MODELOS MATEMÁTICOS ASSOCIADOS À QUALIDADE DO AR

Dr. Nelson Hein (Orientador)

Juliano Bona. (Orientando)

Universidade Regional de Blumenau – FURB

Rua: Antônio da Veiga Nº 140 – Victor Konter

CEP 89 120 000 Blumenau – SC

Hein@furb.br, julianob10@terra.com.br

RESUMO

A Modelagem Matemática é usada neste projeto, para analisar o ponto de alcance das emissões aéreas, pelo fato destas emissões serem tão diversos, muitos modelos matemáticos precisaram ser empregados, dependendo do problema específico. A ênfase deste trabalho, é explicar os princípios básicos de modelagem matemática para problemas ambientais, restringindo a alguns problemas simples, tais como a liberação de poluentes no ar, com fontes fixas.

ABSTRACT:

Mathematical modeling is used to analyze the full range of air pollution issues. However, because the issues are so diverse, many different kinds of mathematical modes need to be employed depending on the specific problem one is concerned with. Since the emphasis in this book is on explaining the basic principles of mathematical modeling of environmental problems, we will restrict ourselves to some of the simpler problems such as the release of air pollutants from individual, fixed sources.

PALAVRAS CHAVES: Tecnologias inovadoras para a produção industrial limpa.

1. Introdução

O objetivo deste documento é mostras os vários processos físicos relacionados à dispersão de fumaça (poluentes) no momento em que estas estão saindo da chaminé ou de outra fonte de poluição.

2. Materiais e métodos

Como já se mencionou anteriormente, este projeto se concentra sobre algumas “fontes pontuais” de poluição do ar, preferível àquela que tem geometria mais complexa, tal como uma frota de veículos automotores se movimentando ao longo de uma rodovia.

Para descrever os passos da pesquisa, coloca-se uma ementa:

- Uso do cálculo diferencial e integral na difusão do ar;
- Estudo das relações entre equações de difusão e as distribuições normais da estatística;
- Modelagem do “No-flow Boundaries” usando técnicas de reflexão;
- Equações diferenciais parciais no estudo da difusão do ar.

3. RESULTADOS DISCUÇÕES E CONCLUSÃOES

3.1 Cálculos obtidos usando informações adicionais, da equação de difusão

Recorde a equação de difusão unidimensional apresentada anteriormente:

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}$$

Pensaremos nesta equação em sua interpretação física mais simples, isto é, como uma expressão que calcula a concentração do material, em qualquer ponto em um tubo imaginário infinitamente longo estreito e comprido, com um substrato na qual uma massa M de material está se difundindo. No momento inicial, a massa é depositada no tubo no ponto que corresponde a x = O, começando assim a se difundir com o passar do tempo na direção negativa e positiva.

Antes de começar nossa discussão particular sobre esta equação particular, iremos discutir exatamente o que significa concentração em um ponto. Afinal de contas, no caso unidimensional, a concentração seria medido em gramas por centímetro ou algumas outras unidades de massa por comprimento, porém, não a comprimento em um único ponto. Para responder isto, pense como você faria para medir a concentração em um ponto. Poderíamos pegar um pequeno intervalo ao redor de um ponto, pense no total de massa dentro daquele intervalo ao longo do tubo de difusão, divida aquela massa pelo comprimento do intervalo. Se considerarmos um real intervalo estritamente pequeno, então realmente estamos adquirindo uma boa estimativa da concentração. Usando esta idéia poderíamos compor uma definição de concentração, em um ponto. Como o tamanho do intervalo tendendo a zero. Simbolicamente, isto seria:

$$C(x) \equiv \lim_{\Delta x \to o} \frac{quantidade\ de\ massa\ no\ \text{int}ervalo\ x - \Delta x\ ,\ x + \Delta x}{2\Delta x}$$

Aqui escrevemos a concentração em função de x, a variável em discussão, porém esta variável depende também do tempo t em discussão. Podemos escrever assim C (x, t). Realmente nesta situação a expressão mais precisa para concentração será o limite, mas seu valor principal de concentração logicamente em um ponto bem definido, será assegurado por esses conceitos.

Em geral diríamos que a equação anterior envolve duas variáveis independentes, x e t, sendo que o C é variável dependente. Em outras palavras, x e t são os valores de contribuição, e C é o valor de produção. Porém, antes de levamos em conta essa transformação de valores de contribuição para valores de produção, precisamos também dos valores e quantidades adicionais mostrados na equação, como a difusão D constante e a massa inicial M. De um certo modo, elas são variáveis e constantes. São variáveis, partindo do ponto de vista que podemos colocar uma quantidade de valores, esta quantidade corresponde a situações físicas diferentes, podemos encontrar em diferentes experiências de difusão. Por exemplo, como mencionamos anteriormente, a difusão D é constante para o açúcar dissolvido em água, seria provavelmente diferente da difusão constante do ozônio no ar. Mas esta quantidade também é uma constante em uma determinada situação física, o valor de D é fixado ao longo de tais processos. Tais "constantes variáveis" são chamadas de parâmetros.

Como a equação de difusão unidimensional, há duas variáveis independentes, é freqüentemente muito instrutivo manter uma variável fixa e analisar a variação do valor de produção com relação ao valor de contribuição restante. Por exemplo, se mantemos fixo x, a função resultante nos dará a concentração em função do tempo no local fixo especificado por x.

Poderíamos pensar em tal ponto como sendo o receptor (como uma pessoa) que esse está sujeito a poluição do ar, perto de uma plataforma, que seria a fonte da poluição. Porém, há uma diferença qualitativa fundamental entre esta situação e o modo como modelamos plataformas e outras fontes de poluição, nos casos anteriores assumimos uma constante de liberação de material relacionado a um período relativamente longo de tempo, só que a concentração em um determinado local receptor sempre ficaria a mesma. Porém, se houvesse uma momentânea liberação do tipo “bolha falhada” , então a situação física resultante seria contraria a situação que analisamos anteriormente. Certamente estes tipos de situações, na realidade acontecem, investigaremos esta situação mais adiante.

Agora olharemos para a equação de difusão unidimensional de um ponto de vista diferente. Em particular, consideraremos o valor do tempo t fixo, e olharemos a variação de concentração C respeitando o local onde o ponto x se encontra. Isto seria, como levar em conta um instantâneo perfil de concentração ao longo do tubo a um ponto fixo de tempo. Discutimos previamente, a forma geral da função de concentração, porém será que se trata das curvas clássicas que estamos costumados a visualizar.

Seria bom lembrarmos simultaneamente das imagens, isto é, aquela da situação de difusão unidimensional conceitual que envolve um tubo estreito e longo, e também o gráfico da função da concentração correspondente C como uma função de posição. Se fossemos fazer um novo desenho do gráfico de concentração em vários pontos dentro de um determinado tempo, sempre teríamos o mesmo modelo de curva, tornando-se diferente apenas para valores posteriores de tempo (correspondendo a um período mais longo, permitindo que a difusão aconteça), com isso a curva se tornaria mais aplainada. Desenvolver um pouco a familiaridade do uso da derivada e examinando propriedades desta função de concentração, começaremos verificando um fato relacionado ao gráfico, isto é, que a concentração atinge um ponto máximo de concentração que corresponderia $x = 0$ isto é o máximo relativo é também o máximo absoluto.

Considere a situação de difusão unidimensional descrita anteriormente. Com o passar do tempo, o material se difunde cada vez mais, e está se movendo dentro do tubo longo, a partir do ponto x = O se movendo para a esquerda e para a direita. Se fossemos escolher um ponto arbitrário ao longo do tubo e olharmos com um microscópio imaginário, como o material esta se difundindo e se movendo pelo tubo, observaríamos que aquele material está se movendo, passando por esse ponto a uma determinada taxa. Por exemplo, usar números e puramente hipotéticos, se levarmos em conta tais observações a um local correspondente digamos x = 10, poderíamos observar moléculas se difundindo a uma taxa líquida de 1,000 moléculas por segundo, também podemos fazer isto em outras unidades como gramas 10^{-6} por segundo. Esta taxa de transferência de material por um ponto de observação é chamada de fluxo. Isto é análogo ao conceito de fluxo referente a água.No caso unidimensional que estamos idealizando atualmente, não precisamos falar sobre a unidade de área da seção transversal. Porém, podemos pensar que no tubo como tendo uma unidade de seção transversal neste caso o fluxo poderia ser interpretado de uma maneira que já vimos anteriormente, como sendo a taxa de movimento do material com relação a unidade de área da seção transversal.

O conceito de fluxo pode ser usado como uma maneira diferente de analisarmos o principio da difusão básica: a corrente do fluxo seria o caso unidimensional, não precisamos falar da unidade e nem da área da seção transversal (porém, podemos também pensar no tubo como tendo uma unidade de seção transversal, neste caso o fluxo poderia ser interpretado como vimos anteriormente como sendo a taxa de movimento do material proporcional ao gradiente (ou o declive, ou a derivada), da função de concentração. Podemos rescrever este principio na forma de uma equação, representando o fluxo por **q** e recordando que proporcionalidade é equivalente a multiplicar por uma constante, teremos):

$$q = -k \frac{dC}{dx}$$

K simplesmente é qualquer constante de proporcionalidade para a situação particular, a equação é escrita de forma que K será positivo. Em particular, a razão para o sinal de menos é que o fluxo está se movendo para a direção oposta ao gradiente de concentração ou derivada. Por exemplo, se hás derivadas resultarem em valores positivo, significa que a concentração está aumentando à direita, e o fluxo esta se movendo para a região de mais baixa concentração. Nesta equação escrevemos a derivada $\frac{dC}{dx}$ pois concordamos previamente em tratar a outra variável de contribuição t como um valor fixo durante esta parte da discussão. Usando " derivadas parciais", poderíamos rescrever a equação da seguinte forma:

$$q = -k \frac{\partial C}{\partial x}$$

Quando usamos o símbolo " ∂ " para derivada parcial ao invés de " d " o que é automaticamente eqüivalente assumindo que qualquer variável diferente de x será tratada como constante. (Esta é basicamente a definição de derivadas parciais.)

Agora analisaremos o fluxo, e a constante de proporcionalidade e o coeficiente de difusão. Primeiramente, recordaremos a lógica de alguns parâmetros. Temos definido um processo de difusão como sendo a transferência de algum material, isso acontece a uma taxa que é proporcional ao gradiente ou derivado no seu nível atual. Escrevemos de forma matemática como uma equação:

$$q = -k \frac{\partial C}{\partial x}$$

Este fluxo q esta em função de x e também de t, que é igual a concentração, pois vimos que o fluxo pode variar de um ponto a outro, o mesmo podemos dizer com relação ao tempo t. Isto vimos anteriormente, porém, não provamos que para a situação de difusão unidimensional com uma massa inicial M injetada no ponto x = O na ocasião t = O, a concentração atual, ou a função que satisfaz esta condição de difusão pode ser dado pela seguinte equação:

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}$$

Se usarmos a equação de difusão unidimensional para demonstrar que temos um fluxo q a cada ponto e que o mesmo é realmente proporcional ao gradiente da concentração naquele ponto. Considerando a equação de difusão unidimensional, usaremos a mesma para derivar a equação de proporcionalidade, dada anteriormente. Na realidade, levando em conta aquele processo de difusão e que o coeficiente D é a constante de proporcionalidade K na relação de difusão.

Há uma forma de raciocínio que precisamos entender, antes de irmos adiante. Em particular, considere uma pequena parte do tubo da difusão unidimensional. A parte selecionada do tubo de difusão é centrado por um eixo arbitrário com um ponto fixo x, tomamos uma distância à esquerda e à direita Δx . Assumindo o valor de x à direita do ponto x = A onde a massa M é injetada. Em particular a massa está entrando primeiramente no limite esquerdo depois no direito. A taxa na qual a massa está passando por esses limites é simplesmente o valor do fluxo a cada x correspondente, isto é $x - \Delta x$ e $x + \Delta x$. Então podemos escrever que a " massa de equilíbrio " dada pela seguinte equação:

Taxa do fluxo de massa líquida na seção escolhida = $q(x - \Delta x, t) - q(x + \Delta x, t)$.

Isto poderia estar em unidades de moléculas por segundo ou gramas por segundo, ou outras unidades de massa por tempo.

Podemos também dizer que a quantia de massa dentro de uma determinada seção, notando que seu valor de concentração é C(x. f) ao centro da seção, com isso teremos uma boa aproximação da concentração ao longo da seção, contanto que o comprimento seja Δx , isso é, relativamente pequeno. Na realidade, como foi mencionado anteriormente, para a situação de difusão unidimensional, a concentração é dada por unidade de massa por comprimento. Então, se multiplicarmos esta concentração C (x t) pelo comprimento da seção em questão que é $2\Delta x$ obteremos o total de massa nesta seção em um determinado momento. Podemos também escrever en forma de equação:

Massa total na seção em um determinado tempo $t \approx C(x, t) \cdot 2\Delta x$

Usamos o símbolo aproximadamente igual a $(\approx)$ por causa da aproximação que fizemos dentro da seção no ponto C que se localizava bem ao centro. Mas agora, examinaremos as quantidades nas duas equações prévias, podemos ver que a relação entre elas é que a taxa de fluxo da massa líquida nesta seção simplesmente deveria ser a taxa de mudança (ou a derivada com relação ao tempo) da massa total na seção. Então, podemos dizer que o total de massa que se encontra dentro da seção esta variando pois há uma taxa de fluxo de massa líquida na seção que é resultado de um desequilíbrio entre os fluxos do lado esquerdo e direito. Podemos escrever:

$$q(x-\Delta x,t)-q(x+\Delta x,t)\approx \frac{\partial}{\partial t}[C(x,t)\,.\,2\Delta x].$$

Desde que $2\Delta x$ não dependa da variável de t no lado direita da equação, então ela se comporta essencialmente como uma constante do ponto de vista de diferenciação com relação a t, com isso, podemos tira-la de nossa derivada. Na realidade, podemos dividir ambos os lados por $2\Delta x$ isso nos conduziria:

$$\frac{q(x-\Delta x,t)-q(x+\Delta x,t)}{2\Delta x}\approx\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}$$

Levamos o limite de ambos os lados com Δx tendendo a O, o que também nos permite usar o sinal de igualdade, que nos conduz a uma derivada no lado à esquerda, como segue:

$$-\frac{\partial q}{\partial x}=\frac{\partial C}{\partial t}$$

Escrevemos em relação a x esta última equação, porque agora tudo esta sendo avaliado no mesmo ponto (x, t). Esta é uma equação muito importante, e o tipo de raciocínio que envolve derivadas que é fundamental em muitos problemas físicos que envolve meio ambiente.

Agora estamos prontos para completar a verificação que a equação de difusão unidimensional realmente satisfaz o principio da difusão, e que na realidade, a constante de proporcionalidade, previamente escrito como um K genérico, é de fato o coeficiente de difusão D daquela equação. Este é um resultado muito importante. Para a função de concentração dada pela equação de difusão unidimensional, o fluxo, satisfaz:

$$flux=-DC_x$$

Suponha que estávamos administrando uma experiência de difusão unidimensional e queremos saber o total de massa dentro de uma determinada seção do tubo. Por exemplo, escolha um determinado seção do tubo que varie de x = a para x = b. A qualquer ponto e em qualquer tempo e uma massa total (medido em gramas ou moléculas ou alguma outra unidades de massa) situado dentro desta seção do tubo, obviamente esta quantia varia com tempo. Por exemplo, a mesma experiência começa, nos primeiros, momentos, contanto que este intervalo não contenha o ponto de centro x = O, não haverá praticamente nenhuma massa se difundindo dentro dessa seção. Conforme o tempo vai passando a quantidade de massa dentro dessa seção tende a crescer. Então, o material continuará se difundindo da esquerda para a direita, uma vez mais, a concentração dentro desta seção tende a diminuir.

Dado temos uma solução completa da situação de difusão unidimensional como sendo uma função explícita que dá a concentração em qualquer ponto e tempo. Podemos certamente desenvolver uma expressão correspondente para o total de massa na seção do tubo. Na realidade, a resposta envolve um conceito simples definido como sendo uma integral, vamos a ela:

$$\text{Massa total entre a e b} = \int_a^b C(x,t)\,dx\,.$$

O t que se encontra dentro da integral não deveria estar ali, mas como estamos considerando um tempo fixo ele não deve atrapalhar. O t essencialmente se comporta como uma constante durante o processo de integração. Esta equação envolve dois conceitos: definição de concentração em um ponto, e a definição da integral definida como a soma de limites de Riemann.

3.2 Modelando o fluxo sem limites, usando a técnica de reflexão

Recordemos a equação de Gaussion:

$$C = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z u}\left[e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2{}_y}}\right]\left[e^{-\frac{(z-H)^2}{2\sigma^2{}_z}} + e^{-\frac{(z+H)^2}{2\sigma^2{}_z}}\right]$$

Esta equação de difusão difere de todas as outras, encontradas anteriormente, esta contém a soma de duas exponenciais distintas. Nesta seção veremos como o uso de condições adicionais pode ser usado para responder a existência de alguns limites de fluxo. Sabemos, que se fôssemos usar um modelo de duas dimensões, típico, (na direção horizontal e na direção vertical) para modelar a difusão do material a uma distancia maior, o modelo prediria a difusão gradual vertical descendente do material a uma distância indefinida, e consequentemente aconteceria o mesmo na direção horizontal. Isto parece ser um pouco irreal, nem mesmo pôde ser justificado debaixo de nossa filosofia de conservantismo na qual fizemos ligeiramente, simplificando suposições no modelo matemático quando seguramente os resultados tenderiam a superestimar a poluição do ar, experimentada nos locais de interesse. Neste caso, se fôssemos usar um modelo que teoricamente considera que o material esta se movendo para baixo em pequenos saltos, alguma massa destes poluentes seriam efetivamente perdidas na atmosfera sobre a superfície da terra, e consequentemente o total de poluentes que esta contida na zona física real assumida pelo modelo seria menor do que de fato há. Esta seria uma aproximação conservadora e inaceitável. Estudaremos esta situação dez do princípio.

Podemos imaginar um tubo de difusão unidimensional típico, com exceção de uma diferença, isto é, há dois pontos na qual uma massa que M está sendo introduzida instantaneamente no tubo. Considere um ponto um P bem ao meio, no centro do tubo, entre os dois pontos onde a massa está sendo injetada. Podemos examinar relativamente e superficial es caso, o que acontece com o fluxo no ponto P? A resposta para esta questão é bastante simples. O fluxo no ponto P deve ser exatamente 0. Isto acontece porque há uma simetria perfeita entre o tubo da parte direita de P e a parte esquerda de P. Então o fluxo em P não poderia ser positivo (fluxo líquido para a direita) nem negativo (fluxo líquido para a esquerda), de forma que o único possível valor para o fluxo neste ponto seria 0, como declarado.

Recorremos a um ponto do tubo, que corresponde a P, como um “limite sem nenhum fluxo" desde que neste ponto ou além dele não haja nenhum fluxo líquido em qualquer direção abaixo de determinadas condições. Na realidade, isto significa que se fôssemos de fato pôr um limite físico ou parede no tubo em um determinado ponto, não teríamos nenhum efeito no padrão de difusão do material. Como o limite faz com que o material pare completamente, o lado esquerdo da experiência e o lado direito da experiência, realmente poderíamos considerar dois processos de difusão completamente independentes.

Na realidade, poderíamos nos interessar pelos resultados únicos de uma de nossas duas experiências. Por exemplo, uma situação na qual o tubo lateral direito está por si só isolado. Poderíamos inverter a conexão lógica, das três figuras, nesta seqüência. Por exemplo, poderíamos dizer então que o padrão de difusão desejado seria obviamente o mesmo padrão de difusão que teríamos administrado em ambos os lados da experiência. Então poderíamos discutir que o limite físico neste caso, não tem absolutamente nenhum efeito nesta difusão, de forma que o padrão de difusão que estamos analisando age da mesma maneira para tubos extremamente longos. Assim se pudermos conseguir resolver o problema descrito anteriormente, poderemos resolver o problema determinado na segunda parte da discussão. Agora analisaremos melhor a solução do problema de difusão. Previamente, tínhamos concordado que o fluxo no ponto P teria que ser 0. Se lembrarmos que o fluxo a um ponto corresponde ou fluxo líquido neste ponto, isto significa que embora pode haver moléculas se movem à esquerda e à direita do ponto, o fluxo simplesmente é a taxa líquida do movimento. Subtraindo a taxa na qual eles estão fluindo em uma determinada direção da taxa na qual eles estão fluindo na outra direção. Para analisar o padrão de difusão, temos que pensar em outra situação. Imaginemos um certo ponto P dentro de um determinado tubo, e injetamos uma sertã quantidade de um material que esta se difusão no lado direito do ponto P. Também somamos um sistema de coordenada, e ao contrário da introdução original do problema de difusão unidimensional, consideraremos que o ponto de injeção corresponde ao ponto x = L no lugar de o x = 0. A solução para este problema de difusão unidimensional é determinada pela equação

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-(x-L)^2}{4Dt}}$$

onde a única diferença da equação de difusão de unidimensional original é que os valores de x foram mudados para (x-L). O gráfico desta equação simplesmente é a original curva normal padrão a única diferença é que seu ponto de máximo fica no ponto x = L. Semelhantemente, a segunda parte de figura mostra outro problema de difusão unidimensional, este com uma única fonte agora unidades de L situadas à esquerda da origem. Por este argumento que é precisamente análogo ao anterior, a solução para este problema é determinada pela equação:

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-(x+L)^2}{4Dt}}$$

Note que esta equação só difere da anterior o fator (x+L) isto significa que agora o cume deste curva normal é alcançada ao ponto onde x = -L.

Todo este movimento é apenas o resultado de números relativos que dão o efeito de migração sistemática líquida. Quando observarmos o sistema externamente, podemos contar apenas o número total de moléculas de um material que esta se difundindo em qualquer momento, sem sabermos em que lado eles poderiam ter originado. O número que observamos (isso corresponde à concentração total de material a qualquer ponto) simplesmente é a soma das duas fontes individuais, e consequentemente é determinada para solucionar os dois problemas de difusão individuais. Então, a solução para problema de difusão que vimos anteriormente, é determinada por

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-(x-L)^2}{4Dt}} + \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-(x+L)^2}{4Dt}}$$

Lembre-se do ponto fundamental: O problema da solução com duas fontes, como debatemos anteriormente, está é exatamente igual à solução dos dois problemas individuais separados, em intervalos respectivos.

Este levantamentos e observações chaves conduzem à uma estratégia geral para resolver qualquer problema de difusão com alguma barreira física ou nenhum limite de fluxo:

1. Some uma fonte imaginária (da mesma quantidade e mesmo tipo de material de difusão) em algum local imaginário em um espaço de natureza simétrica as duas fontes insinuariam que não existe fluxo, ou zero condição de fluxo em um local limite.
2. Para achar a solução deste sistema, dobraríamos os resultados, neste caso estamos usando o princípio da superposição.(Quer dizer, acha a solução a cada fonte individual depois somar os resultados.)
3. Use esta soma resultante como a solução para o problema original em seu intervalo original.

3.3 A equação diferencial parcial básica, para processos de difusão

A equação de difusão de unidimensional denominada, por

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}$$

Certamente tratamos de muitas variações nesta equação, todas as partes já debatidas também valem para duas e três dimensões como a poluição do ar relacionado ao modelo Caussian da coluna de fumaça. Esta equação de difusão é tão fundamental que será muito valioso investigar este ponto mais adiante. Por exemplo, discutimos a analogia entre transporte de massa a um taxa proporcional a um gradiente de concentração e outros processos físicos, como fluxo de calor, movimento da água no chão, etc. Na realidade, nesta seção, alguns comentários feitos no sumário serão incluídos neste tópico. Na seção prévia, adotamos um ponto de vista probabilistico e usamos a mesma para derivar a equação de difusão de unidimensional. Há outra linha totalmente diferente de argumentar que pode ser usada para derivar esta equação, muito mais semelhante a nossa discussão anterior do princípio de difusão. Realmente, ambas as linhas de aproximação representam importantes linhas de pensamento, nesta seção procuraremos discuti-la melhor. Embora usássemos a termo de equação de difusão unidimensional para descrever a anterior equação, o leitor deve saber que muitos textos não usariam esta terminologia, reservando a termo equação de difusão unidimensional para uma equação diferencial parcial fundamental (isto é, uma equação que contenha algumas derivadas parciais) na qual nossa versão de equação pode ser derivada. Agora que o leitor tem um pouco de experiência com o processo de difusão e a natureza das equações correspondentes, investigaremos esta equação diferencial parcial básica.

Nenhuma fundamentação prévia de equação diferencial parcial é necessário par que possamos seguir com esta discussão, na realidade, este seria um bom modo para aprender como surge esta equação. Equação diferencial parcial é de fato formulada especificamente para modelar problemas físicos como fluxo de calor, como vimos anteriormente, e basicamente o processo de difusão.

Lembre-se que para uma situação de difusão unidimensional a concentração de material que esta se difundindo é representada por uma função C (x,t) tem duas variáveis independentes formadas por x e t. Recorde que há várias notações comuns por indicar derivadas parciais. Por exemplos, a primeira derivada parcial de C com relação a x variável pode ser representada das seguintes formas:

$$\frac{\partial C}{\partial x} \quad \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \quad C_x \quad C_x(x,t)$$

Semelhantemente, a primeira derivada parcial de C com relação a t poderia ser indicada perlas seguintes formas:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \quad \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} \quad C_t \quad C_t(x,t)$$

Com relação a derivada parcial de segunda ordem, nosso interesse principal estará na derivada de segunda de C com relação a x que pode ser representada por qualquer uma das expressões:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial t^2} \quad C_{xx} \quad C_{xx(x,t)}$$

Neste parte, usamos primeiramente a notação ∂ para derivadas parciais. Cada notação matemática apresentada foi construída de certo modo para que possam ser facilmente entendidas, às vezes é vantajoso efetuarmos a troca de notação durante alguns cálculos. Como mencionado acima, uma equação diferencial parcial é uma equação que contém pelo menos um derivada parcial.. A equação diferencial parciais é freqüentemente chamada de “PDE`s”. Assim podemos escrever a equação de difusão unidimensional PDE, de duas diferentes maneiras, para notação de derivadas parciais.

$$C_t = DC_{xx} \qquad \frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Lembre-se que ambas as equações dizem exatamente a mesma coisa, usaremos dois sistemas diferentes de notação. Esta equação envolve derivadas parciais ambas com relação a t e x. Como será visto brevemente, esta equação pode ser derivada diretamente levando em conta fatores físico do problema de difusão, consideremos uma vez mais uma situação determinada e governada pelo princípio da difusão; esta derivação será bastante semelhante a que foi vista anteriormente.

Dado este PDE básico para descrever a situação física, o próximo passo lógico seria achar uma função C(x,t) . A difusão unidimensional PDE tem muitas soluções (na realidade, um número infinito) assim também teremos que especificar certas condições auxiliares chamadas condições iniciais, ou, condição de limite para fixar a solução exata que queremos. (Isto é semelhante a avaliar a constante de integração para achar a solução particular a um problema de antiderivada) A equação de difusão unidimensional que estamos discutindo é um das soluções à difusão unidimensional PDE, e seria bom começarmos verificando este fato simplesmente.

Agora procedemos ao desenvolvimento da difusão de unidimensional PDE como o modelo matemático básico para o processo de difusão. Esta derivação especialmente, será bem parecida a nossa discussão de fluxo. Começamos com a difusão unidimensional do tubo, com a suposição de processo de difusão básica de transporte de materiais que se difunde de um lugar para o outro a uma taxa que é proporcional a seu gradiente de concentração.

Estamos trabalhando em uma pequena seção do tubo centrada em um local fixo x estendendo que há um comprimento à esquerda e à direita Δx . Temos que Q representar a massa total que esta se difundindo neste segmento particular do tubo. Lembre-se que M é a quantia de massa distribuiu dentro do tubo inteiro, assim Q é só uma porção desta massa. Naturalmente, Q depende de Δx .

Como Δx é relativamente pequeno, a concentração comum de material dentro do segmento de tubo deveria ser aproximada ao valor do ponto central. Em outro palavra,

$$\frac{Q}{2\Delta x} \approx C(t, x)$$

Usaremos como aproximação e indicaremos por **(** ¿ **)**, pois, as anteriores quantidades não são precisamente iguais, mas são aproximadamente iguais para valores pequenos de Δx , na realidade, eles seriam iguais se fôssemos fazer o limite te Δx tender a zero. Podemos rescrever a anterior equação fazendo uma aproximação para o próprio Q

$$Q \approx C(x, t) \, . \, 2\Delta x$$

Agora analisaremos dois modos de difusão para representar a taxa de mudança da massa localizada dentro do segmento. O modo para representar esta mudança é simplesmente a derivada $\frac{\partial Q}{\partial t}$. Quer dizer,

Taxa de mudança da massa no segmento ¿ $\frac{\partial Q}{\partial t}$

¿ $\frac{\partial}{\partial t}[C(x,t).2\Delta x]$

¿ $C_t \, . \, 2\Delta x$

Nota que usamos a expressão derivada parcial variando o tempo em relação a Q, desde que x tinha sido fixado pela discussão original. Um modo totalmente diferente para calcular a taxa de mudança de massa em um determinado segmento seria determinar o fluxo no segmento, isto pode ser feito levando em conta o fluxo que esta entrando no segmento do lado esquerdo e subtraindo o fluxo que deixa o segmento do lado direito. Quer dizer,

Taxa de mudança de massa no segmento = fluxo da esquerda - fluxo fora a direito

$$= -DC_{x(}(x-\Delta x, t) + DC_x(x - \Delta x, t)$$

Comparamos estas duas expressões para a taxa de mudança de massa dentro do segmento, se movermos o $2\Delta x$, e levarmos o limite Δx tender a 0:

$$C_t \approx D\,\frac{C_x(x+\Delta x, t) - C_x(x-\Delta x, t)}{2\Delta x}$$

$$C_t \approx D\,\lim_{\Delta x \to 0} \frac{C_x(x+\Delta x, t) - C_x(x-\Delta x, t)}{2\Delta x}$$

$$C_t \approx DC_{xx}$$

Esta é a difusão unidimensional PDE! O tipo de argumentar usado nesta derivação é típico e resolveria muitos problemas físicos e ambientais.

Um detalhe técnico matemático, deveria dizer que a derivação anterior estava baseado na suposição implícita, que o processo de difusão é contínuo em todos os pontos. Isto não é aplica a nosso problema de difusão básico com t inicial t = 0, assim o PDE não é aplicado ao ponto inicial ou pontos de limite. Esperaríamos que esta fosse a solução do PDE que seria contínuo a tal ponto, assim chegaríamos a condição inicial de 0 concentração a todos os pontos da forma (x,0), com exceção ao ponto (0,0) onde a concentração inicial nem é mesmo definida.

Com relação ao conceito de fluxo usado nesta derivação, nota que consideramos simplesmente a taxa de fluxo do material ao longo do eixo unidimensional do tubo de difusão, semelhante ao modo que tratamos anteriormente. Isto é consistente com o primeiro dos dois modos de difusão unidimensional discutidos anteriormente. No ponto de vista tridimensional, a movimentação dos poluentes seria a taxa de fluxo por unidade de área na seção transversal perpendicular a direção de difusão, porém a difusão ocorre só em uma direção. Neste, área da seção transversal do tubo de difusão apareceria como um fator constante em nossa equação de difusão,(ela iria se cancelar.) Alternativamente, poderíamos pensar no tubo de difusão como tendo uma única unidade área de seção transversal.

Para o momento restringiremos nossa discussão à situação de difusão unidimensional. Mostramos que toda única usada na situação de difusão unidimensional tem que satisfazer a equação de difusão unidimensional PDF, isto terá significando quando iniciarmos o processo, na função de concentração C(x,t) tem que satisfazer o PDE. Isto vai muito além da extensão de nossa equação de difusão de unidimensional original, isto é:

$$C = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}$$

Esta equação não é aplicada a toda situação de difusão unidimensional, mas só para a situação particular que começa com uma massa inicial M injetada a um particular, x = 0, no começo da experiência. Certamente, podemos pensar em muitas situações de difusão diferentes que não iniciam deste modo em particular. Por exemplo, poderíamos começar uma experiência de difusão injetando várias quantias de massa a vários pontos ao longo do tubo de difusão. Na realidade, alguns exemplos como este têm sido previamente considerado. Poderíamos começar uma experiência de difusão sem a injeção de qualquer quantidade de massa. Por exemplo, imagine um tubo de difusão no qual a concentração é mantida a um valor específico em um determinado local, em outros pontos a difusão continua, só que a quantidade de massa que esta nesta seção é substituída, porém, sua concentração permanece constante. Poderia ter uma experiência de difusão em um tubo, mas não infinitamente longo, e sim de comprimento finito. A equação de difusão unidimensional não é aplica a esta situação, mas a difusão unidimensional PDE certamente o faz.

A condição principal que distingue um problema do outro geralmente é chamada condições de limite. Às vezes são chamadas condições de limite que só são aplicadas ao momento inicial da experiência mais precisamente nas condições iniciais. As condições de limite podem ter uma variedade muito grade de formas, ambos em termos de descrição física e caracterização matemática correspondente. Por exemplo, um tubo de difusão de comprimento finito seria caracterizado por uma condição de limite. Desde que este seja um processo de difusão significa que o C_x derivada em todos os pontos deveria ser igual 0. Um das coisas que a equação diferencial parcial faz, é um assunto muito complexo não é o fato que a equação é necessariamente complexa, como temos visto, a difusão unidimensional PDE é relativamente simples.

Vamos nos ater ao problema de difusão unidimensional original, em que uma massa hipotética M é injetada inicialmente no ponto x = 0 em um tubo infinito. Sabemos que o função solução c(x,t) tem que satisfazer a difusão unidimensional PDE para todo valor de x toda vez que t é maior que zero.

Para alguns problemas que envolvem limites mais complicados, é possível representar as soluções como a soma de soluções de problemas caracterizados por condições de limites mais simples. Isto foi discutido anteriormente quando introduzimos o conceito de superposição. Por exemplo, um problema de difusão unidimensional começa com massa que é injetada inicialmente a dois ponto diferente, as moléculas que originam a um desses pontos são geralmente não afetadas pelo comportamento das moléculas que são injetadas ao outro ponto, assim, para calcular a concentração total a qualquer ponto, temos apenas que calcular a concentração que origina de cada uma das duas fontes, e então somar os resultados.

Não consideramos um grande número de equações ou limites condicionais, o mesmo, não foi um tema importante para nós. O nosso trabalho é achar, problemas físicos onde a singularidade de uma solução é aparentemente em uma situação física. Por exemplo, às vezes quando são encontras dificuldades no processo de solução, isto indica que o modelo matemático não está completo. Talvez algum aspecto relacionado ao comportamento da função, ou alguma condição de limite foi omitida da formulação. Por enquanto este conceito esta fora de nosso alcance, porém, este é um conceito muito interessante que deve ser mencionado.

Problemas de difusão satisfazem um princípio de máximo, ou seja, a função sempre terá um ponto de máximo no intervalo (x, t) na qual eles estão definidos. Por exemplo, para o tubo de difusão infinito, o ponto superior esta bem ao meio (Com o eixo vertical). Este princípio é fácil de ser percebido quando pensamos no processo de difusão, onde os materiais migram de áreas de alta concentração para áreas de baixa concentração. Iniciando uma experiência de difusão com o valor máxima limite de 10 gramas por centímetro, então de repente é encontrada uma concentração 20 em algum ponto! Além disso, a diferença satisfaria uma inicial condição de limite, pertinente no intervalo(x,t). Entretanto o princípio de máximo insinuaria que a diferença das funções estaria em todos lugares onde a diferença é igual a 0. Esta lógica que aplica temos nas equações de Laplace,s, que por sua vez, é muito útil em propriedades adicionais de derivadas.

Poderíamos comparar a equação de difusão PDEs com as equações de Laplace,s , como segue:

	Difusão	Laplace
$1-D$	$C_t = DC_{xx}$	$0 = h_{xx}$
$2-D$	$C_t = D(C_{xx}+C_{yy})$	$0 = h_{xx} + h_{yy}$
$3-D$	$C_t = D(C_{xx}+C_{yy}+C_{zz})$	$0 = h_{xx} + h_{yy} + h_{zz}$

Olhando para a equação de difusão, note que em qualquer situação de difusão se fôssemos chegar a um estado fixo, ou seja, uma situação na qual a concentração deixou de variar ao passar do tempo, isto faria com que, C_t , seja igual a 0, nesta condições, a função de concentração satisfez as equações de Laplece,s. Em outro palavra, as equações de Laplace,s se encaixa no processo de difusão que essencialmente alcança uma distribuição estatal fixa na variável de interesse (é a concentração C na discussão precedente).

4.1 Referências Bibliográficas

BIEMBENGUT, Maria Salett. **Modelagem Matemática & Implicações no Ensino Aprendizagem da Matemática**. Blumenau: Edifurb, 1999.

HADLOCK, Charles R. **Mathematical Modeling in the Enviroment**. Washington: The Mathematical Assoaciation of America, 1998.