

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA
BACHARELADO EM MATEMÁTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA

Modelos Analíticos de Dispersão de Poluentes Atmosféricos

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Mario Luiz Previatti de Souza

Florianópolis
2012

Mario Luiz Previatti de Souza

***Modelos Analíticos de Dispersão de Poluentes
Atmosféricos***

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Matemática do Departamento de Matemática do Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do grau de Bacharel em Matemática e Computação Científica.

Orientador:
Antonio Carlos Gardel Leitão

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

Florianópolis

2012

Esta monografia foi julgada adequada como TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO no Curso de Matemática - Habilitação Bacharelado e Computação Científica e aprovada em sua forma final pela Banca Examinadora designada pela Portaria nº28/CCM/2012.

Prof. Nereu Estanislau Burin
Professor da disciplina

Banca Examinadora:

Prof. Antonio Carlos Gardel Leitão
Orientador

Prof. Milton dos Santos Brait
Co-orientador

Prof. Nereu Estanislau Burin

Prof. Ivan Pontual Costa e Silva

Agradecimentos

Agradeço a Deus pela vida, por me iluminar e me guiar e por me dar serenidade em todos os momentos.

À minha família, em especial minha mãe Marly Previatti, minha tia Luzia Previatti e meu primo Osvaldo Previatte Szenczuk, que constituem os pilares da minha formação como pessoa, por todo apoio, exemplo, confiança e dedicação. Amo vocês.

Ao professor, orientador e amigo Milton dos Santos Braitt por ter me guiado e feito com que desenvolvesse este trabalho, por toda a competência, compreensão, paciência, confiança, incentivo e por ter me orientado de modo único, formando, acima de tudo, uma amizade.

Ao professor, orientador e amigo Antonio Carlos Gardel Leitão por toda ajuda para terminar este trabalho, pelos incentivos moral e matemático fornecidos e por ser uma referência inquestionável ao longo da minha graduação.

Aos professores e amigos Luciano Bedin, Paulo Rafael Bösing, Nereu Estanislau Burin e Fermin Sinforiano Viloche Bazan por toda ajuda e por terem me guiado ao longo da minha graduação, pela confiança que me proporcionaram e por serem fontes infinitas de incentivos e energias positivas.

Ao professor e amigo Ivan Pontual Costa e Silva por ter me avaliado e incentivado nas duas bolsas PIBIC e por fazer parte da minha banca de TCC.

Aos meus colegas da matemática e amigos Renan, Clara, Felipe, Anderson, Deividi, Dennis, William e Edson, por tornarem a universidade um lugar de estudos mais agradável.

Ao meu amigo Geovani, pelos momentos que antecederam o da faculdade.

E por fim, não menos importante, a Cássia Aline Schuck, por transformar horas árduas de estudo em horas suaves de estudo, pelo companheirismo em todos os momentos, inspiração e eterna amizade e, principalmente, por tornar meus dias mais especiais e únicos.

Sumário

Resumo	
Introdução	p. 6
1 Modelo 1: A pluma gaussiana	p. 9
2 Modelo 2: Sedimentação e absorção	p. 17
Considerações Finais	p. 24
3 Apêndice	p. 25
3.1 A distribuição delta de Dirac e a solução fundamental da equação de difusão .	p. 25
3.2 Transformadas de Laplace	p. 26
3.3 Funções de Green	p. 31
Referências Bibliográficas	p. 34

Resumo

Neste Trabalho de Conclusão de Curso apresentamos e resolvemos dois modelos de dispersão atmosférica. Nosso objetivo foi aprender e praticar algumas das técnicas de resolução de equações diferenciais parciais (EDPs), as transformadas de Laplace e funções de Green, aplicadas neste problema físico. Os modelos de dispersão atmosférica se referem à descrição do transporte aéreo de partículas atmosféricas a partir da *Lei da Conservação de Massa* para a concentração das partículas (o que nos dá um problema envolvendo EDPs), em que o termo dispersão é usado para descrever a combinação dos fenômenos de difusão e de advecção no fluxo de massa que ocorre com o ar próximo à superfície da Terra, com a difusão sendo os movimentos de vórtices gerados pelo vento e a advecção sendo o transporte de partículas causado pelas correntes de ar. Os dois modelos se referem a partículas atmosféricas cuja emissão da fonte pontual é constante e está sob vento unidirecional de velocidade também constante. A diferença entre os modelos é que para o primeiro não consideramos processos de remoção de partículas da atmosfera, enquanto que no segundo é considerado o mecanismo de deposição. Para o primeiro modelo, apresentamos todas as hipóteses simplificadoras para deduzirmos o modelo da pluma gaussiana, o qual resolvemos pelas transformadas de Laplace. Para o segundo, mostramos como a hipótese de considerar o fenômeno da deposição altera o problema de EDP e o resolvemos pelas transformadas de Laplace e funções de Green.

Palavras-Chave: *Dispersão atmosférica, pluma gaussiana, equações diferenciais parciais, transformadas de Laplace, funções de Green.*

Introdução

A necessidade de descrever o transporte e a concentração dos poluentes atmosféricos emitidos em forma de plumas motivou este trabalho de conclusão de curso. Os modelos de plumas possuem aplicações diretas na saúde humana, entre as quais podemos citar a utilização nos pacotes de softwares das indústrias com o objetivo de monitorar e regular a liberação de resíduos na atmosfera [18]; vigilância das cinzas lançadas de um vulcão em erupção [20]; dispersão de pólen e sementes [22], entre outros. As partículas lançadas na atmosfera podem ser removidas por processos naturais. O mecanismo natural de remoção considerado é a deposição das partículas na superfície, resultante da sedimentação gravitacional e da absorção delas pela superfície (solo, vegetação, prédios, água, etc). A superfície onde as partículas se depositam pode ter um impacto significativo no ecossistema local, por exemplo, se o contaminante entrar e percorrer caminhos biológicos. Além disso, a depleção das plumas de poluição diminui a concentração da poluição no ar, especialmente quando a deposição ocorre ao longo grandes distâncias.

Um modelo de dispersão atmosférica se refere à descrição do transporte aéreo de partículas atmosféricas a partir da *Lei da Conservação de Massa* - equação da continuidade para a função $C(\vec{x}, t)$ [kg/m^3], descrevendo a concentração do poluente atmosférico:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = S,$$

em que $S(\vec{x}, t)$ [kg/m^3s] representa a fonte emissora de poluição e a função vetorial $\vec{J}(\vec{x}, t)$ está representando o fluxo de massa [kg/m^2s] da partícula e $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$. O termo de dispersão $\nabla \cdot \vec{J}$, neste contexto, é usado para descrever a combinação dos efeitos de difusão e de advecção no fluxo de massa que ocorrem com o ar próximo à superfície da Terra. A difusão, também chamada de difusão turbulenta, é consequência dos movimentos de vórtices causados pelo vento. Para considerar este efeito no fluxo de massa usamos a *Primeira Lei de Fick* para a difusão atmosférica, isto é, o coeficiente de difusão é proporcional ao gradiente da concentração do poluente, sendo que este coeficiente representa a facilidade com que cada partícula se move no ar. A advecção é o transporte de partículas pelo vento. Com isso, o fluxo de massa passa a ser expresso por $\vec{J}(\vec{x}, t) = C\vec{u} - \mathbf{K}\nabla C$, em que \vec{u} é a velocidade do vento e $\mathbf{K}(\vec{x}) = \text{diag}(K_x, K_y, K_z)$ [m^2/s] uma matriz diagonal cujas entradas são os coeficientes de difusão turbulenta. Apresentamos dois

modelos analíticos de dispersão atmosférica.

Modelo 1. O primeiro modelo apresentado e resolvido analiticamente, a partir da equação da continuidade, é o modelo clássico de dispersão atmosférica, chamado de *pluma gaussiana*

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + Q \delta(x) \delta(y) \delta(z - H),$$

com condições de Dirichlet homogênea em $(0, y, z)$ e de Neumann homogênea em $(x, y, 0)$, e decaimento no infinito. O modelo é usado para calcular concentrações de poluição a partir de uma única fonte pontual e considerado na ausência de quaisquer mecanismos de remoção de partículas como em [2,11,19]. Outras considerações também foram feitas: o contaminante é lançado a uma taxa constante Q [kg/s] de uma determinada altura H [m] e é inserido no modelo como uma formulação de distribuições delta de Dirac da forma $S(\vec{x}) = Q \delta(x) \delta(y) \delta(z - H)$ [4]; a velocidade do vento é constante e da forma $\vec{u} = (u, 0, 0)$ [m/s], para alguma constante $u > 0$; os coeficientes de difusão turbulenta são funções de posição apenas no eixo x ; a solução está no estado estacionário; o efeito da difusividade causado pelo vento é negligenciado e o solo é tomado como o plano $z = 0$. Para esta parte, baseamo-nos em [18] e encontramos a solução pelas transformadas de Laplace.

Modelo 2. No segundo modelo, abordamos um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos considerando a deposição como mecanismo natural de remoção das partículas. Este problema, em que ocorrem os processos de sedimentação e absorção, foi estudado primeiramente por Calder em [1]. Nesta formulação, tanto o fluxo vertical do contaminante devido à sedimentação quanto o fluxo devido à absorção são tomados como sendo proporcionais à concentração no local. Os fatores proporcionais foram chamados, respectivamente, de velocidade de sedimentação, ω_{sed} [m/s], e de velocidade de deposição, ω_{dep} [m/s], que, geralmente, são diferentes um do outro. A partir de [1], soluções para problemas de dispersão atmosférica foram obtidas para vários casos [7,13,15], embora em [4] se diga que estas não têm sido usadas extensivamente, devido à natureza complicada do problema ou à dificuldade de implementá-las sob a variação das condições atmosféricas. Segundo [4], o método que inclui os efeitos de deposição na superfície, no modelo de transporte aéreo de partículas, com utilização considerável [6,8,10,21], é a formulação com depleção na fonte emissora. Essa abordagem é descrita em detalhes por Pasquill em [12] e essencialmente trata a deposição no solo como uma perturbação no modelo de dispersão da pluma gaussiana. A forma do perfil vertical da pluma é assumida como inalterada pelo processo de deposição e a fonte constante é substituída por uma fonte com intensidade decrescente. Esta fonte é derivada da forma integral da equação da continuidade e da suposição que a taxa de deposição é proporcional à concentração das

partículas poluentes no nível do solo [4]. Com isso, o resultado é uma pluma que diminui exponencialmente à medida que a distância aumenta na direção do vento, enquanto conserva a forma original da pluma gaussiana sem depleção. O objetivo foi estudar um modelo analítico de dispersão atmosférica que trata a deposição do contaminante de um modo fisicamente mais realístico do que a abordagem da fonte com diminuição de intensidade feita em [12] e, ainda assim, de fácil aplicação como o modelo da pluma gaussiana. Para isso, usamos a proposta de Ermak em [4] que utiliza a abordagem sugerida por [1] sobre a deposição das partículas, além das hipóteses necessárias para a pluma gaussiana,

$$u \frac{\partial C}{\partial x} - \omega_{sed} \frac{\partial C}{\partial z} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + Q \delta(x) \delta(y) \delta(z - H),$$

$$\left(K_z \frac{\partial C}{\partial z}(x, y, 0) + \omega_{sed} C(x, y, 0) \right) = \omega_{dep} C(x, y, 0),$$

com condição de Dirichlet homogênea em $(0, y, z)$ e decaimento no infinito. O procedimento de [4] para resolver este modelo segue [3, pp. 358-359] pela técnica das transformadas de Laplace. No entanto, solucionamos o mesmo pelas funções de Green.

O trabalho está dividido em dois capítulos, *Capítulo 1* e *Capítulo 2*, em que estão os *Modelo 1* e *Modelo 2*, respectivamente. Ao final, um *Apêndice* que contém os resultados utilizados nos capítulos do trabalho. Os dois modelos foram resolvidos analiticamente utilizando técnicas de transformadas de Laplace e das funções de Green de modo formal, envolvendo manipulações com a distribuição delta de Dirac e funções de Green que, de um ponto de vista rigoroso, devem ser melhor definidas, uma vez que o objetivo foi de aprender técnicas de resolução de equações diferenciais e aplicá-las a problemas de relevância no contexto atual. O primeiro modelo está presente em [18] e o *Modelo 2* está em [4]. A necessidade de se estudar a teoria de distribuições, definir o espaço em que queremos uma solução e mostrar a existência, a unicidade e a dependência contínua é evidente e deve ser sanada em algum momento, mas não cabe na abordagem deste trabalho.

1 Modelo 1: A pluma gaussiana

Neste capítulo apresentamos as hipóteses simplificadoras de um modelo de transporte aéreo de partículas atmosféricas para obtermos o modelo da pluma gaussiana. Encontramos a solução por transformadas de Laplace e fizemos uma validação qualitativa da solução. Para este capítulo, baseamo-nos em [18].

O interesse se baseia no transporte aéreo de uma partícula contaminante cuja concentração de massa (ou densidade) no ponto $\vec{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ [m] e tempo $t \geq 0$ [s] pode ser descrita por uma função suave $C(\vec{x}, t)$ [kg/m³].

A *Lei da Conservação de Massa* para a concentração do poluente $C(\vec{x}, t)$ [kg/m³] é expressa na forma diferencial (equação da continuidade) [14,18], por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = S,$$

em que $S(\vec{x}, t)$ [kg/m³s] é o termo que representa a fonte emissora de poluição e a função vetorial $\vec{J}(\vec{x}, t)$ representa o fluxo de massa [kg/m²s] da partícula que combina os efeitos de difusão e de advecção, isto é, $\vec{J} = \vec{J}_d + \vec{J}_a$. O efeito de difusão no fluxo de massa surge da turbulência gerada na atmosfera [14,18]. O resultado principal sobre a difusão é a validade da *Primeira Lei de Fick* para a difusão atmosférica, isto é, $\vec{J}_d = -\mathbf{K}\nabla C$. O sinal negativo garante que o contaminante flui de regiões de alta concentração para regiões de baixa concentração. O coeficiente de difusão \mathbf{K} é dado por $\mathbf{K}(\vec{x}) = \text{diag}(K_x, K_y, K_z)$ [m²/s], uma matriz diagonal cujas entradas são os coeficientes de difusão turbulenta (em geral são funções de posição [4,14,18]) que representa a facilidade com que cada partícula se move no ar nas direções x , y e z , respectivamente. A segunda contribuição para o fluxo de massa, a advecção linear, é causada pelo vento e expressa por $\vec{J}_a = C\vec{u}$, com \vec{u} [m/s] sendo a velocidade do vento. Com isso, podemos escrever o fluxo de massa total como $\vec{J} = C\vec{u} - \mathbf{K}\nabla C$.

Portanto, a equação de difusão e transporte (equação tridimensional de advecção e difusão) é

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot C\vec{u} = \nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla C) + S.$$

Para determinar o modelo que nos fornece a pluma gaussiana faremos sete hipóteses simplificadoras para o problema.

1. O contaminante é emitido a uma taxa constante Q [kg/s] de fonte pontual em $\vec{x} = (0, 0, H)$ localizada a uma altura H [m] da superfície. Consideraremos o termo fonte como sendo $S(\vec{x}) = Q\delta(x)\delta(y)\delta(z-H)$, em que $\delta(\cdot)$ é a distribuição delta de Dirac (Apêndice, seção 3.1). Esta formulação é sugerida por [4].
2. A velocidade do vento é constante [m/s] e alinhada com a parte positiva do eixo x de modo que $\vec{u} = (u, 0, 0)$, para alguma constante $u > 0$.
3. A solução está no estado estacionário, o que é viável se a velocidade do vento e todos os outros parâmetros forem independentes do tempo e, além disso, se a escala de tempo de interesse é grande o suficiente.
4. Os coeficientes de difusão turbulenta [m^2/s] são funções de posição apenas no eixo x na direção do vento a partir da fonte.
5. A velocidade do vento é grande o suficiente para que o efeito da difusão na direção do eixo x seja muito menor que o da advecção de forma que o termo $\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right)$ possa ser negligenciado.
6. Variações na topografia são insignificantes, de modo que a superfície possa ser tomada como o plano $z = 0$.
7. O contaminante não penetra no solo.

Fazendo uso das hipóteses 1 – 6, a equação de advecção e difusão se reduz a

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + Q\delta(x)\delta(y)\delta(z-H),$$

em que buscamos soluções para $0 \leq x < \infty$, $-\infty < y < \infty$ e $0 \leq z < \infty$. Como desejamos um problema bem posto, complementaremos a EDP com as seguintes condições de fronteira

$$C(0, y, z) = 0, \quad C(\infty, y, z) = 0, \quad C(x, \pm\infty, z) = 0 \quad C(x, y, \infty) = 0.$$

A primeira condição é devida a unidireção da velocidade do vento e ao fato de que não há contaminantes para $x < 0$. As demais condições decorrem de que a massa total do contaminante liberado deve permanecer finita. E de acordo com a hipótese 7, temos a última condição de fronteira, $K_z \frac{\partial C}{\partial z}(x, y, 0) = 0$, pois essa hipótese nos diz que o fluxo vertical do contaminante

na superfície é nulo. Dessa forma, a EDP com essas condições de fronteira nos fornece um problema bem posto [18].

Resolveremos uma formulação equivalente para o problema acima. Para obter este novo modelo, integramos a equação dos dois lados em relação a $x \in [-d, d]$, $d \geq 0$ e usamos a definição $\int_{-d}^d \delta(x) dx = 1$ (*Apêndice, seção 3.1*), obtendo assim

$$\begin{aligned} uC(d, y, z) &= \int_{-d}^d \left(K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) dx + Q\delta(y)\delta(z-H), \\ &= 2d \left(K_y \frac{\partial^2 C_d}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C_d}{\partial z^2} \right) + Q\delta(y)\delta(z-H), \end{aligned}$$

em que $C_d = \frac{1}{2d} \int_{-d}^d C dx$ e usando o fato de que $C(-d, y, z) = 0$. Tomando o limite quando $d \rightarrow 0^+$, temos

$$uC(0, y, z) = Q\delta(y)\delta(z-H),$$

enquanto todas as outras condições permanecem idênticas.

Portanto, nosso problema a ser resolvido fica

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad 0 \leq x < \infty, \quad -\infty < y < \infty, \quad 0 \leq z < \infty,$$

$$C(0, y, z) = \frac{Q}{u} \delta(y)\delta(z-H),$$

$$C(\infty, y, z) = 0, \quad C(x, \pm\infty, z) = 0, \quad C(x, y, \infty) = 0,$$

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z}(x, y, 0) = 0,$$

em que a equivalência está demonstrada no *Apêndice, seção 3.1, teorema 3.3*.

Com o modelo matemático estabelecido, passamos à etapa de encontrar a solução. Os coeficientes de difusão turbulenta na equação e na condição de fronteira são funções de posição na direção do vento e variam conforme as condições climáticas e com o tempo. Conseqüentemente, é difícil determiná-los na prática. Considerando isso, faremos as seguintes substituições de variáveis

$$r_y(x) = \frac{1}{u} \int_0^x K_y(\xi) d\xi, \quad r_z(x) = \frac{1}{u} \int_0^x K_z(\xi) d\xi$$

cujas unidades são $[m]$. Essas substituições eliminarão os coeficientes de difusão após a separação de variáveis. Utilizando essas mudanças de variáveis e a definição $c(r_y, r_z, y, z) := C(x, y, z)$, obtemos da EDP acima a equação que resolveremos,

$$K_y \frac{\partial c}{\partial r_y} + K_z \frac{\partial c}{\partial r_z} = K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2},$$

com condições de fronteira semelhantes, uma vez que não temos derivadas em x nas condições, isto é,

$$\begin{aligned} c(0, 0, y, z) &= \frac{Q}{u} \delta(y) \delta(z - H), \\ c(\infty, \infty, y, z) &= 0, \quad c(r_y, r_z, \pm\infty, z) = 0, \quad c(r_y, r_z, y, \infty) = 0, \\ K_z \frac{\partial c}{\partial z}(r_y, r_z, y, 0) &= 0. \end{aligned}$$

Para eliminar, de fato, os coeficientes de difusão, aplicaremos a seguinte separação de variáveis

$$c(r_y, r_z, y, z) = \frac{Q}{u} a(r_y, y) b(r_z, z),$$

assumindo que a dependência da solução em y e z possa ser separada dessa forma. Logo, temos

$$\frac{\left(K_y \frac{\partial a}{\partial r_y} - K_y \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} \right)}{a} = - \frac{\left(K_z \frac{\partial b}{\partial r_z} - K_z \frac{\partial^2 b}{\partial z^2} \right)}{b} = \lambda, \quad \lambda \in \mathbb{R},$$

o que nos dá duas equações de difusão de dimensão reduzida com condições de fronteira

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial r_y} &= \frac{\partial^2 a}{\partial y^2}, \quad 0 \leq r_y < \infty, \quad -\infty < y < \infty, \\ a(0, y) &= \delta(y), \quad a(\infty, y) = 0, \quad a(r_y, \pm\infty) = 0, \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial b}{\partial r_z} &= \frac{\partial^2 b}{\partial z^2}, \quad 0 \leq r_z < \infty, \quad 0 \leq z < \infty, \\ b(0, z) &= \delta(z - H), \quad b(\infty, z) = 0, \quad b(r_z, \infty) = 0, \quad \frac{\partial b}{\partial z}(r_z, 0) = 0. \end{aligned}$$

Em que $\lambda = 0$ para satisfazer as condições de fronteira. Em ambos problemas as variáveis r_y e r_z podem ser vistas como variáveis temporais e então as condições de fronteira que contêm a distribuição delta de Dirac agem como condições iniciais para os problemas de difusão em $a(r_y, y)$ e $b(r_z, z)$, respectivamente.

Os dois problemas acima serão resolvidos pelo método das transformadas de Laplace cujas propriedades e transformadas de Laplace utilizadas estão no *Apêndice, seção 3.2*. Iniciaremos resolvendo $a_{r_y} = a_{yy}$. Seja $\hat{a}(\rho, y) := \mathcal{L}_{r_y}\{a(r_y, y)\}$ a transformada de Laplace de $a(r_y, y)$ em relação à variável r_y em que ρ é a nova variável. Como $a(0, y) = \delta(y)$, pela regra da diferenciação de transformadas de Laplace temos

$$\frac{\partial^2 \hat{a}}{\partial y^2} - \rho \hat{a} = -\delta(y).$$

Seja, em relação a y , a transformada de Laplace de $\hat{a}(\rho, y)$, $\hat{\hat{a}}(\rho, \eta) := \mathcal{L}_y\{\hat{a}(\rho, y)\}$ com η a

nova variável. Como $\mathfrak{L}_y\{\delta(y)\} = 1$, então

$$\eta^2 \hat{a} - \eta \hat{a}(\rho, 0) - \frac{\partial \hat{a}}{\partial y}(\rho, 0) - \rho \hat{a} = -1, \quad 0 \leq y < \infty.$$

Definindo $w = \hat{a}(\rho, 0)$ e $-v = \hat{a}_y(\rho, 0) - 1$, obtemos $\hat{a} = \frac{\eta w - v}{\eta^2 - \rho}$.

Aplicando a transformada inversa em relação a η , temos

$$\begin{aligned} \hat{a}(\rho, y) &= w \cosh(\sqrt{\rho}y) - \frac{v}{\sqrt{\rho}} \sinh(\sqrt{\rho}y) \\ &= \frac{w}{2} [\exp(\sqrt{\rho}y) + \exp(-\sqrt{\rho}y)] - \frac{v}{2\sqrt{\rho}} [\exp(\sqrt{\rho}y) - \exp(-\sqrt{\rho}y)]. \end{aligned}$$

Para que $\hat{a}(\rho, \pm\infty) = 0$, devemos ter $w = v/2\sqrt{\rho}$. Logo,

$$\hat{a}(\rho, y) = v \frac{\exp(-\sqrt{\rho}y)}{2\sqrt{\rho}}.$$

Suponha por um momento que v não dependa de ρ , então fazendo uso da transformada inversa em ρ , obtemos

$$a(r_y, y) = v \frac{\exp(-y^2/4r_y)}{\sqrt{\pi r_y}},$$

e como $\delta(y) = \lim_{r_y \rightarrow 0^+} \frac{\exp(-y^2/4r_y)}{\sqrt{4\pi r_y}}$ (Apêndice, seção 3.1), temos que $v = 1/2$. Por fim, obtemos

$$a(r_y, y) = \frac{\exp(-y^2/4r_y)}{\sqrt{4\pi r_y}}, \quad -\infty < y < \infty,$$

pois como a solução é par e o problema é simétrico em relação a $y = 0$ [18] foi possível estendermos o domínio.

Passamos a encontrar a solução $b(r_z, z)$ através da mesma técnica. Com a definição $\hat{b}(\rho, z) := \mathfrak{L}_{r_z}\{b(r_z, z)\}$ e $b(0, z) = \delta(z - H)$, temos

$$\frac{\partial^2 \hat{b}}{\partial z^2} - \rho \hat{b} = -\delta(z - H).$$

Definindo $\hat{b}(\rho, \zeta) := \mathfrak{L}_z\{\hat{b}(\rho, z)\}$ e como $\mathfrak{L}_z\{\delta(z - H)\} = \exp(-\zeta H)$ e $\frac{\partial \hat{b}}{\partial z}(\rho, 0) = 0$, então $\hat{b} = \frac{\zeta \hat{b}(\rho, 0) - \exp(-\zeta H)}{\zeta^2 - \rho}$.

Aplicando a transformada inversa em ζ , obtemos

$$\hat{b}(\rho, z) = \hat{b}(\rho, 0) \cosh(\sqrt{\rho}z) - \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sinh(\sqrt{\rho}(z - H))$$

$$= \frac{\hat{b}(\rho, 0)}{2} [\exp(\sqrt{\rho}z) + \exp(-\sqrt{\rho}z)] - \frac{1}{2\sqrt{\rho}} [\exp(\sqrt{\rho}(z-H)) - \exp(-\sqrt{\rho}(z-H))].$$

Pela condição de fronteira $\hat{b}(\rho, \infty) = 0$, devemos ter $\hat{b}(\rho, 0) = \exp(-\sqrt{\rho}H)/\sqrt{\rho}$. Então, concluímos que

$$\hat{b}(\rho, z) = \frac{1}{2\sqrt{\rho}} [\exp(-\sqrt{\rho}(z-H)) + \exp(-\sqrt{\rho}(z+H))].$$

Logo, após a inversão em ρ , temos a solução

$$b(r_z, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r_z}} [\exp(-(z-H)^2/4r_z) + \exp(-(z+H)^2/4r_z)].$$

Assim, podemos determinar a concentração da poluição emitida de $(0, 0, H)$ substituindo as soluções $a(r_y, y)$ e $b(r_z, z)$ na equação $c(r_y, r_z, y, z) = \frac{Q}{u} a(r_y, y) b(r_z, z)$. Portanto, a concentração do contaminante é expressa por

$$c(r_y, r_z, y, z) = \frac{Q}{4\pi u \sqrt{r_y r_z}} \exp(-y^2/4r_y) [\exp(-(z-H)^2/4r_z) + \exp(-(z+H)^2/4r_z)].$$

Podemos observar que $c(r_y, r_z, y, z)$ satisfaz a EDP e as condições de fronteira (no sentido de distribuições), sendo solução do problema [18]. Essa solução é chamada de pluma gaussiana para a equação de advecção e difusão, devido ao fato de que a dependência exponencial em y e z é similar a uma função do tipo gaussiana.

Note que se substituirmos a hipótese 7 por "O solo absorve perfeitamente o contaminante", a condição de fronteira referente a essa hipótese muda para $c(r_y, r_z, y, 0) = 0$, ou seja, apenas a expressão de $b(r_z, z)$ é modificada, a condição $\frac{\partial b}{\partial z}(r_z, 0) = 0$ é substituída por $b(r_z, 0) = 0$. Seguindo a mesma maneira de resolução, encontramos $\hat{b} = \frac{\hat{b}_z(\rho, 0) - \exp(-\zeta H)}{\zeta^2 - \rho}$ e aplicando a transformada inversa em ζ , concluímos que

$$\hat{b}(\rho, z) = \frac{-1}{\sqrt{\rho}} \sinh(\sqrt{\rho}(z-H)) + \hat{b}_z(\rho, 0) \frac{1}{\sqrt{\rho}} \sinh(\sqrt{\rho}z).$$

Mas, para que $\hat{b}(\rho, \infty) = 0$ devemos ter $\frac{\partial \hat{b}}{\partial z}(\rho, 0) = \exp(-\sqrt{\rho}H)$. Assim,

$$\hat{b}(\rho, z) = \frac{1}{2\sqrt{\rho}} [\exp(-\sqrt{\rho}(z-H)) - \exp(-\sqrt{\rho}(z+H))],$$

e portanto, após aplicar a transformada inversa em ρ ,

$$b(r_z, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r_z}} [\exp(-(z-H)^2/4r_z) - \exp(-(z+H)^2/4r_z)].$$

Dessa forma, a solução para esse caso é

$$c(r_y, r_z, y, z) = \frac{Q}{4\pi u \sqrt{r_y r_z}} \exp(-y^2/4r_y) \left[\exp(-(z-H)^2/4r_z) - \exp(-(z+H)^2/4r_z) \right].$$

Além disso, voltando ao caso anterior, se considerarmos os coeficientes de difusão turbulenta sendo isotrópicos, isto é, $K_x(x) = K_y(x) = K_z(x) := K(x)$, a concentração será dada por

$$c(r, y, z) = \frac{Q}{4\pi ur} \exp(-y^2/4r) \left[\exp(-(z-H)^2/4r) + \exp(-(z+H)^2/4r) \right],$$

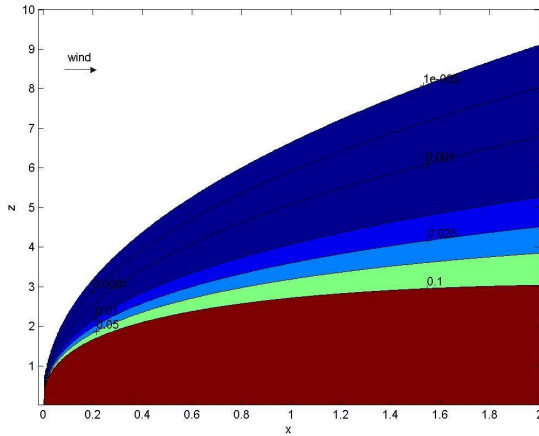
em que necessitamos apenas da substituição de variáveis $r(x) = \frac{1}{u} \int_0^x K(\xi) d\xi$ e a definição $c(r, y, z) := C(x, y, z)$. Suponha, agora, que além de serem isotrópicos, sejam constantes, isto é, $K(x) = K$, $K \in \mathbb{R}$. Então, $r(x) = Kx/u$ e assim

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi Kx} \exp(-y^2 u/4Kx) \left[\exp(-u(z-H)^2/4Kx) + \exp(-u(z+H)^2/4Kx) \right].$$

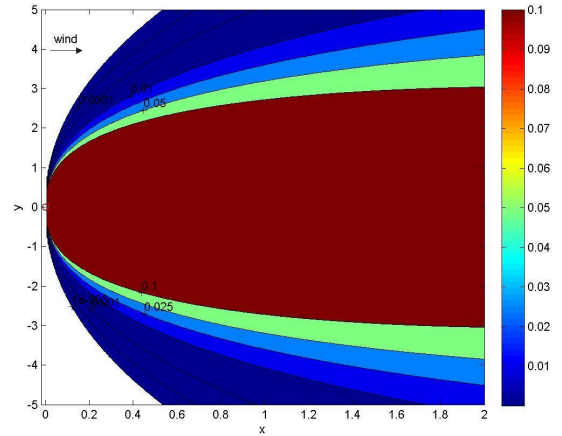
Veamos que $\lim_{u \rightarrow 0^+} C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi Kx}$, o que aparentemente contradiz a percepção que a solução não faz sentido quando $u = 0$. Vale lembrar que o modelo não considera velocidades de vento próximos a zero, isto é, $u \approx 0$. A razão dessa percepção se dá pela difícil determinação dos coeficientes de difusão turbulenta, assim a solução é geralmente escrita em termos de r , e então pode parecer que C tem uma singularidade quando $u \rightarrow 0^+$ se a dependência $r = r(x)$ for esquecida.

Para finalizar, uma simples expressão pode ser obtida para a concentração ao nível do solo (fazendo $z = 0$), $C(x, y, 0) = \frac{Q}{2\pi Kx} \exp\left(-\frac{u(y^2 + H^2)}{4Kx}\right)$. Assim, podemos observar que para uma fonte a uma determinada altura ($H > 0$), ao longo da linha de centro da pluma ($y = 0$), a concentração assume o máximo de $C_{max} = 2Q/(\pi u H^2 e)$ em $x = uH^2/4K$.

Para ilustrar o comportamento da solução consideraremos dois casos, um com fonte emissora no nível do solo, $H = 0$ [m] e outro levemente acima, $H = 2$ [m] e tomamos os seguintes parâmetros $Q = 4$ [kg/s], $u = 1$ [m/s] e $K = 1$ [m²/s]. Para ambos valores de H , as figuras da esquerda mostram que a máxima concentração ocorre na mesma posição $(0, 0, H)$ que a fonte, e que o contaminante é levado na direção do vento em forma de "pluma". Os gráficos da direita retratam a concentração no plano $z = 0$ e nos dizem que o pico de concentração ao nível do solo ocorre na origem quando $H = 0$ ou deslocado na direção do vento quando a fonte está elevada. Esse comportamento é esperado do ponto de vista físico e é uma validação qualitativa da pluma gaussiana.

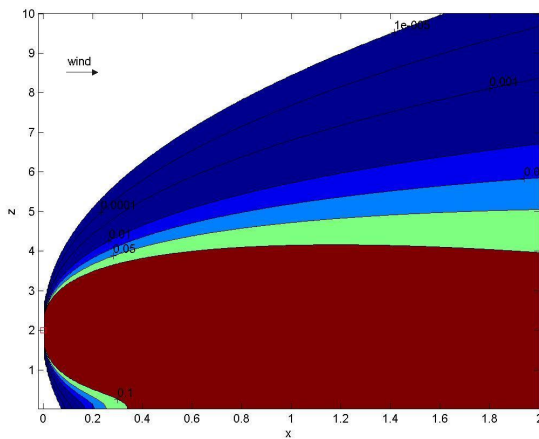


(a) Seção vertical ($y = 0$)

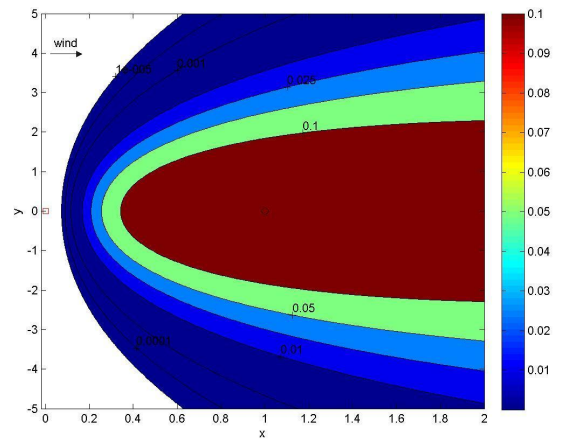


(b) Seção horizontal ($z = 0$)

Figura 1.1: Gráficos da concentração $C(x,y,z)$ da poluição emitida de uma fonte ao nível do solo ($H = 0$) com escala em x de 0 a 2: (esquerda) no plano vertical $y = 0$; (direita) no plano horizontal $z = 0$. O local da fonte de contaminante está indicado em vermelho.



(a) Seção vertical ($y = 0$)



(b) Seção horizontal ($z = 0$)

Figura 1.2: Gráficos da concentração $C(x,y,z)$ da poluição emitida de uma fonte a um nível elevado ($H = 2$) com escala em x de 0 a 2. O local do pico de concentração ao nível do solo está indicado em preto.

2 *Modelo 2: Sedimentação e absorção*

A partir do capítulo anterior, apresentaremos o modelo de dispersão atmosférica feito por Ermak em [4] que utiliza [1] para considerar a sedimentação e a absorção do poluente no solo. Resolveremos o modelo por transformadas de Laplace e funções de Green.

Para este modelo consideraremos as mesmas hipóteses simplificadoras do modelo do *Capítulo 1*, modificando apenas as hipóteses 2 e 7.

Em situações práticas foi observado que algumas partículas poluentes são mais densas que o ar e realizam um processo de separação de mistura conhecido como sedimentação, ou seja, essas partículas caem na superfície sedimentando-se a uma taxa bem definida chamada de velocidade de sedimentação, ω_{sed} [m/s] [4,18]. Para trabalhar com esse efeito adicionamos ao vetor da velocidade do vento uma componente vertical, $\vec{u} = (u, 0, -\omega_{sed})$ [4]. Portanto, analogamente, a partir da equação da continuidade, a equação de advecção e difusão fica da forma

$$u \frac{\partial C}{\partial x} - \omega_{sed} \frac{\partial C}{\partial z} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}.$$

Para complementar, [1] sugere que uma condição de fronteira de Neumann nula no nível do solo não é uma aproximação razoável. Em vez disso, uma parte das partículas que descem até o solo, na verdade, depositam-se no solo e são absorvidas. Então, consideramos que o fluxo vertical do contaminante na superfície é proporcional à concentração no nível do solo [1], e assim nossa nova condição de fronteira será escrita como

$$\left(K_z \frac{\partial C}{\partial z}(x, y, 0) + \omega_{sed} C(x, y, 0) \right) = \omega_{dep} C(x, y, 0),$$

em que ω_{dep} [m/s] é chamada de velocidade de deposição.

As demais condições de fronteira permanecem iguais.

A velocidade ω_{dep} depende de fatores tais como o tipo e tamanho da partícula poluente, rugosidade do terreno e do tipo de superfície do solo e das condições meteorológicas, enquanto que ω_{sed} pode ser determinado pela *Lei de Stokes*, isto é, $\omega_{sed} = 2\rho g R^2 / 9\mu$, em que ρ é a

densidade da partícula [kg/m^3], R é o raio da partícula [m], μ é a viscosidade dinâmica do ar [kg/ms] e g é a aceleração gravitacional [m/s^2] [4].

Portanto, o novo modelo é

$$u \frac{\partial C}{\partial x} - \omega_{sed} \frac{\partial C}{\partial z} = K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2},$$

$$C(0, y, z) = \frac{Q}{u} \delta(y) \delta(z - H),$$

$$C(\infty, y, z) = 0, C(x, \pm\infty, z) = 0, C(x, y, \infty) = 0,$$

$$\left(K_z \frac{\partial C}{\partial z}(x, y, 0) + \omega_{sed} C(x, y, 0) \right) = \omega_{dep} C(x, y, 0).$$

Para resolver este modelo, iniciamos fazendo as mesmas mudanças de variáveis, r_y e r_z , o que resulta na equação

$$K_y \frac{\partial c}{\partial r_y} + K_z \frac{\partial c}{\partial r_z} - \omega_{sed} \frac{\partial c}{\partial z} = K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2},$$

com condições de fronteira

$$c(0, 0, y, z) = \frac{Q}{u} \delta(y) \delta(z - H),$$

$$c(\infty, \infty, y, z) = 0, c(r_y, r_z, \pm\infty, z) = 0, c(r_y, r_z, y, \infty) = 0,$$

$$\left(K_z \frac{\partial c}{\partial z}(r_y, r_z, y, 0) + \omega_{sed} c(r_y, r_z, y, 0) \right) = \omega_{dep} c(r_y, r_z, y, 0).$$

Realizaremos a seguinte separação de variáveis

$$c(r_y, r_z, y, z) = \frac{Q}{u} a(r_y, y) b(r_z, z) \Theta(r_z, z)$$

em que

$$\Theta(r_z, z) = \exp\left(-\frac{\omega_{sed}(z - H)}{2K_z} - \frac{\omega_{sed}^2 r_z}{4K_z^2}\right),$$

escolhida de modo a eliminar o termo $-\omega_{sed} \frac{\partial c}{\partial z}$, assumindo que a dependência da solução em y e z possa ser separada dessa forma. Observando que

$$\frac{\partial \Theta}{\partial r_z} = -\frac{\omega_{sed}^2}{4K_z^2} \Theta, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial z} = -\frac{\omega_{sed}}{2K_z} \Theta,$$

e substituindo na EDP acima, temos

$$\left(K_y b \frac{\partial a}{\partial r_y} + K_z a \frac{\partial b}{\partial r_z} - K_z a b \frac{\omega_{sed}^2}{4K_z^2} \right) - \omega_{sed} \left(a \frac{\partial b}{\partial z} - a b \frac{\omega_{sed}}{2K_z} \right) = K_y b \frac{\partial^2 a}{\partial y^2}$$

$$+K_z \left(a \frac{\partial^2 b}{\partial z^2} + ab \frac{\omega_{sed}^2}{4K_z^2} - 2a \frac{\partial b}{\partial z} \frac{\omega_{sed}}{2K_z} \right),$$

após simplificar o fator Θ em cada termo. Note que podemos simplificar um grande número de termos, obtendo assim, como no capítulo anterior, duas equações de difusão de dimensão reduzida idênticas as do problema anterior,

$$\frac{\partial a}{\partial r_y} = \frac{\partial^2 a}{\partial y^2}, \quad \frac{\partial b}{\partial r_z} = \frac{\partial^2 b}{\partial z^2}.$$

E vale a mesma justificativa de a constante ser zero para a separação de variáveis.

Portanto,

$$a(r_y, y) = \frac{\exp(-y^2/4r_y)}{\sqrt{4\pi r_y}},$$

para $0 \leq r_y < \infty$ e $-\infty < y < \infty$, uma vez que houve mudanças apenas para a cordenada z , ou seja, a EDP e as condições de fronteira para $a(r_y, y)$ são idênticas as do modelo anterior.

Para a EDP e as condições que nos dão a solução $b(r_z, z)$, observamos que a única diferença está em que substituímos a condição de fronteira de Neumann do primeiro modelo por uma condição mista (devido à nova hipótese sobre o contaminante). Portanto, a partir da condição de contorno sugerida por [1], da nova separação de variáveis e observando que

$$\frac{\partial c}{\partial z}(r_y, r_z, y, 0) = \frac{Q}{u} a(r_y, y) \left[\frac{\partial b}{\partial z}(r_z, 0) \Theta(r_z, 0) + b(r_z, 0) \frac{\partial \Theta}{\partial z}(r_z, 0) \right],$$

concluimos que a nova condição de fronteira para o problema é $\frac{\partial b}{\partial z}(r_z, 0) = \omega b(r_z, 0)$, com

$$\omega = \frac{\left(\omega_{dep} - \frac{\omega_{sed}}{2} \right)}{K_z}.$$

Assim, devemos resolver o problema

$$\frac{\partial b}{\partial r_z} = \frac{\partial^2 b}{\partial z^2}, \quad 0 \leq r_z < \infty, \quad 0 \leq z < \infty$$

com condições de fronteira

$$b(0, z) = \delta(z - H), \quad b(\infty, z) = 0, \quad b(r_z, \infty) = 0, \quad \frac{\partial b}{\partial z}(r_z, 0) = \omega b(r_z, 0).$$

Encontraremos $b(r_z, z)$ pelo método das funções de Green. As propriedades e funções de Green utilizadas estão no *Apêndice, seção 3.3*.

Antes de calcularmos a solução simplificaremos o problema fazendo uma substituição de

variável da seguinte forma [17, pp. 210]

$$b(r_z, z) = -\exp(\omega z) \int_z^\infty \beta(r_z, \zeta) \exp(-\omega \zeta) d\zeta,$$

ou equivalentemente,

$$\beta(r_z, z) = \frac{\partial b}{\partial z}(r_z, z) - \omega b(r_z, z).$$

Podemos verificar isso observando que a expressão de $b(r_z, z)$ é solução de $\beta(r_z, z) = \frac{\partial b}{\partial z}(r_z, z) - \omega b(r_z, z)$.

Utilizando a expressão para β acima, concluímos que

$$-\omega \left(\frac{\partial b}{\partial r_z} - \frac{\partial^2 b}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial b}{\partial r_z} - \frac{\partial^2 b}{\partial z^2} \right) = 0,$$

e portanto, $\beta(r_z, z)$ satisfaz

$$\frac{\partial \beta}{\partial r_z} = \frac{\partial^2 \beta}{\partial z^2}, \quad 0 \leq r_z < \infty, \quad 0 \leq z < \infty$$

com as seguintes condições de fronteira

$$\beta(0, z) = \omega \delta(z - H) - \delta'(z - H), \quad \beta(r_z, \infty) = 0, \quad \beta(\infty, z) = 0, \quad \beta(r_z, 0) = 0.$$

A função de Green para β encontrada pelo método de imagem é

$$G_\beta(r_z, z; 0, \zeta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r_z}} \left[\exp(-(z - \zeta)^2/4r_z) - \exp(-(z + \zeta)^2/4r_z) \right],$$

com G_β no sentido de distribuições. Como podemos expressar a solução $\beta(r_z, z)$ através da função de Green e da condição de contorno [17, pp. 210], temos

$$\begin{aligned} \beta(r_z, z) &= \int_0^\infty G_\beta(r_z, z; 0, \zeta) \beta(0, \zeta) d\zeta \\ &= \int_0^\infty G_\beta(r_z, z; 0, \zeta) [\omega \delta(\zeta - H) - \delta'(\zeta - H)] d\zeta, \end{aligned}$$

usando integração por partes, obtemos

$$\beta(r_z, z) = \int_0^\infty \left[\omega G_\beta(r_z, z; 0, \zeta) + \frac{\partial G_\beta}{\partial \zeta}(r_z, z; 0, \zeta) \right] \delta(\zeta - H) d\zeta,$$

o que podemos integrar explicitamente, e obter assim

$$\beta(r_z, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r_z}} \left[\left(\frac{z - H}{2r_z} + \omega \right) \exp(-(z - H)^2/4r_z) + \left(\frac{z + H}{2r_z} - \omega \right) \exp(-(z + H)^2/4r_z) \right].$$

Com isso, encontraremos $b(r_z, z)$ substituindo β na expressão de b ,

$$b(r_z, z) = \frac{\exp(\omega z)}{\sqrt{4\pi r_z}} \int_z^\infty \left[\left(\frac{\zeta - H}{2r_z} + \omega \right) \exp\left(\frac{-(\zeta - H)^2}{4r_z} - \omega \zeta\right) + \left(\frac{\zeta + H}{2r_z} - \omega \right) \exp\left(\frac{-(\zeta + H)^2}{4r_z} - \omega \zeta\right) \right] d\zeta.$$

Observando essa integral percebemos que podemos integrar o primeiro termo com exatidão enquanto que para o segundo termo adicionamos e subtraímos 2ω para integrarmos.

Portanto,

$$b(r_z, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r_z}} \left[\exp(-(z - H)^2/4r_z) + \exp(-(z + H)^2/4r_z) \right] - 2\omega \exp(\omega z) \int_z^\infty \frac{\exp(-(\zeta + H)^2/4r_z)}{\sqrt{4\pi r_z}} \exp(-\omega \zeta) d\zeta.$$

Reescrevendo a equação dentro da integral, ficamos com

$$b(r_z, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r_z}} \left[\exp(-(z - H)^2/4r_z) + \exp(-(z + H)^2/4r_z) \right] - \omega \frac{\exp(\omega z)}{\sqrt{\pi r_z}} \int_z^\infty \exp\left(\frac{-(\zeta + H + 2\omega r_z)^2}{4r_z} + \omega H + \omega^2 r_z\right) d\zeta.$$

Logo,

$$b(r_z, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r_z}} \left[\exp(-(z - H)^2/4r_z) + \exp(-(z + H)^2/4r_z) \right] - \omega \exp(\omega(z + H) + \omega^2 r_z) \operatorname{erfc}\left(\frac{z + H}{2\sqrt{r_z}} + \omega\sqrt{r_z}\right),$$

em que $\operatorname{erfc}(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_t^\infty \exp(-u^2) du$ é a função complementar do erro.

Para expressarmos a solução $c(r_y, r_z, y, z)$ deste modelo basta substituirmos $a(r_y, y)$, $b(r_z, z)$, $\Theta(r_z, z)$ e ω na fórmula da separação de variáveis utilizada. Então a solução fica

$$c(r_y, r_z, y, z) = \frac{Q}{4\pi u \sqrt{r_y r_z}} \exp(-y^2/4r_y) \exp\left(-\frac{\omega_{sed}(z - H)}{2K_z} - \frac{\omega_{sed}^2 r_z}{4K_z^2}\right) \times \left[\exp(-(z - H)^2/4r_z) + \exp(-(z + H)^2/4r_z) - \frac{2\omega_0 \sqrt{\pi r_z}}{K_z} \exp\left(\frac{\omega_0(z + H)}{K_z} + \frac{\omega_0^2 r_z}{K_z^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z + H}{2\sqrt{r_z}} + \frac{\omega_0 \sqrt{r_z}}{K_z}\right) \right],$$

em que $\omega_0 := \omega_{dep} - \frac{\omega_{sed}}{2}$. Essa solução é uma generalização da pluma gaussiana que claramente se reduz àquela se tivermos $\omega_{dep} = \omega_{sed} = 0$.

Dessa forma, pode-se aplicar a solução a diferentes tipos de fenômenos de deposição os quais podemos separar em classes:

$\omega_{sed} = \omega_{dep} = 0$. O caso trivial é aplicável a gases ou partículas pequenas (geralmente $\lesssim 0.1\mu m/dia.$) sob condições em que deposição pode ser negligenciada.

$\omega_{sed} = 0, \omega_{dep} > 0$. Este caso é aplicável a gases ou partículas pequenas em que o efeito de sedimentação gravitacional pode ser negligenciado. No entanto, a absorção ocorre, devido à vegetação ou ao solo, por exemplo.

$\omega_{sed} = \omega_{dep} > 0$. Neste caso a deposição é devida somente à sedimentação gravitacional. Este comportamento é típico de partículas grandes ($\gtrsim 50\mu m/dia.$).

$\omega_{dep} > \omega_{sed} > 0$. Aqui a deposição não é devida somente à sedimentação gravitacional. Deve-se, também, geralmente à rugosidade da superfície. Essa classe é aplicável a partículas de tamanho intermediário ($\approx 0.1 - 50\mu m/dia.$).

$\omega_{sed} > \omega_{dep} \geq 0$. Quando a velocidade de deposição é menor que a velocidade de sedimentação, as partículas depositadas são retornadas à atmosfera, como em uma tempestade de areia.

Se o coeficiente de difusão for isotrópico, a solução é calculada de maneira análoga e expressa por

$$c(r, y, z) = \frac{Q}{4\pi ur} \exp(-y^2/4r) \exp\left(-\frac{\omega_{sed}(z-H)}{2K} - \frac{\omega_{sed}^2 r}{4K^2}\right) \times \left[\exp(-(z-H)^2/4r) + \exp(-(z+H)^2/4r) - \frac{2\omega_0\sqrt{\pi r}}{K} \exp\left(\frac{\omega_0(z+H)}{K} + \frac{\omega_0^2 r}{K^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z+H}{2\sqrt{r}} + \frac{\omega_0\sqrt{r}}{K}\right) \right].$$

De modo similar, conseguimos expressar facilmente em termos de (x, y, z) se o coeficiente de difusão for isotrópico e igual a uma constante,

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{4\pi Kx} \exp(-y^2u/4Kx) \exp\left(-\frac{\omega_{sed}(z-H)}{2K} - \frac{\omega_{sed}^2 x}{4Ku}\right) \times \left[\exp(-(z-H)^2u/4Kx) + \exp(-(z+H)^2u/4Kx) - \frac{2\omega_0\sqrt{\pi x}}{\sqrt{Ku}} \exp\left(\frac{\omega_0(z+H)}{K} + \frac{\omega_0^2 x}{Ku}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{(z+H)\sqrt{u}}{2\sqrt{Kx}} + \frac{\omega_0\sqrt{x}}{\sqrt{Ku}}\right) \right].$$

Para ilustrar a solução $c(r_y, r_z, y, z)$, vamos considerar uma fonte pontual emissora ao nível do solo, $H = 0$ [m] e outra, acima $H = 2$ [m], $Q = 4$ [kg/s] e velocidade do vento $u = 1$ [m/s]. Para a velocidade de deposição, consideraremos $\omega_{dep} = 0,0062$ [m/s] e para a velocidade de sedimentação, $\omega_{sed} = 2\rho gR^2/9\mu$ [m/s], com $\rho = 7140$ [kg/m³], $g = 9,8$ [m/s²], $R = 0,45 \times 10^{-6}$ [m] e $\mu = 1,8 \times 10^{-5}$ [kg/ms]. Para os coeficientes de difusão turbulenta K_y e K_z , consideraremos $K_y = 0,5uax^b$ [m²/s] com $a = 0,34$ e $b = 0,82$, e $K_z = 0,5ucx^d$ [m²/s] com $c = 0,275$ e $d = 0,82$. Alguns destes dados foram retirados de [18] e se referem à emissão de zinco na atmosfera, além disso, os resultados abaixo servem de validação qualitativa do modelo.

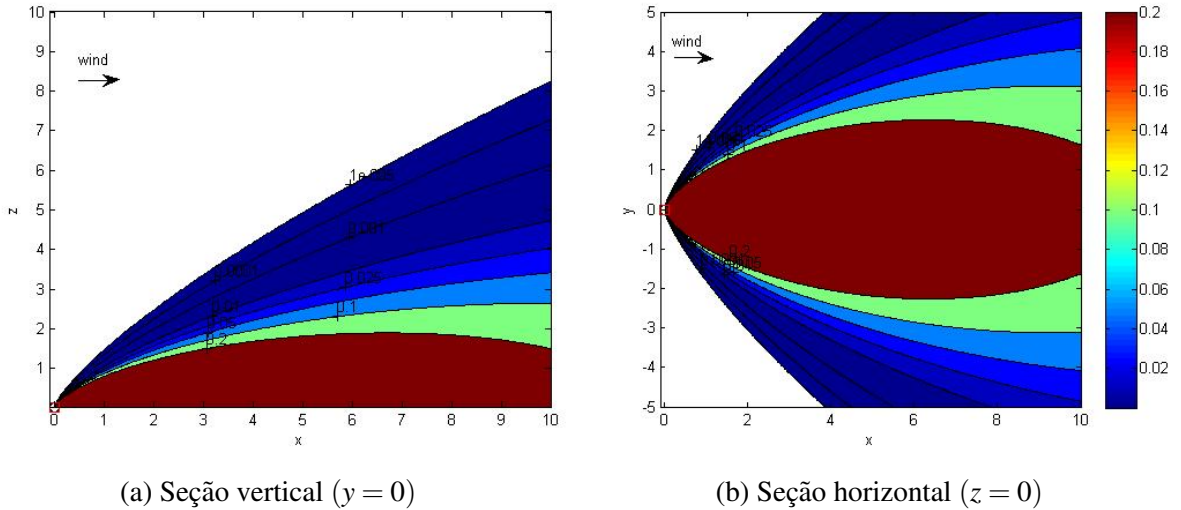


Figura 2.1: Gráficos da concentração $c(r_y, r_z, y, z)$ da poluição emitida de uma fonte ao nível do solo ($H = 0$) com escala em x de 0 a 10: (esquerda) no plano vertical $y = 0$; (direita) no plano horizontal $z = 0$. O local da fonte está indicado em vermelho.

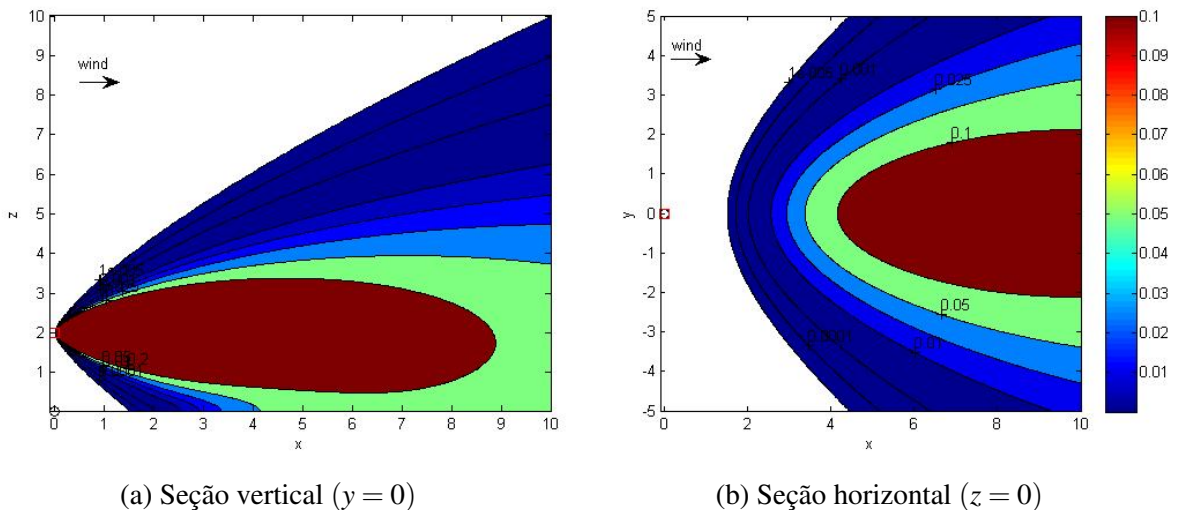


Figura 2.2: Gráficos da concentração $c(r_y, r_z, y, z)$ da poluição emitida de uma fonte a um nível elevado ($H = 2$) com escala em x de 0 a 10: (esquerda) no plano vertical $y = 0$; (direita) no plano horizontal $z = 0$. O local da fonte está indicado em vermelho.

Considerações Finais

Apresentamos e calculamos a solução de dois modelos de equações diferenciais parciais parabólicas cujas representações físicas são de importância em nosso mundo atual. Os dois modelos, em linhas gerais, são obtidos através da equação da continuidade e descrevem a concentração de partículas atmosféricas emitidas a uma taxa constante de uma fonte pontual a uma determinada altura, e sob vento constante unidirecional que sopra para uma região infinita, após um tempo considerável. No primeiro modelo não consideramos mecanismos de remoção enquanto que no segundo modelo consideramos o processo natural da deposição.

Para calcularmos as soluções destes problemas, utilizamos as técnicas das transformadas de Laplace e das funções de Green, além de técnicas de EDP, separação e substituição de variáveis. Com isso, o objetivo de estudar alguns dos métodos de resolução de equações diferenciais foi alcançado.

Todavia, dificuldades surgiram, de início pensávamos em resolver as EDPs apenas pelas transformadas de Laplace (para não trabalharmos com o termo da distribuição delta de Dirac), entretanto, após algumas pesquisas, o método das funções de Green (as quais foram calculadas com as transformadas de Laplace) apareceu para facilitar a resolução do *Modelo 2*, de um modo muito mais rápido e simples que o sugerido por [3, pp. 358-359].

E então, veio à tona, além de motivação para estudos futuros, a necessidade de estudar a teoria de distribuições e com mais profundidade a teoria de EDP (para, por exemplo, demonstrarmos que estes problemas de EDP, são de fato, bem postos) uma vez que estas soluções foram obtidas de modo formal.

3 Apêndice

Nesta parte do trabalho, apresentaremos de modo formal alguns dos resultados utilizados.

3.1 A distribuição delta de Dirac e a solução fundamental da equação de difusão

Para trabalharmos com a distribuição delta de Dirac utilizaremos a *função Heaviside* que pode ser dada por $H(x - x_0) = \begin{cases} 0, & x < x_0, \\ 1, & x > x_0. \end{cases}$ Além dessa função, necessitamos, também, da *função impulso* de altura $1/\varepsilon$ entre x_0 e $x_0 + \varepsilon$ dada através da função Heaviside por $\delta_\varepsilon(x - x_0) = \frac{1}{\varepsilon} [H(x - x_0) - H(x - (x_0 + \varepsilon))]$.

Assim, de modo formal a *distribuição Delta de Dirac* é dada por $\delta(x - x_0) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_\varepsilon(x - x_0)$. Note que $\delta(x - x_0)$ não é uma função no sentido usual, esta "função" vale zero em todo ponto exceto em x_0 onde a "função é infinita", no sentido de que a área do gráfico desta "função" vale 1, isto é, $\int_a^b \delta(x - x_0) dx = 1$, em que (a, b) é qualquer intervalo contendo x_0 (podendo ter $a = -\infty$ e/ou $b = \infty$). Essa "função" é conhecida como pertencente a um conjunto mais amplo que o das funções, $\delta(\cdot)$ pertence a classe das funções generalizadas, da teoria das distribuições.

Note que $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0)$, pois $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\varepsilon(x - x_0) f(x) dx$

$$= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{x_0} 0 \cdot f(x) dx + \int_{x_0}^{x_0 + \varepsilon} \frac{1}{\varepsilon} f(x) dx + \int_{x_0 + \varepsilon}^{\infty} 0 \cdot f(x) dx \right].$$

Assim, pelo Teorema do Valor Médio para integrais, podemos escrever para $0 < \theta < 1$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} f(x_0 + \theta \varepsilon) \varepsilon = f(x_0),$$

na verdade, este resultado vale para qualquer intervalo (a, b) contendo x_0 .

Também, observe que $\delta(x - x_0) = \frac{dH(x - x_0)}{dx}$, pois

$$\frac{dH(x - x_0)}{dx} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{H(x - x_0) - H(x - (x_0 - \varepsilon))}{\varepsilon} = \delta(x - x_0).$$

Dizemos que a *solução fundamental casual* $C(x, t)$ é a solução de $\frac{\partial C}{\partial t} - a\nabla^2 C = \delta(x)\delta(t)$ e que é identicamente nula para $t < 0$. Com $x = (x_1, \dots, x_n)$ em \mathbb{R}^n e $t \in \mathbb{R}$, a uma constante positiva (chamada de *constante de difusividade*) e com ∇^2 agindo apenas sobre x , ou seja, $\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2}$.

Assim, a solução fundamental casual coincide com a solução de $\frac{\partial u}{\partial t} - a\nabla^2 u = 0$, para $t > 0$ com condição inicial $u(x, 0) = \delta(x)$.

Porque se $u(x, t)$ é a solução da equação de $\frac{\partial u}{\partial t} - a\nabla^2 u = 0$ para $t > 0$ e $C(x, t)$ dada por $C(x, t) = \begin{cases} u(x, t), & t > 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases}$ Como $C(x, t)$ é identicamente nula para $t < 0$, podemos escrever $C(x, t) = H(t)u(x, t)$, em que $H(t)$ é a função Heaviside. Então,

$$\nabla^2 C = H(t)\nabla^2 u,$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = H(t)\frac{\partial u}{\partial t} + u(x, t)\frac{dH}{dt}(t) = H(t)\frac{\partial u}{\partial t} + u(x, 0)\delta(t).$$

Logo, $\frac{\partial C}{\partial t} - a\nabla^2 C = u(x, 0)\delta(t) = \delta(x)\delta(t)$.

Para o caso de uma dimensão e $a = 1$, temos que a solução fundamental casual já foi calculada no *Capítulo 1* (em outra notação e com $a = 1$) por transformadas de Laplace, nesta notação podemos escrever

$$C(x, t) = \frac{\exp(-x^2/4t)}{\sqrt{4\pi t}}, \quad t > 0,$$

(é claro que $C(x, t) \equiv 0$ para $t < 0$). Para $t > 0$, $C(x, t)$ tem derivadas contínuas e satisfaz a equação. Se $t \rightarrow 0$, $C(x, t)$ tende a $\delta(x)$ no sentido de distribuições [17, pp. 60].

3.2 Transformadas de Laplace

Seja $F(t)$ uma função para $t > 0$. Então, a *transformada de Laplace* de $F(t)$, denotada por $\mathcal{L}\{F(t)\}$, é dada por $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s) = \int_0^\infty \exp(-st)F(t)dt$, em que o parâmetro s é real. A transformada de Laplace de $F(t)$ é dita existir se a integral acima converge para algum s , caso contrário, não existe. Além disso, uma função é dita ser *seccionalmente contínua* ou *contínua*

por partes em um intervalo $\alpha \leq t \leq \beta$ se o intervalo pode ser subdividido em um número finito de subintervalos em que a função é contínua em cada um desses subintervalos e têm limites laterais finitos. Também, se constantes reais $M > 0$ e γ existem tais que se para todo t suficientemente grande, então $|F(t)| < M \exp(\gamma t)$, dizemos que $F(t)$ é uma *função de ordem exponencial* γ (ou mais brevemente, *de ordem exponencial*).

Teorema 3.1. *Se $F(t)$ é seccionalmente contínua em todo intervalo finito $0 \leq t \leq N$ e de ordem exponencial γ para $t > N$, então a transformada de Laplace $f(s)$ existe para todo $s > \gamma$.*

Demonstração. A demonstração está em [16]. □

A menos que esteja explícito, consideraremos que todas as funções satisfazem o teorema anterior.

Se $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ enquanto que $F_1(t)$ e $F_2(t)$ são funções cujas transformadas de Laplace são $f_1(s)$ e $f_2(s)$, respectivamente, então temos que $\mathcal{L}\{c_1 F_1(t) + c_2 F_2(t)\} = c_1 f_1(s) + c_2 f_2(s)$. Pois observe que $\mathcal{L}\{c_1 F_1(t) + c_2 F_2(t)\} = \int_0^\infty \exp(-st) (c_1 F_1(t) + c_2 F_2(t)) dt$

$$= c_1 \int_0^\infty \exp(-st) F_1(t) dt + c_2 \int_0^\infty \exp(-st) F_2(t) dt = c_1 \mathcal{L}\{F_1(t)\} + c_2 \mathcal{L}\{F_2(t)\} = c_1 f_1(s) + c_2 f_2(s).$$

Se $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$ e $a \in \mathbb{R}$, então $\mathcal{L}\{\exp(at)F(t)\} = f(s - a)$. Para isso, basta notar que $\mathcal{L}\{\exp(at)F(t)\} = \int_0^\infty \exp(-st) \exp(at) F(t) dt$

$$= \int_0^\infty \exp(-(s-a)t) F(t) dt = f(s-a).$$

Se $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$, então $\mathcal{L}\{F'(t)\} = sf(s) - F(0)$, se $F(t)$ for contínua em $0 \leq t \leq N$ e de ordem exponencial para $t > N$ enquanto que $F'(t)$ é seccionalmente contínua para $0 \leq t \leq N$. Pois note que $\mathcal{L}\{F'(t)\} = \int_0^\infty \exp(-st) F'(t) dt = \lim_{P \rightarrow \infty} \int_0^P \exp(-st) F'(t) dt$

$$= \lim_{P \rightarrow \infty} \{\exp(-sP)F(P) - F(0) + s \int_0^P \exp(-st) F(t) dt\} = sf(s) - F(0),$$

utilizando o fato de que se $F(t)$ é de ordem exponencial γ se t tende ao infinito, então temos que $\lim_{P \rightarrow \infty} \exp(-sP)F(P) = 0$, para $s > \gamma$.

Se $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$, então $\mathcal{L}\{F''(t)\} = s^2 f(s) - sF(0) - F'(0)$, se $F(t)$ e $F'(t)$ forem contínuas em $0 \leq t \leq N$ e de ordem exponencial para $t > N$ enquanto que $F''(t)$ é seccionalmente contínua para $0 \leq t \leq N$. Para isso, basta ver que $\mathcal{L}\{F''(t)\} = s \mathcal{L}\{F'(t)\} - F'(0) = s[s \mathcal{L}\{F(t)\} - F(0)] - F'(0)$

$$= s^2 \mathcal{L}\{F(t)\} - sF(0) - F'(0) = s^2 f(s) - sF(0) - F'(0).$$

Se $N(t)$ é uma função de t tal que para todo $t > 0$, temos que $\int_0^t N(u)du = 0$, então chamamos $N(t)$ de *função nula*.

Se $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$, isto é, $f(s)$ é a transformada de Laplace de uma função $F(t)$, então $F(t)$ é dita ser a *transformada inversa de Laplace* de $f(s)$ e denotamos, simbolicamente, por $F(t) = \mathcal{L}^{-1}\{f(s)\}$.

Se $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$, então $\mathcal{L}\{F(t) + N(t)\} = f(s)$, pois a transformada de Laplace de uma função nula $N(t)$ é zero. Com isso temos duas funções diferentes para a mesma transformada de Laplace.

Teorema 3.2. *Se nos restringirmos as funções $F(t)$ que são seccionalmente contínuas em todo intervalo finito $0 \leq t \leq N$ e de ordem exponencial para $t > N$, então a transformada inversa de Laplace de $f(s)$, isto é, $\mathcal{L}^{-1}\{f(s)\} = F(t)$ é única. Este resultado é conhecido por Teorema de Lerch.*

Demonstração. A demonstração está em [16]. □

Se $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ enquanto que $f_1(s)$ e $f_2(s)$ são as transformadas de Laplace de $F_1(t)$ e $F_2(t)$, respectivamente, então $\mathcal{L}^{-1}\{c_1 f_1(s) + c_2 f_2(s)\} = c_1 F_1(t) + c_2 F_2(t)$. Porque como $\mathcal{L}\{c_1 F_1(t) + c_2 F_2(t)\} = c_1 f_1(s) + c_2 f_2(s)$, então, temos que $\mathcal{L}^{-1}\{c_1 f_1(s) + c_2 f_2(s)\} = c_1 F_1(t) + c_2 F_2(t)$.

Se $\mathcal{L}^{-1}\{f(s)\} = F(t)$, então $\mathcal{L}^{-1}\{f(s-a)\} = \exp(at)F(t)$. Pois como $f(s) = \int_0^\infty \exp(-st)F(t)dt$, temos

$$f(s-a) = \int_0^\infty \exp(-(s-a)t)F(t)dt = \int_0^\infty \exp(-st) (\exp(at)F(t)) dt = \mathcal{L}\{\exp(at)F(t)\}.$$

Então, $\mathcal{L}^{-1}\{f(s-a)\} = \exp(at)F(t)$.

Teorema 3.3. *Se $f(s) = \mathcal{L}\{F(t)\}$, então a transformada inversa de Laplace, $\mathcal{L}^{-1}\{f(s)\}$, é dada por $F(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \exp(st)f(s)ds, t > 0$, e $F(t) = 0$ para $t < 0$. Este resultado é chamado de fórmula de inversão complexa. A integração é feita ao longo da reta $s = \gamma$ no plano complexo em que $s = x + iy$ (note que agora consideramos o parâmetro s sendo complexo). O número real γ é escolhido tal que $s = \gamma$ permaneça ao lado direito de todas as singularidades (pólos ou singularidades essenciais).*

Demonstração. A demonstração está em [16]. □

Seja Γ uma curva no plano complexo composta pela linha FA , os arcos AB e EF do círculo de raio R com centro na origem O , o arco CD do círculo de raio ε com centro na origem O e os segmentos BC e DE .

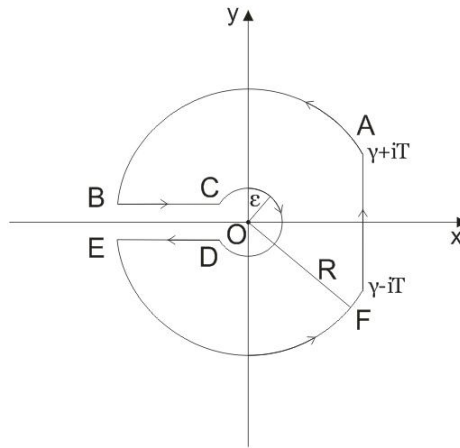


Figura 3.1: Curva Γ no plano complexo.

Teorema 3.4. *Seja Γ a curva como na figura 3.1. Se pudermos encontrar $M, k \in \mathbb{R}$ com $M, k > 0$ tais que em Γ (com $s = R \exp(i\theta)$), $|f(s)| < \frac{M}{R^k}$, então $\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma} \exp(st) f(s) ds = 0$.*

Demonstração. A demonstração está em [16]. □

Transformadas de Laplace

Nesta parte apresentaremos o cálculo das transformadas de Laplace utilizadas.

- $\mathcal{L}\{\exp(at)\} = \frac{1}{s-a}, s > a.$

$$\mathcal{L}\{\exp(at)\} = \int_0^{\infty} \exp(-st) \exp(at) dt = \lim_{P \rightarrow \infty} \frac{\exp(-(s-a)t)}{-(s-a)} \Big|_0^P = \frac{1}{s-a}, s > a.$$

- $\mathcal{L}\{\sinh(at)\} = \frac{a}{s^2 - a^2}, s > |a|.$

$$\mathcal{L}\{\sinh(at)\} = \int_0^{\infty} \exp(-st) \left(\frac{\exp(at) - \exp(-at)}{2} \right) dt$$

$$= \frac{1}{2} \mathcal{L}\{\exp(at)\} - \frac{1}{2} \mathcal{L}\{\exp(-at)\} = \frac{a}{s^2 - a^2}, s > |a|.$$

Com isso, $\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{a}{s^2 - a^2} \right\} = \sinh(at).$

- $\mathcal{L}\{\cosh(at)\} = \frac{s}{s^2 - a^2}, s > |a|.$

$$\mathcal{L}\{\cosh(at)\} = \int_0^{\infty} \exp(-st) \left(\frac{\exp(at) + \exp(-at)}{2} \right) dt$$

$$= \frac{1}{2} \mathfrak{L}\{\exp(at)\} + \frac{1}{2} \mathfrak{L}\{\exp(at)\} = \frac{s}{s^2 - a^2}, \quad s > |a|.$$

Com isso, $\mathfrak{L}^{-1}\left\{\frac{s}{s^2 - a^2}\right\} = \cosh(at)$.

- $\mathfrak{L}\{\delta(t)\} = 1$.

$$\mathfrak{L}\{\delta(t)\} = \int_0^{\infty} \exp(-st)\delta(t)dt = \exp(0) = 1.$$

- $\mathfrak{L}\{\delta(t-a)\} = \exp(-as)$.

$$\mathfrak{L}\{\delta(t-a)\} = \int_0^{\infty} \exp(-st)\delta(t-a)dt = \exp(-sa).$$

- $\mathfrak{L}^{-1}\left\{\frac{1}{\sqrt{s}} \exp(-a\sqrt{s})\right\}$. Considere a função complexa $g(\sigma) = \sigma^{-1/2} \exp(-a\sigma^{1/2})$. Considere, também, o ramo de $\sigma^{1/2}$ tal que este é positivo na parte positiva do eixo real e tiramos a parte negativa do eixo real, também, considere $-\pi < \arg(\sigma) < \pi$. Com isso, $g(\sigma)$ é analítica para $Re(\sigma) > 0$. Pela fórmula complexa, temos que

$$\mathfrak{L}^{-1}\{g(\sigma)\} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma, \quad t > 0.$$

Aplicando o *Teorema de Cauchy* na integral de $\exp(\sigma t)g(\sigma)$ sobre a curva Γ , temos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma &= \frac{1}{2\pi i} \left[\int_{AF} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma + \int_{AB} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma \right. \\ &+ \int_{BC} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma + \int_{CD} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma + \int_{DE} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma \\ &\left. + \int_{EF} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma \right] = 0. \end{aligned}$$

Vamos avaliar, cada uma das integrais, fazendo $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$\int_{CD} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma = \int_{-\pi}^{\pi} \exp(\varepsilon \exp(i\theta t) - \sqrt{\varepsilon} \exp(ia\theta/2)) \sqrt{\varepsilon} \exp(i\theta/2) d\theta = 0.$$

Como $Re(\sigma) > 0$, temos $Re(\sigma^{1/2}) \geq 0$ (em $-\pi < \arg(\sigma) < \pi$). Além disso, também temos $|g(\sigma)| = \left| \sigma^{-1/2} \exp(-a\sigma^{1/2}) \right| \leq |\sigma|^{-1/2}$. Então, no semi-círculo $|\sigma - \gamma| = R$, temos $|g(\sigma)| \leq |R - \gamma|^{-1/2}$, para $Re(\sigma) \leq \gamma$. Portanto, fazendo $R \rightarrow \infty$, as integrais sobre AB e EF tendem a zero, pelo *teorema 3.13*. Resta avaliar as integrais sobre BC e DE , sobre BC , fazendo $\sigma = \omega \exp(\pi i)$, obtemos a igualdade

$$\int_{BC} \exp(\sigma t)g(\sigma)d\sigma = \int_{\varepsilon}^{R-\gamma} \frac{\exp(-\omega t - i\sqrt{\omega}a)}{i\sqrt{\omega}} d\omega,$$

pois $\gamma - R < \sigma < -\varepsilon$. Em DE , com $\sigma = \omega \exp(-\pi i)$, temos

$$\int_{DE} \exp(\sigma t) g(\sigma) d\sigma = \int_{\varepsilon}^{R-\gamma} \frac{\exp(-\omega t + i\sqrt{\omega}a)}{i\sqrt{\omega}} d\omega,$$

pois $-\varepsilon < \sigma < \gamma - R$. Com isso, podemos fazer

$$\begin{aligned} \mathfrak{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{\sqrt{s}} \exp(-a\sqrt{s}) \right\} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \exp(\sigma t) g(\sigma) d\sigma \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \left\{ \oint_{\Gamma} \exp(\sigma t) g(\sigma) d\sigma - \int_{BC} \exp(\sigma t) g(\sigma) d\sigma - \int_{DE} \exp(\sigma t) g(\sigma) d\sigma \right\}, \end{aligned}$$

fazendo $\varepsilon \rightarrow 0$, temos

$$\mathfrak{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{\sqrt{s}} \exp(-a\sqrt{s}) \right\} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \exp(-\mu^2 t) \cos(\mu a) d\mu.$$

Como a transformada de Fourier de $\exp(-\mu^2 t)$ é $\sqrt{\frac{\pi}{t}} \exp(-a^2/4t)$, para $t > 0$ e para $a \in \mathbb{R}$, isto é, $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2 t) \exp(i\mu a) d\mu = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \exp(-a^2/4t)$ [9, pp. 165], podemos simplificar a transformada inversa de Laplace,

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \exp(-\mu^2 t) \cos(\mu a) d\mu &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2 t) \cos(\mu a) d\mu \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2 t) \cos(\mu a) d\mu + \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2 t) \sin(\mu a) d\mu \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2 t) (\cos(\mu a) + i \sin(\mu a)) d\mu = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\mu^2 t) \exp(i\mu a) d\mu \\ &= \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\pi}{t}} \exp(-a^2/4t) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp(-a^2/4t), \end{aligned}$$

a primeira igualdade porque o integrando é uma função par, a segunda igualdade pelo fato de a segunda integral do lado direito ser uma função ímpar e integramos sobre um domínio simétrico, e a penúltima igualdade pela transformada de Fourier. Logo,

$$\mathfrak{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{\sqrt{s}} \exp(-a\sqrt{s}) \right\} = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp(-a^2/4t).$$

3.3 Funções de Green

A função $g(x, t | x_0, t_0)$ que satisfaz o problema de valor na fronteira

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) g(x, t | x_0, t_0) = \delta(x - x_0) \delta(t - t_0), \quad -\infty < x, x_0 < \infty, \quad -\infty < t, t_0 < \infty,$$

$$g(x, t | x_0, t_0) \equiv 0, \quad t < t_0, \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} g(x, t | x_0, t_0) = 0,$$

é dita ser a *função casual de Green* para o caso unidimensional.

Para $t > t_0$, g pode ser caracterizada como a solução do problema de valor inicial da equação de difusão homogênea

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) g(x, t | x_0, t_0) = 0, \quad -\infty < x, x_0 < \infty, \quad 0 < t, t_0 < \infty,$$

$$g(x, t_0 | x_0, t_0) = \delta(x - x_0), \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} g(x, t | x_0, t_0) = 0.$$

Utilizando a substituição de variável $t' = t - t_0$ no problema de valor de fronteira da definição anterior, temos que $g(x, t' | x_0, t_0) = g(x, t - t_0 | x_0, 0)$, então podemos introduzir o termo fonte para $t = 0$ (e não mais para t_0 arbitrário) no problema de valor inicial acima. Como a região é toda a reta real, então g é a solução fundamental casual $C(x, t)$ em \mathbb{R} . Então,

$$g(x, t | x_0, t_0) = C(x, t | x_0, t_0) = \frac{H(t - t_0)}{\sqrt{4\pi(t - t_0)}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4(t - t_0)}\right).$$

Note que ao encontrarmos a solução $a(r_y, y)$ no *Capítulo 1*, calculamos a função de Green para o problema com $t_0 = 0$ e $x_0 = 0$.

Consideraremos agora o caso em que $0 \leq x < \infty$. Então, $g(x, t | x_0, 0)$ satisfaz

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) g(x, t | x_0, 0) = \delta(x - x_0)\delta(t), \quad 0 \leq x, x_0 < \infty, \quad -\infty < t < \infty,$$

$$g(x, t | x_0, 0) \equiv 0, \quad t < 0,$$

$$g(0, t | x_0, 0) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} g(x, t | x_0, 0) = 0.$$

Para resolvê-lo, vamos substituir este problema por um em que $-\infty < x < \infty$ com fonte positiva em $(x_0, 0)$ e fonte negativa em $(-x_0, 0)$. Então, $g(x, t | x_0, 0) = C(x, t | x_0, 0) - C(x, t | -x_0, 0)$. Portanto,

$$g(x, t | x_0, 0) = \frac{H(t)}{\sqrt{4\pi t}} \left[\exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4t}\right) - \exp\left(-\frac{(x + x_0)^2}{4t}\right) \right].$$

A função g acima satisfaz a equação diferencial pois a fonte imagem em $(-x_0, 0)$ não pertence ao domínio original e $g = 0$ se $x = 0$, e portanto, é a solução do problema. O método utilizado para encontrar g é chamado de *método de imagem*. Esta função de Green é a função de Green da função β no *Capítulo 2*.

Com o método acima podemos calcular a solução fundamental casual para $0 \leq x < \infty$

quando tivermos $\frac{\partial g}{\partial x}(0, t|x_0, t_0) = 0$. Então, a solução de

$$\frac{\partial g}{\partial t} - \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = \delta(x - x_0)\delta(t), \quad 0 \leq x, x_0 < \infty, \quad -\infty < t < \infty,$$

$$g(x, t|x_0, 0) = 0, \quad t < 0,$$

$$\frac{\partial g}{\partial x}(0, t|x_0, t_0) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} g(x, t|x_0, t_0) = 0$$

é encontrada colocando a fonte imagem em $(-x_0, 0)$, mas uma fonte positiva para satisfazer a nova condição de fronteira. Portanto, g é da forma

$$g(x, t|x_0, 0) = \frac{H(t)}{\sqrt{4\pi(t)}} [\exp(-(x - x_0)^2/4(t)) + \exp(-(x + x_0)^2/4(t))], \quad 0 \leq x, x_0 < \infty.$$

Observe que ao calcularmos a solução $b(r_z, z)$ no *Capítulo 1*, encontramos a função de Green para o problema.

Referências Bibliográficas

- [1] CALDER, K. L. – *Atmospheric diffusion of particulate material, considered as boundary value problem*. J. Meteor. Vol. 18, pp. 413-416, 1961.
- [2] CARPENTER, S. B., MONTGOMERY, T. L., LEAVITT, J. M., COLBOUGH, W. D. e THOMAS, F. W. – *Principal plume dispersion models: TVA power plants*. J. Air Pollut. Control Ass., Vol. 21, No. 8, pp. 491-495, 1971.
- [3] CARSLAW, H. S. e JAEGER, J. C. – *Conduction of Heat in Solids 2nd Edn*. Oxford Univ. Press., pp. 358-359, 1959.
- [4] ERMAK, D. L. – *An analytical model for air pollutant transport and deposition from a point source*. Atmos. Environ., Vol. 11 pp. 231-237, 1977.
- [5] EVANS, L. C. – *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 1997.
- [6] HEFFTER, J. L. e FERBER, G. J. – *A regional-continental scale transport, diffusion, and deposition model. Part II: Diffusion-Deposition Models*. NOAA ERL AL-50, pp. 17-21, 1975.
- [7] HEINES, T. S. e PETERS, L. K. – *The effect of ground level absorption on the dispersion of pollutants in the atmosphere*. Atmospheric Environment, Vol. 8, pp. 1143-1153, 1974.
- [8] HOSKE, R. P. Jr. – *Estimates of dry deposition and plume depletion over forests and grassland*. Annual Report ATDL-106, pp. 231-258, 1973.
- [9] IÓRIO, R. Jr. e IÓRIO, V. de M. – *Equações diferenciais parciais: uma introdução*.
- [10] MARTIN, J. A. Jr, NELSON, C. B. e CUNY, P. A. – *A computer code for calculating doses, population doses, and ground depositions due to atmospheric emissions of radionuclides*. USEPA EPA-520/I-74-004, pp. 5-7, 1974.
- [11] MORGENSTERN, P., MORGENSTERN, L. N., CHNG, K. M., BARRET, D. H. e MEARS, C. – *Modeling analysis of power plants for compliance extensions in 51 air quality control regions*. J. Air Pollut. Control Ass., Vol. 25, No. 3, pp. 287-291, 1975.
- [12] PASQUILL, F. – *Atmospheric Diffusion*, Van Nostrand, pp. 231-235, 1962.
- [13] ROUNDS, W. Jr. – *Solutions of the two-dimensional diffusion equations*. Trans. Am. Geophys. Union, Vol. 36, pp. 395-405, 1955.
- [14] SEINFELD, J. H. e PANDIS, S. N. – *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*. John Wiley and Sons, 1998.
- [15] SMITH, F. B. – *The problem of deposition in atmospheric diffusion of particulate matter*. J. Atmos. Sci., Vol. 19, pp. 429-434, 1962.

- [16] SPIEGEL, M. R. – *Schaum's Outline of Theory and Problems of Laplace Transforms*. Schaum's Outline Series, 1965.
- [17] STAKGOLD, I. – *Boundary Value Problems of Mathematical Physics Volume II*. SIAM Classics, 2000.
- [18] STOCKIE, J. M. – *The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modeling*. SIAM Review, Vol. 53, No. 2, pp. 349-372, 2011.
- [19] TURNER, D. B. – *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*. USEPS AP-26, 1970.
- [20] TURNER, R. e HURST, T. – *Factors influencing volcanic ash dispersal from the 1995 and 1996 eruptions of Mount Ruapehu*. J. Appl. Meteorol., Vol. 40, pp. 56-69, 2001.
- [21] VAUGHAN, B. E., ABEL, K. H., CATALDO, D. A., HALLS, J. M., HANE, C. E., RANCITELLI, L. A., ROUTSON, R. C., WILDUNG, R. E. e WOLF, E. G. – *Review of potential impact on health and environmental quality from materials entering the environment as a result of coal utilization*. Energy Program Report, pp. 16-18, 1975.
- [22] YANG, Y., WILSON, L. T., MAKELA, M. E. e MARCHETTI, M. A. – *Accuracy of numerical methods for solving the advection-diffusion equation as applied to spore and insect dispersal*. Ecol. Model., Vol. 109, pp. 1-24, 1998.