dispersion of pulse type input concentration in semi-infinite media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 60, 291-295, 2013.

SINGH, M. K.; AHAMAD, S.; SINGH, V. P. Analytical solution for one-dimensional solute dispersion with time-dependent source concentration along uniform groundwater flow in a homogeneous porous formation, *Journal of Engineering Mechanics*, 138 (8), 1045-1056, 2012.

SINGH, M. K.; MAHATO, N.K.; KUMAR, N. Pollutant's horizontal dispersion along and against sinusoidally varying velocity from a pulse type point source. *Acta Geophysica*, 63, 214-231, 2015.

TALAEI, M.R.; KABIRI, A.; KHODARAHMI, R. Analytical solution of hyperbolic heat conduction equation in a finite medium under pulsatile heat source, *Iran J Sci Technol Trans Mech Eng*, 42, 269-277, 2018.

WOLFRAM RESEARCH Inc. *Mathematica 9.0*, Champaign, Illinois, 2012.

YADAV, S.K.; KUMAR, A.; KUMAR, N. Horizontal solute transport from a pulse-type source along temporally and spatially dependent flow: analytical solution. *Journal of Hydrology*. 412-413, 193-199, 2012.