

Trabalho de Formatura

Curso de Graduação em Engenharia Ambiental

**ESTUDO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARA APLICABILIDADE AMBIENTAL:
O FENÔMENO DIFUSÃO-ADVECÇÃO**

Valdecir Siqueira Ramos

Prof. Dr. Nelson Callegari Júnior

Rio Claro (SP)

2026

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Instituto de Geociências e Ciências Exatas

Câmpus de Rio Claro

VALDECIR SIQUEIRA RAMOS

ESTUDO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARA
APLICABILIDADE AMBIENTAL: O FENÔMENITO
DIFUSÃO-ADVECÇÃO

Trabalho de Formatura apresentado ao
Instituto de Geociências e Ciências Exatas -
Câmpus de Rio Claro, da Universidade
Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para
obtenção do grau de Engenheiro Ambiental.

Rio Claro - SP

2026

R175e Ramos, Valdecir Siqueira
Estudo de equações diferenciais para aplicabilidade ambiental : o fenômeno difusão-advecção / Valdecir Siqueira Ramos. -- Rio Claro, 2026
76 f.

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Engenharia Ambiental) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Rio Claro
Orientador: Nelson Callegari Júnior

1. Modelagem. 2. EDO. 3. EDP. 4. Transformada. 5. Contaminação. I. Título.

VALDECIR SIQUEIRA RAMOS

ESTUDO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARA
APLICABILIDADE AMBIENTAL: O FENÔMENO DIFUSÃO-
ADVECÇÃO

Trabalho de Formatura apresentado ao
Instituto de Geociências e Ciências Exatas -
Câmpus de Rio Claro, da Universidade
Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para
obtenção do grau de Engenheiro Ambiental.

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Nelson Callegari Júnior

Prof.^a Dr.^a Marta Cilene Gadotti

Prof. Dr. Ademir Abdala Prata Júnior

Rio Claro, 19 de junho de 2026.

Assinatura do aluno



assinatura do orientador

AGRADECIMENTOS

Quero agradecer a cada respiração que sustentou esta experiência.

Quero agradecer a todos os seres que contribuíram direta ou indiretamente para minha formação.

Agradeço ao professor Nelson Callegari Júnior pela paciência, pelas dicas e comprometimento em me orientar.

Agradeço a minha família que sempre me deu o suporte necessário para a realização das minhas conquistas.

Agradeço à UNESP por se fazer presente de inúmeras formas e possibilitar meu crescimento intelectual, assim como humano. Além disso, devo agradecer as políticas de permanência estudantil, como moradia e auxílios, pois sem elas essa graduação se tornaria inviável.

Agradeço a todas as oportunidades de estágio, iniciação científica e projetos dos quais tive a oportunidade de fazer parte.

Por fim, agradeço o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq por financiar o presente trabalho, tornando possível sua produção - código de financiamento 20747.

RESUMO

Diversas atividades antrópicas promovem a introdução de poluentes em corpos hídricos superficiais e subterrâneos. Diante disso, prever o comportamento dessas substâncias é fundamental para assegurar a qualidade e a disponibilidade dos recursos hídricos. As equações diferenciais desempenham um papel consolidado nesse cenário, permitindo a modelagem matemática do transporte de compostos em meio aquático. A partir dessas representações, torna-se possível estimar a concentração de um determinado contaminante ao longo do espaço e do tempo, com base em variáveis de entrada específicas. Entretanto, as equações que regem esses fenômenos ambientais frequentemente apresentam alta complexidade analítica, o que limita sua aplicação imediata na tomada de decisões regulatórias. Diante disso, o presente trabalho teve como objetivo apresentar a resolução analítica de três equações diferenciais, associadas a quatro problemas de valor inicial e de contorno correlatos ao fenômeno de advecção-difusão, além de propor um guia de consulta rápida focado em suas potencialidades e restrições. Adotou-se uma metodologia exploratória, na qual buscaram-se, na literatura especializada, os fundamentos necessários para o desenvolvimento das soluções propostas. Como resultado, estruturou-se um guia capaz de auxiliar engenheiros na aplicação prática de modelos matemáticos voltados ao transporte difusivo-advectivo.

Palavras-chave: Modelagem; EDO; EDP; Transformada; Contaminação.

ABSTRACT

Several anthropogenic activities promote the introduction of pollutants into surface and groundwater bodies. Therefore, predicting the behavior of these substances is fundamental to ensuring the quality and availability of water resources. Differential equations play a consolidated role in this scenario, allowing the mathematical modeling of compound transport in aquatic environments. From these representations, it becomes possible to estimate the concentration of a given contaminant over space and time, based on specific input variables. However, the equations governing these environmental phenomena often present high analytical complexity, which limits their immediate application in regulatory decision-making. Therefore, this work aimed to present the analytical solution of three differential equations, associated with four initial and boundary value problems related to the advection-diffusion phenomenon, as well as to propose a quick reference guide focused on their potential and limitations. An exploratory methodology was adopted, in which the necessary foundations for the development of the proposed solutions were sought in the specialized literature. As a result, a guide was developed to assist engineers in the practical application of mathematical models focused on diffusive-advective transport.

Keywords: Modeling; ODE; PDE; Transform; Contamination.

Title in english: STUDY OF DIFFERENTIAL EQUATIONS FOR ENVIRONMENTAL APPLICABILITY: THE ADVECTION-DIFFUSION PHENOMENON.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Transferência de massa dentro de um volume de controle.....	13
Figura 2: Reator alongado retangular.....	25
Figura 3: Reator Mistura de Fluxo (Mixed-Flow Reactor - MFR).....	26
Figura 4: Representação da Eq. (4.20).....	43
Figura 5: Representação 3D da Eq. (4.44).....	44
Figura 6: Representação 2D da Eq. (4.44) para $t = 5$ s.....	45
Figura 7: Mapa de contornos da concentração da Eq. (4.44).....	45
Figura 8: Mapa de contornos da concentração da Eq. (4.66).....	47
Figura 9: Representação 3D da Eq. (4.66).....	47
Figura 10: Representação 2D da Eq. (4.66) para $t = 0,1$ s e $t = 0,2$ s.....	48
Figura 11: Mapa de contornos da concentração da Eq. (4.87).....	49
Figura 12: Representação 3D da Eq. (4.87).....	49
Figura 13: Representação 2D da Eq. (4.87) para diferentes tempos.....	50

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	8
1. Objetivo geral.....	9
1.1 Objetivos específicos.....	10
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	11
2.1 Fenômeno Ambiental: Difusão-Advecção.....	11
2.2 Equações Diferenciais.....	13
2.3 Classificação e Problema de Valor Inicial.....	14
2.4 Transformadas e Funções.....	16
2.4.1 Transformada de Laplace.....	16
2.4.2 Transformada de Fourier.....	17
2.4.3 Função Erro.....	17
2.4.4 Função Delta de Dirac.....	18
2.4.5 Função Degrau Unitário.....	18
2.5 Aplicabilidade Ambiental.....	19
3 METODOLOGIA.....	22
3.1 Mecânica dos Fluidos: equações a serem estudadas.....	22
3.2 Principais Referenciais Teóricos.....	23
3.3 Metodologia de Pesquisa.....	24
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	25
4.1 Equação Diferencial Ordinária Linear de Segunda Ordem Homogênea.....	27
4.2 Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Linear e Homogênea para uma substância conservativa.....	30
4.3 Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Linear Homogênea: pulso e interrupção.....	33
4.3.1 Condição de Contorno: pulso unitário.....	34
4.3.2 Condição de Contorno: entrada retangular.....	37
4.4 Discussões.....	41
5 CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	51
REFERÊNCIAS.....	52
APÊNDICE A – CÓDIGOS DESENVOLVIDOS A PARTIR DAS EQUAÇÕES NO GEMINI PARA SEREM PLOTADOS NO GNU OCTAVE ON-LINE.....	54
APÊNDICE B – COMANDO PLOTADOS NO GEOGEBRA.....	59
APÊNDICE C – GUIA PRÁTICO PARA ENGENHEIROS: O FENÔMENO DIFUSÃO-ADVECÇÃO.....	60

1 INTRODUÇÃO

A modelagem matemática é uma ferramenta consolidada para a representação de fenômenos físicos, químicos, biológicos, humanos e econômicos por meio de formulações analíticas e numéricas. Esse mecanismo viabiliza a descrição quantitativa de sistemas complexos, tais como o crescimento populacional, o decaimento radioativo e os transportes de calor e de massa (BOYCE et al, 2020). A descrição de comportamentos ou fenômenos por meio de modelos matemáticos está condicionado a duas etapas principais: a identificação das variáveis responsáveis por mudanças no sistema e a determinação de um conjunto de hipóteses razoáveis, tais como leis empíricas e contexto inicial (ZILL & CULLEN, 2001).

A água é um recurso essencial para a vida e suporte de todas as atividades econômicas (UN, 2024). Diante das múltiplas ações desenvolvidas pelos seres humanos, observa-se uma crescente introdução de contaminantes cada vez mais complexos nos ambientes aquáticos, dos quais muitos ainda se tem pouca informação de seus riscos à saúde e aos ecossistemas (FENG et al., 2023). Nesse sentido, a utilização de modelos matemáticos para a descrição, simulação e previsão do comportamento de constituintes em água se configura como uma ferramenta fundamental pois auxilia em ações de monitoramento, mitigação e gestão ambiental (FERNANDES, 2025).

A difusão e a advecção são fenômenos responsáveis pelo transporte de substâncias sólidas, líquidas ou gasosas em meio líquido (POTTER, 2009). A utilização desses fenômenos como hipóteses para elaboração de modelos matemáticos é um procedimento consolidado na literatura. Como exemplo disso, a Companhia Ambiental do Estado de São Paulo - CETESB orienta, por meio do manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas - GAC que serve como um arcabouço técnico, legal e administrativo dos mais avançados do mundo, a utilização da equação de difusão-advecção unidimensional para representar o transporte unidirecional de solutos em ambientes subsuperficiais saturados (CETESB, 2025).

A equação de difusão-advecção conta com derivadas de uma variável dependente, a concentração de um determinado constituinte, em relação a uma ou mais variáveis independentes, o tempo e/ou espaço, o que a caracteriza como uma equação diferencial (ZILL & CULLEN, 2001). Tipicamente, as equações diferenciais admitem uma infinidade de soluções. Para selecionar uma solução de interesse, estabelecem-se condições iniciais e de contorno que, conforme o Teorema de Picard, garantem a existência e unicidade da solução (ZILL & CULLEN, 2001; BOYCE et al., 2020). Outro fator importante a ser destacado é o

método de resolução que pode ser analítico ou numérico. As resoluções analíticas permitem encontrar soluções exatas por meio de técnicas como integração ou expansão em séries. Já as resoluções numéricas são aproximações da solução de um problema de valor inicial para equações nas quais os métodos analíticos não se aplicam ou seu uso é muito complicado, como no caso de equações não lineares (BOYCE et al, 2020).

A aplicação da equação de difusão-advecção é ampla e robusta para estudos ambientais. Nos trabalhos de O'loughlin e Bowmer (1975) e Rathbun (1988), pode-se observar a modelagem matemática de constituintes por meio de processos físicos como difusão, advecção, degradação química, adsorção e evaporação (O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975; RATHBUN et al., 1988). Em Fernandes (2025) observa-se a resolução numérica da equação difusão-advecção e posterior comparação do comportamento do contaminante para diferentes coeficientes de difusão e velocidade (FERNANDES, 2025). Já Van Genuchten e Alves (1982) indicam mais de 20 soluções analíticas para diferentes condições iniciais e de contorno, de forma a ampliar as possibilidades de cenários onde a equação de difusão-advecção pode ser utilizada (VAN GENUCHTEN & ALVES, 1982). Por fim, Falco e Mulkey exemplificam contextos nos quais o modelo aqui discutido foi aplicado, indicando seu uso para tomada de decisão em problemas em escala de bacia, por exemplo (FALCO & MULKEY, 1976).

Diante disso, a investigação de equações diferenciais voltadas aos fenômenos de difusão-advecção mostra-se essencial, unindo o baixo custo operacional à alta capacidade preditiva. Para tanto, este trabalho estrutura-se de modo a fornecer, inicialmente, a fundamentação teórica que rege o transporte de massa. Na sequência, detalha-se a abordagem metodológica e as referências selecionadas. O núcleo do estudo consiste no desenvolvimento analítico de três equações diferenciais sob quatro conjuntos distintos de condições de contorno e valores iniciais, seguido por uma discussão dos limites de aplicabilidade de cada solução. Por fim, os resultados são consolidados na forma de um guia de consulta rápida direcionado à prática da engenharia.

1. Objetivo geral

O objetivo do presente trabalho é uma revisão dos estudos de solução de problemas de valor de contorno com métodos apropriados para o modelo de difusão-advecção.

1.1 Objetivos específicos

- a) Caracterizar e contextualizar três equações diferenciais, ordinária e parciais, que descrevem o transporte unidimensional de massa por meio do fenômeno de difusão-advecção;
- b) Deduzir analiticamente três equações diferenciais para quatro problemas de valor inicial e de contorno, a partir de métodos apropriados como Transformadas de Laplace e Fourier;
- c) Disponibilizar um guia para engenheiros com os métodos de solução, assim como o contexto onde aplicá-las, para problemas envolvendo equações diferenciais ordinárias e parciais relacionadas ao comportamento de uma determinada substância sob o efeito do fenômeno de difusão-advecção.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Fenômeno Ambiental: Difusão-Advecção

Quando um componente é adicionado a um fluido, como em rios por exemplo, o transporte desta substância segue alguns princípios, que podem ser generalizados e representados matematicamente (O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975; RATHBUN et al., 1988). A difusão, como exemplo de um desses princípios, ocorre a partir da diferença de concentração de uma ou mais substâncias em uma mistura de fluidos, ou seja, a partir de movimentos aleatórios das moléculas das substâncias, esse sistema tende à homogeneização da mistura (POTTER, 2009). Comportamentos como esse, ao serem generalizados matematicamente, são geralmente expressos por uma constante de proporcionalidade e por um gradiente que descreve o comportamento, que neste caso é o gradiente de difusão (BOYCE et al. 2020). Assim, a difusão pode ser formulada por:

$$J(x, t) = -D \frac{dC}{dx}, \quad (2.10)$$

onde J corresponde ao fluxo de massa do constituinte por área unitária por unidade de tempo na direção x . C é a concentração dessa substância, D é o coeficiente de difusão de massa e x representa a dimensão em que esse material se difunde. Assim, a quantidade de matéria que passa por uma seção transversal em um intervalo de tempo é equivalente à taxa de variação da concentração na direção de interesse multiplicado pelo coeficiente de difusão que indica o quão rápido esse transporte vai acontecer. O sinal negativo implica que a concentração diminui à medida que se distancia do ponto de aplicação da substância.

Outro fenômeno responsável pelo transporte de massa em fluidos é a advecção, que ocorre a partir do movimento do próprio fluido, o que intensifica o processo difusivo (POTTER, 2009), e é expressa pela seguinte fórmula:

$$J(x, t) = uC, \quad (2.11)$$

onde u corresponde a velocidade do fluido em uma determinada direção. Assim, a quantidade de massa que atravessa uma área unitária em um dado intervalo de tempo é equivalente à quantidade de matéria que é transportada pela velocidade do fluido na direção perpendicular à área.

Em ambientes naturais, muitas vezes as substâncias reagem com os elementos do meio formando outras substâncias através de reações químicas ou ação biológica. Esse fenômeno é chamado de geração ou degradação da substância. A taxa de degradação é influenciada pela temperatura, intensidade de campo magnético e pela composição da própria substância (POTTER, 2009). Assim, a partir de testes laboratoriais, foi observado que a degradação de uma substância pode ser modelada como:

$$\frac{dC}{dt} = -\kappa C^n, \quad (2.12)$$

onde κ é a constante de taxa, dependente da temperatura, C é a concentração da substância e n é a ordem da reação. O sinal negativo indica que com o passar do tempo a concentração tende a diminuir proporcionalmente à constante de taxa κ .

Sob esta perspectiva, a advecção e a difusão são importantes à medida que esses princípios são responsáveis, por exemplo, pelo transporte de substâncias em meio líquido, em particular, pela movimentação do oxigênio na água, essencial para a manutenção dos ecossistemas aquáticos. Entretanto, a modelagem de fenômenos ambientais, de forma geral, é complexa e, ao serem representados matematicamente, apresentam uma quantidade considerável de variáveis. Assim, simplificações são consideradas por tornarem possíveis o entendimento e a aplicabilidade, ao mesmo tempo em que há perdas relacionadas à previsibilidade das modelagens (POTTER, 2009).

Vamos definir o volume de controle dado por um cubo de dimensões infinitesimais como parte representativa do todo e isso possibilitará o entendimento do comportamento difusivo-advectivo (Figura 1) (POTTER, 2009). Portanto, a partir desse conceito, toma-se a lei de conservação de massa expressa por:

$$\text{massa acumulada} = \text{entrada} - \text{saída} + \text{geração} - \text{degradação},$$

o que significa dizer que a taxa de acumulação de uma substância dentro de um volume de controle é igual ao escoamento líquido de massa da substância através das superfícies de controle mais a taxa de geração menos a taxa de degradação da substância dentro desse volume. Logo, o balanço de massa para o volume de controle, figura 1, é:

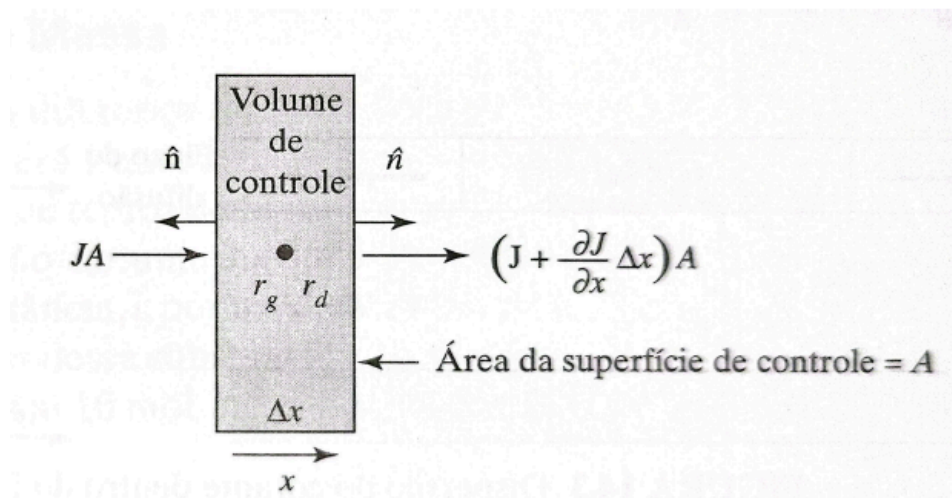
$$\frac{\partial C}{\partial t} A \Delta x = - \left[-JA + \left(J + \frac{\partial J}{\partial x} \Delta x \right) A \right] + r_g A \Delta x - r_d A \Delta x \quad (2.13)$$

Dividindo a Eq. (2.13) por $A\Delta x$, substituindo $J = uC - D\frac{\partial C}{\partial x}$, como os fatores responsáveis pelo transporte de massa, temos:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} &= - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right] + r_g - r_d \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} &= - u \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + r_g - r_d.\end{aligned}\quad (2.14)$$

A Eq. (2.14) modela o transporte de massa a partir do fenômeno difusivo-advectivo, e significa que a concentração em um dado instante é equivalente ao que foi transportado com a velocidade do fluido, mais o que foi difundido e o que foi geração ou degradação da substância. Além disso, essa equação pode apresentar infinitas soluções a depender das condições de controle empregadas, as quais serão discutidas no decorrer do presente trabalho.

Figura 1: Transferência de massa dentro de um volume de controle



Fonte: Potter (2009, p. 562).

2.2 Equações Diferenciais

As equações diferenciais são de interesse de grandes matemáticos e possuem importância fundamental para resolução de problemas enfrentados pela sociedade. Isaac Newton (1643-1727) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716) foram expoentes precursores que, durante o século XVII, contribuíram com a temática abordada por meio do estudo do

cálculo. Exemplificando, Newton identificou três formas para equações diferenciais de primeira ordem e desenvolveu um método de resolução para uma delas por meio de séries infinitas. Leibniz, por sua vez, foi o responsável pela notação $\frac{dy}{dx}$, assim como pelo sinal de integral. Além disso, também descobriu o método de separação de variáveis, a redução de equações homogêneas a equações separáveis e o procedimento para resolver equações lineares de primeira ordem (BOYCE et al., 2020).

Dentre os problemas passíveis de serem resolvidos por equações diferenciais, estão: movimento de fluidos, fluxo de corrente elétrica em circuitos, dissipação de calor em objetos sólidos, crescimento de populações, entre outros. Nesse sentido, as equações diferenciais estabelecem relações estruturadas nas quais as taxas de variação de determinados fenômenos são representadas por meio de derivadas (BOYCE et al., 2020). Em particular, segundo Zill e Cullen (2001, v.1), as equações diferenciais são problemas nos quais se busca determinar uma função desconhecida que satisfaça uma relação envolvendo essa função e uma ou mais de suas derivadas.

Dessa forma, Zill e Cullen (2001) definem:

“Uma equação que contém as derivadas ou diferenciais de uma ou mais variáveis dependentes, em relação a uma ou mais variáveis independentes, é chamada de equação diferencial (ED)” (ZILL & CULLEN, 2001, v. 1, p. 2).

Portanto, de maneira simplificada, para uma equação diferencial, da forma $\frac{dy}{dt} = f(t, y)$, a solução é uma função, $y = f(t)$, que satisfaz a igualdade estabelecida, tendo como variável independente t .

2.3 Classificação e Problema de Valor Inicial

As equações diferenciais podem ser classificadas a partir de três características: tipo, ordem e linearidade. Quanto à tipologia pode ser ordinária ou parcial. Quando ordinária apresenta apenas uma variável independente, quando parcial apresenta pelo menos duas variáveis independentes. Já em relação à ordem, a derivada de maior ordem na equação é a ordem da equação (ZILL & CULLEN, 2001). Por fim, uma equação diferencial de ordem n é considerada linear quando for da forma:

$$a_n(x) \frac{d^n y}{dx^n} + a_{n-1}(x) \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}} + \dots + a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = g(x), \quad (2.15)$$

onde a_j são funções da variável x para $0 \leq j \leq n$.

Dessa forma, observa-se que a potência de cada termo envolvendo a variável dependente é um; e que cada coeficiente depende apenas da variável independente, sendo que quando $g(x) = 0$, tem-se uma EDO homogênea (ZILL & CULLEN, 2001). Já para EDPs a linearidade segue os mesmos princípios (IVRII, 2026; EVANS, 1998):

- Linear: quando todos os coeficientes dependem apenas das variáveis independentes ou são constantes; e a potência de cada termo envolvendo a variável dependente é um;
- Semilinear: quando os coeficientes das maiores derivadas dependem das variáveis independentes e a equivalente função $g(x)$ na Eq. (2.15) depender da própria solução e das derivadas de ordem menor;
- Quasilinear: quando tantos os coeficientes quanto a equivalente da função $g(x)$ na Eq. (2.15) dependem da própria solução e das derivadas de ordem menor.

Quando não se encaixar em nenhuma das premissas apontadas acima, então a equação diferencial é classificada como não linear.

As equações diferenciais geralmente admitem uma infinidade de soluções pois são inúmeros os valores possíveis para as constantes arbitrárias que surgem decorrente do processo de integração. Para selecionar uma solução de interesse é necessário determinar um ponto que pertença a função. O conjunto condição inicial e equação diferencial é denominado problema de valor inicial (BOYCE et al. 2020; ZILL & CULLEN, 2001). A existência e unicidade da solução obtida por meio do problema de valor inicial é garantida pelo Teorema de Picard (ZILL & CULLEN, 2001).

Como exemplo disso, tem-se a equação diferencial que modela a interação entre a população de ratos do campo e corujas, abordado em (BOYCE et al., 2020), expressa por:

$$\frac{dp}{dt} = 0,5p - 450, \quad (2.16)$$

onde p é a população de ratos do campo no instante t .

A solução geral para esse modelo é:

$$p(t) = 900 + ce^{t/2}. \quad (2.17)$$

A função (2.17) representa uma família de curvas, cujas características dependem dos valores da constante arbitrária c . Ao aplicar a condição em que no instante $t = 0$ a população

de ratos do campo equivale a 850 (ponto (0, 850)), determina-se $c = 50$, e esse conjunto caracteriza um problema como de valor inicial.

2.4 Transformadas e Funções

As transformadas são ferramentas matemáticas que podem ser utilizadas para a mudança de uma variável, o que pode facilitar a resolução de problemas quando esses apresentam relativa complexidade nas variáveis estabelecidas inicialmente. Além disso, nesta seção também estão destacadas as funções de maior relevância necessárias para a resolução das equações diferenciais presente em Potter (2009), tabela 1, objetivo deste trabalho.

2.4.1 Transformada de Laplace

A aplicação de uma integral em relação a uma variável de uma função de duas variáveis irá resultar em uma função dependente apenas da variável em que não foi aplicada a integral. Assim, “para a integral definida como $\int_a^b K(s, t)f(t)dt$ transforma uma função $f(t)$ em uma função da variável s ” (ZILL & CULLEN, 2001, p. 351, v. 1). Dessa forma, a definição da Transformada de Laplace de uma função f é dada por:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt; \quad (2.18)$$

É chamada de transformada de Laplace de f desde que a integral convirja. Essa transformação também pode ser aplicada para funções de duas variáveis, tais como indicado em (ZILL & CULLEN, 2001, v. 2, p. 318):

$$\mathcal{L}\{u(x, t)\} = \int_0^{\infty} e^{-st} u(x, t) dt = U(x, s), \quad (2.19)$$

onde a variável independente x foi tratada como parâmetro ou constante.

Se $f(t)$, $f'(t)$, ..., $f^{(n-1)}(t)$ forem contínuas em $[0, \infty)$, de ordem exponencial, e se $f^{(n)}(t)$ for contínua por partes em $[0, \infty)$, então a transformada de Laplace de uma derivada segundo Zill e Cullen (2001, p. 385, v. 1), é definida como:

$$\mathcal{L}\{f^{(n)}(t)\} = s^n F(s) - s^{n-1}f(0) - s^{n-2}f'(0) - \dots - f^{(n-1)}(0), \quad (2.20)$$

onde $F(s) = \mathcal{L}\{f(t)\}$. Em particular, a transformada de Laplace para as derivadas de primeira e segunda ordem da função de duas variáveis independentes $u(x, t)$ é dada por:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial u}{\partial t}\right\} = s\mathcal{L}\{u(x, t)\} - u(x, 0); \quad (2.21)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right\} = s^2\mathcal{L}\{u(x, t)\} - su(x, 0) - \frac{\partial}{\partial t}u(x, 0). \quad (2.22)$$

2.4.2 Transformada de Fourier

A transformada de Fourier, como indicado em (ZILL & CULLEN, 2001, v. 2, p. 336) é definida como:

$$\mathcal{F}\{f(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{i\omega x} dx = F(\omega). \quad (2.23)$$

Já a transformada inversa de Fourier é dado por:

$$\mathcal{F}^{-1}\{f(\omega)\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{-i\omega x} d\omega = f(x). \quad (2.24)$$

Sejam f contínua e absolutamente integrável em $(-\infty, \infty)$, f' contínua em $(-\infty, \infty)$ e $f''(x)$ contínua por partes em qualquer intervalo finito. Se $f(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm \infty$ e $f'(x) \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm \infty$, então:

$$\mathcal{F}\{f'(x)\} = -i\omega \mathcal{F}\{f(x)\}, \quad (2.25)$$

$$\mathcal{F}\{f''(x)\} = -\omega^2 \mathcal{F}\{f(x)\}. \quad (2.26)$$

2.4.3 Função Erro

A função erro, denotada por $\text{erf}(x)$, é (ZILL & CULLEN, 2001, v. 2, p. 316):

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du. \quad (2.27)$$

A função erro complementar se define em termos da função erro:

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x). \quad (2.28)$$

2.4.4 Função Delta de Dirac

A “função” Delta de Dirac é definida como (ZILL & CULLEN, 2001, v. 1, p. 412):

$$\delta_a(t - t_0) = \left\{ 0, 0 \leq t \leq t_0 - a; \frac{1}{2a}, t_0 - a \leq t \leq t_0 + a; 0, t \geq t_0 + a \right\}. \quad (2.29)$$

Uma propriedade a ser destacada para essa “função” é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t_0) f(t) dt = f(t_0). \quad (2.30)$$

A aplicação das transformadas de Laplace e Fourier na “função” Delta de Dirac, considerando a propriedade destacada (Eq. (2.26)) para $t_0 = 0$, resulta em:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\{\delta(t - t_0)\} &= \int_0^{\infty} e^{-st} \delta(t - t_0) dt \Rightarrow \mathcal{L}\{\delta(t - t_0)\} = e^{-st_0} \Rightarrow \\ \mathcal{L}\{\delta(t - t_0)\} &= 1. \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\{\delta(t - t_0)\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - t_0) e^{i\omega t} dt \Rightarrow \mathcal{F}\{\delta(t - t_0)\} = e^{-i\omega t_0} \Rightarrow \\ \Rightarrow \mathcal{F}\{\delta(t - t_0)\} &= 1. \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.4.5 Função Degrau Unitário

Funções do tipo degrau unitário são utilizadas para descrever fenômenos em que existe dualidade do tipo “estar ligado” ou “estar desligado”, como em casos de fluxo de corrente em

circuitos elétricos (ZILL & CULLEN, 2001 & BOYCE et al. 2020). Dessa forma, essa função, também conhecida como função de Heaviside, às vezes associadas a pulsos retangulares, pode ser definida como:

$$U_c(t - a) = \{0, 0 \leq t < a \text{ e } 1, t \geq a\}. \quad (2.33)$$

Disso temos que a função é igual a 1 para valores de t em um dado intervalo e 0 para valores de t em outro dado intervalo.

2.5 Aplicabilidade Ambiental

As diferentes atividades humanas que impactam a qualidade e a disponibilidade da água estão diretamente relacionadas com o nível de desenvolvimento econômico dos países, sendo que em países de alta renda o uso de água com o setor industrial é expressivamente mais relevante em comparação com países de baixa renda, onde o uso com o setor agrícola pode chegar a 90% do consumo de água (UN, 2024). Nessa mesma direção, as características da poluição dos recursos hídricos também são distintas, onde em países do primeiro grupo a poluição dos corpos hídricos se configura pela maior complexidade de químicos tendo em vista a multiplicidade das atividades industriais. Já no segundo grupo, os problemas estão centrados na precariedade dos sistemas de tratamento de água (UN, 2024). Em suma, todas as atividades humanas dependem, direta ou indiretamente, de água, sendo que, na maioria delas, em um certo grau de qualidade. Assim, a segurança hídrica, indubitavelmente, é um fator decisivo para manutenção da prosperidade e da paz em um visão relacionada ao atendimento das necessidades básicas, como produção de comida, segurança energética e integridade do meio (UN, 2024).

Na revisão realizada por Feng e colaboradores (FENG et al., 2023) são indicados os principais tipos de contaminantes em estudo, métodos de identificação, impactos ambientais e impactos na saúde. O fator comum que envolve a variedade de químicos apresentados é o meio majoritariamente aquático em que esses constituintes se concentram e são transportados decorrentes das mais diversas atividades humanas. A lista de contaminantes classificados como Contaminantes de Preocupação Emergentes (Contaminants of Emerging Concern - CECs) é extensa e pode ser organizada por grupos como: Poluentes Orgânicos Persistentes (Persistent Organic Pollutants - POPs), disruptores endócrinos, antibióticos e microplásticos (FENG et al. 2023; SAUVÉ & DESROSIERS, 2014). O conhecimento sobre os impactos

relativos à presença da maioria desses constituintes no meio é insatisfatório, entretanto muitas evidências foram observadas dos riscos para saúde relacionadas aos mais diversos químicos (FENG et al, 2023; SAUVÉ & DESROSIERS, 2014).

Em continuidade, tendo em vista que o tratamento de água convencional atual não se configura suficiente para remoção de boa parte dos CECs, faz-se essencial a investigação e a previsão do comportamento desses químicos no meio aquático, pois o consumo de produtos de água contaminada é um dos caminhos mais significativo para a exposição humana (FENG et al, 2023). Ademais, as principais fontes dos químicos são: esgoto industrial, doméstico, hospitalar, laboratorial e relacionados à agricultura, podendo entrar nos ambientes aquáticos através de fontes pontuais, como por exemplo plantas de tratamento associada a um determinado empreendimento, ou fontes difusas como escoamento superficial em áreas de agricultura.

Em (O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975) é apresentada uma análise da aplicação do modelo de difusão-advecção para canais de irrigação quando herbicida é adicionado. A importância indicada pelos autores está na previsibilidade dos métodos analíticos para indicar como o herbicida irá se comportar para o seu fim específico, tendo em vista que a água, após utilizada para irrigação, será utilizada para abastecimento público e, eventualmente, retornará aos ambientes naturais, sendo essencial prever e monitorar o comportamento do herbicida durante e após o canal de irrigação.

Por sua vez, Equer (2017) utilizou o modelo para prever o comportamento de rejeitos do rompimento de uma barragem controlada pela empresa brasileira Samarco. O vazamento ocorreu em 05 de novembro de 2015, com estimativa de 32 milhões de metros cúbicos de rejeito chegando ao Rio Doce, que passa pela cidade de Colatina/ES, onde a modelagem foi aplicada. Além disso, nesse trabalho também são indicados outros trabalhos envolvendo a modelagem da emissão de óleos em trecho do rio Paraíba do Sul, simulação computacional da poluição por esgoto na Baía de Buenaventura no sudoeste do Pacífico Colombiano, a modelagem de mercúrio metálico decorrente da mineração de ouro aluvionar em rio de características amazônicas, entre outros.

Por conseguinte, em (KREFT & ZUBER, 1978) são indicados contextos em que a equação de difusão-advecção foi aplicada, como, por exemplo, para fluxo laminar com difusão lateral e fluxo turbulento em linhas de encanamento; para o movimento de um constituinte em meio poroso; para fluxo em vasos (vessels) e para o transporte de sedimentos. Além disso, nesse mesmo trabalho, a modelagem é utilizada para prever o comportamento do fluxo de determinado constituinte para interpretação e tomada de decisão, onde as maiores

dificuldades indicadas são: escolher os valores iniciais (condições de contorno) e encontrar uma solução para essa condição inicial.

Por fim, Perin e Quadros (2021) utilizaram a equação de difusão-advecção para modelar o transporte de mercúrio em um ambiente aquático hipotético no qual se obteve a solução numérica da equação e essa foi comparada com a equação obtida por Ogata e Banks (1961), como forma de validar o resultado obtido. Além disso, em (FERNANDES, 2025), utilizou-se o mesmo método de resolução numérica (Método das Diferenças Finitas - MDF), para a equação mencionada, onde, por meio de um programa desenvolvido pela autora, foi possível observar o comportamento do poluente a partir de modificações nas variáveis de entrada. Em ambos os trabalhos mencionados neste parágrafo, os responsáveis pelos trabalhos concluem que a modelagem possibilita uma compreensão qualitativa do fenômeno de transporte de contaminantes na água.

Portanto, tendo em vista a variedade de contextos onde a equação de difusão e advecção pode ser aplicada, considera-se relevante a integração de perspectivas e análises, para incorporar condições em que elas podem vir a ser aplicadas. Diante disso, na próxima seção, 3, estão descritas as equações e as condições de contorno e valor inicial associadas, assim como a metodologia desenvolvida para se atingir o objetivo do presente trabalho.

3 METODOLOGIA

3.1 Mecânica dos Fluidos: equações a serem estudadas

As equações diferenciais que descrevem o processo difusivo-advectivo objeto de análise do presente estudo estão presentes no livro “Mecânica dos Fluidos” de Merle C. Potter, (2009), ver tabela 1. São equações diferenciais ordinária e parciais, caracterizadas como de segunda ordem e lineares, que descrevem o transporte de uma substância gasosa ou líquida em um meio líquido em uma única dimensão.

A classificação das equações diferenciais consiste na identificação dos elementos que as compõem. A partir disso é possível determinar métodos apropriados para solucioná-las, assim como descrever suas propriedades. Ademais, essas mesmas características oferecem a oportunidade de indicar o comportamento das possíveis soluções e quais delas descrevem melhor o problema que se busca compreender.

Tabela 1 - Equações diferenciais, suas respectivas condições de contorno e caracterizações.

Equações	Condições iniciais e de contorno	Caracterização
$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$	Entrada Instantânea em $x=0$ $C = \frac{M}{A} \delta(x), x = 0, t = 0;$ $C = 0, x = \infty, t > 0;$ $\frac{\partial C}{\partial x} = 0, x = 0, t > 0.$ Entrada retangular em $x=0$ $C = 0, x \geq 0, t = 0;$ $C = C_0, x = 0, \xi > t > 0;$ $C = 0, x = 0, t > \xi.$	EDP, segunda ordem, linear e homogênea. Modela o fenômeno difusivo-advectivo para um sistema não estacionário e uma substância não conservativa, ou seja, o fator de degradação k é diferente de zero.
$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$	Uma concentração constante C_0 é mantida em $x=0$; $C = 0, x > 0, t = 0;$ $C = 0, x = \infty, t \geq 0;$	EDP, segunda ordem, linear e homogênea. Modela o fenômeno difusivo-advectivo para um sistema não estacionário e uma

	$C = C_0, x = 0, t \geq 0.$	substância conservativa, ou seja, k é igual a zero.
$K \frac{d^2C}{dx^2} - U \frac{dC}{dx} - kC = 0$	Entrada Contínua de concentração em C_0 em $x=0$; $C = C_0$ em $x = 0$; $C = 0, x = \pm \infty$;	EDO, segunda ordem, linear e homogênea. Simulação do transporte difusivo-advectivo para um sistema em estado estacionário e para substância não conservativa, ou seja, o fator de degradação k é diferente de zero.

Fonte: Modificado de Potter (p.582, 2009).

3.2 Principais Referenciais Teóricos

As principais fontes bibliográficas que possibilitaram o entendimento e a resolução das equações diferenciais apresentadas na seção anterior são (POTTER, 2009; BOYCE et al. 2020; ZILL & CULLEN, 2001; CHAPRA, 2008; OGATA & BANKS, 1961; O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975). Essas referências abordam de maneira geral metodologias para resolução de equações diferenciais e principalmente suas possíveis aplicações, assim como estudos do comportamento dessas representações matemáticas considerando seu escopo, domínio e limitações.

As principais fontes bibliográficas que possibilitaram o entendimento e a resolução das equações diferenciais apresentadas na seção anterior são (POTTER, 2009; BOYCE et al. 2020; ZILL & CULLEN, 2001; CHAPRA, 2008; OGATA & BANKS, 1961; O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975). Essas referências abordam de maneira geral metodologias para resolução de equações diferenciais e principalmente suas possíveis aplicações, assim como estudos do comportamento dessas representações matemáticas considerando seu escopo, domínio e limitações.

Em (POTTER, 2009; CHAPRA, 2008) o modelo matemático é apresentado de forma progressiva, a partir de conceitos mais simples e particulares, até o modelo difusivo-advectivo propriamente dito, com exemplificações de problemas práticos e aplicações. Em (CHAPRA, 2008), a equação de difusão-advectação é utilizada para modelar um reator do tipo Mistura de

Fluxo (Mixed-Flow Reactor - MFR). As obras de Boyce et al. (2020) e Zill e Cullen (2001) fornecem o embasamento teórico matemático necessário para a resolução das equações diferenciais apresentadas nesta pesquisa. Através dessas referências, foi possível a caracterização das equações e a conceitualização dos métodos de resolução utilizados. Por fim, pela semelhança dos métodos de resolução aplicados em (OGATA & BANKS, 1961; O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975), esses foram utilizados como exemplos, pois, apesar de apresentarem condições de contorno diferentes das indicadas por Potter (2009, p.582), apresentam semelhanças significativas que foram identificadas como assertivas para o processo resolutivo das equações.

3.3 Metodologia de Pesquisa

Esta pesquisa caracteriza-se como exploratória, conforme as definições de Gil (2008) e Fontelles et al. (2009), uma vez que visa proporcionar maior familiaridade com o objeto de estudo e o aprimoramento de ideias sobre o problema investigado. No presente trabalho, tal abordagem justifica-se pela necessidade de compreender a modelagem matemática aplicada ao fenômeno de difusão-advecção. Quanto aos procedimentos técnicos, adotou-se a pesquisa bibliográfica. Este método permitiu, por meio da análise de material especializado, o desenvolvimento do referencial teórico, a investigação de técnicas resolutivas análogas e a interpretação dos fundamentos físicos dos modelos estudados.

As equações da tabela 1 são apresentadas em (POTTER, 2009) sem o devido desenvolvimento analítico e explicação dos cenários, o que dificulta seu entendimento e aplicação. Esse fato configura a principal motivação para a elaboração do presente trabalho.

A pesquisa bibliográfica adotada foi iniciada a partir da conceituação do fenômeno de difusão-advecção apresentada em (POTTER, 2009) e, a partir da necessidade do autor pela busca de novas fontes que abordassem o tema, utilizou-se a inteligência artificial (Gemini) como ferramenta de busca, na qual as obras encontradas foram validadas e selecionadas em bases de dados acadêmicos, que oportunizaram a resolução das equações diferenciais objeto de estudo do presente trabalho.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

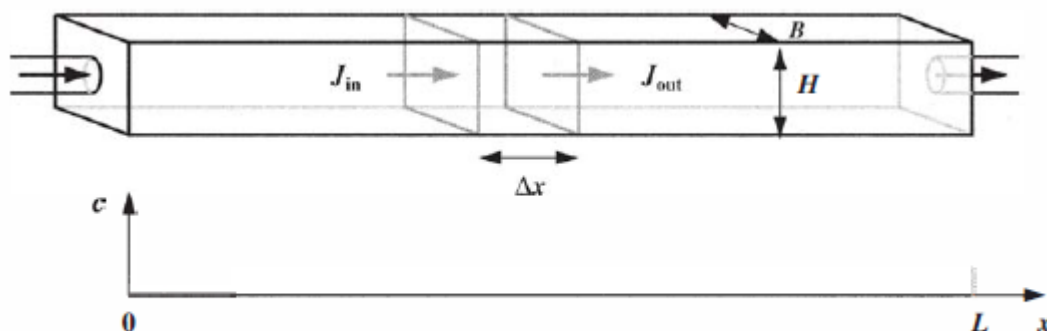
Nesta seção optou-se por desenvolver as equações a partir da contextualização detalhada em Chapra (2008), tendo em vista seu viés de aplicabilidade. Dessa forma, as equações discutidas neste trabalho, tabela 1, estão presentes em Potter (2009), assim como em Chapra (2008), onde nesse elas são desenvolvidas como resultado da modelagem de reatores do tipo fluxo contínuo. Assim, em um reator ideal com fluxo contínuo, caracterizado como uma bacia retangular alongada, considerando que tanto lateralmente y , quanto verticalmente z a mistura é efetiva (“well mixed”), contendo apenas variações na direção longitudinal x , o balanço de massa, partindo de um volume de controle com um elemento diferencial Δx , é dado por (Figura 2, Eq. (4.10)):

$$\Delta V \frac{\partial C}{\partial t} = J_{in} A_c - J_{out} A_c \pm \text{reação}; \quad (4.10)$$

Onde:

- $\Delta V = A_c \Delta x$: volume de controle (L^3);
- C : concentração da substância (ML^{-3});
- $A_c = B * H$: a área da seção transversal do reator perpendicular ao fluxo J (L^2);
- B : largura do canal (L);
- H : altura do canal (L);
- J_{in} e J_{out} : fluxo de massa que entra e sai do volume de controle decorrente do transporte, respectivamente ($ML^{-2}T^{-1}$);
- reação = ganho ou perda de massa do elemento por meio de reações ao longo do canal (MT^{-1}).

Figura 2: Reator alongado retangular

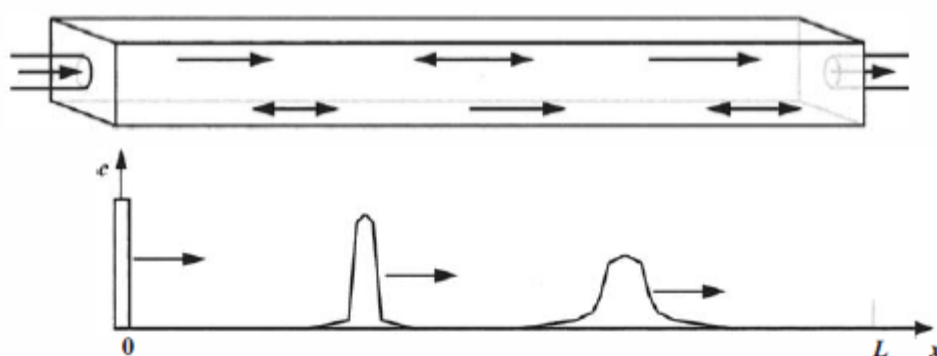


Fonte: Chapra (2008, p. 157).

Disso, entende-se que a quantidade de massa presente no volume de controle em um dado instante, $\Delta V \frac{\partial C}{\partial t}$, é igual a quantidade de matéria que entra no volume de controle pela seção transversal perpendicular ao fluxo nesse instante, J_{in} , menos a quantidade de matéria que sai, J_{out} , mais ou menos as reações de degradação ou geração que podem ocorrer ao longo de Δx .

Para os reatores com mistura do fluxo (Mixed-Flow Reactor - MFR) tanto a difusão quanto a advecção são importantes para o transporte de uma dada substância, sendo que uma vez injetada na extremidade de entrada, essa substância será difundida enquanto passa pelo reator, com isso as concentrações ao longo de x irão variar de acordo com o representado na figura 3.

Figura 3: Reator Mistura de Fluxo (Mixed-Flow Reactor - MFR)



Fonte: Chapra (2008, p. 160).

Para esse tipo de reator, o fluxo de entrada é definido como:

$$J_{in} = UC - K \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (4.11)$$

O primeiro termo do lado direito da Eq. (4.11) representa a advecção, que consiste no transporte de matéria por meio da velocidade constante U do fluido. Já o segundo termo representa a difusão, primeira lei de Fick, que ocorre a partir do gradiente de concentração contido no fluido. Vale ressaltar que o coeficiente de difusão utilizado em Chapra (2008) é E que representa a difusividade turbulenta, também constante. Neste trabalho optou-se por preservar a notação K contida em Potter (2009), que pode representar tanto a difusão molecular, quanto a difusão turbulenta.

O fluxo de saída é dado por:

$$J_{out} = U\left(C + \frac{\partial C}{\partial x}\Delta x\right) - K\left[\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)\Delta x\right]. \quad (4.12)$$

Já para a Eq. (4.12), consideramos o fluxo de massa da substância por meio da área da seção transversal de saída do volume de controle, sendo que a advecção nessa posição foi expressa pela advecção na posição inicial mais ao longo do volume de controle considerado. Esse princípio se repete para a difusão, ou seja, a difusão na saída é equivalente a difusão na entrada somada a que ocorreu ao longo do volume de controle.

Substituindo (4.11) e (4.12) em (4.10), temos:

$$\begin{aligned} \Delta V \frac{\partial C}{\partial t} &= UA_c C - U\left(C + \frac{\partial C}{\partial x}\Delta x\right)A_c - K\frac{\partial C}{\partial x}A_c + K\left[\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)\Delta x\right]A_c - \kappa\Delta VC \Rightarrow \\ \Rightarrow \Delta V \frac{\partial C}{\partial t} &= -U\frac{\partial C}{\partial x}\Delta x A_c + K\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\Delta x A_c - \kappa\Delta VC. \end{aligned} \quad (4.13)$$

No modelo proposto por Chapra (2008), considera-se exclusivamente a reação de degradação, especificamente o decaimento de primeira ordem (quando $n = 1$ na equação 2.12). Esse mecanismo permite representar fenômenos nos quais a degradação temporal segue um comportamento exponencial. Dividindo a Eq. (4.13) por $\Delta V = A_c \Delta x$ e tomando o limite quando $\Delta x \rightarrow 0$, temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + K\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \kappa C. \quad (4.14)$$

As equações diferenciais discutidas nas subseções seguintes estão caracterizadas por diferentes condições de contorno que representam cenários específicos e que, de forma geral, condicionam suas respectivas resoluções.

4.1 Equação Diferencial Ordinária Linear de Segunda Ordem Homogênea

Quando o sistema está em estado estacionário (“steady-state”) não há variação na concentração em um dado ponto ao longo do tempo, ou seja, $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$. Dessa forma, a Eq. (4.14) resulta em:

$$K \frac{d^2 C}{dx^2} - U \frac{dC}{dx} - \kappa C = 0. \quad (4.15)$$

As condições inicial e de contorno associadas à equação são:

Entrada contínua de concentração:

- $C = C_0$ em $x = 0$;
- $C = 0$ para $x = \pm \infty$.

A Eq. (4.15) é uma EDO de segunda ordem, linear e homogêneo. Dessa forma, a partir dessas características, estamos considerando um modelo para um Mixed Flow Reactor - MFR, cuja entrada de uma substância é contínua a uma concentração constante, que essa substância é degradada ao longo do comprimento da bacia retangular e que a uma distância suficientemente grande da entrada, a concentração da substância é considerada nula. Para a resolução, inicialmente foi considerado:

$$C(x) = e^{\lambda x}, \quad (4.16)$$

onde λ é uma constante real positiva.

Assim:

$$\frac{dC(x)}{dx} = \frac{d(e^{\lambda x})}{dx} = \lambda e^{\lambda x}, \quad (4.17)$$

$$\frac{d^2 C(x)}{dx^2} = \frac{d(\lambda e^{\lambda x})}{dx} = \lambda^2 e^{\lambda x}. \quad (4.18)$$

Substituindo (4.16), (4.17) e (4.18) em (4.15), temos:

$$K\lambda^2 e^{\lambda x} - U\lambda e^{\lambda x} - \kappa e^{\lambda x} = 0 \Rightarrow e^{\lambda x}(K\lambda^2 - U\lambda - \kappa) = 0, \text{ como a função exponencial } f(x) = e^{\lambda x} > 0, \forall x \in R, \text{ logo:}$$

$$K\lambda^2 - U\lambda - \kappa = 0. \quad (4.19)$$

Aplicando Bhaskara na equação (4.19), temos:

$$\lambda = \frac{-(-U) \pm \sqrt{(-U)^2 - 4 * K * (-\kappa)}}{2 * K} = \frac{U \pm \sqrt{U^2 + 4K\kappa}}{2K},$$

dessa forma, os valores possíveis de λ são:

$$\lambda_1 = \frac{U + \sqrt{U^2 + 4K\kappa}}{2K},$$

$$\lambda_2 = \frac{U - \sqrt{U^2 + 4K\kappa}}{2K}.$$

Portanto, a solução geral para a Eq. (4.15) apresentada anteriormente é $C(x) = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x}$, sendo A e B valores reais determinados a partir das condições de contorno. Logo, dando continuidade, para verificar as possibilidades de valores para A e B , devemos considerar os valores de contorno que determinam especificamente uma das possíveis soluções para a equação característica previamente obtida.

De acordo com as determinações, a entrada de substância é contínua em $x = 0$. Além disso, a concentração tende a zero quando $x = \pm \infty$. Assim:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} C(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} [Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x}].$$

Diante disso, foi selecionada a solução de interesse, ou seja, a raiz negativa, quando $U < \sqrt{U^2 + 4K\kappa}$, o que implica que um dos coeficientes, A , precisa ser igual a zero (O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975). Logo:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} C(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} Be^{\lambda_2 x} = 0 \text{ e } C(0) = Be^{\lambda_2 0} \Rightarrow C_0 = B.$$

Portanto, uma das possíveis soluções para essa equação é:

$$C(x) = C_0 e^{\lambda_2 x} = C_0 e^{\frac{U - \sqrt{U^2 + 4K\kappa}}{2K} x} = C_0 e^{(\frac{U}{2K} (1 - \sqrt{1 + \frac{4K\kappa}{U^2}})) x}, \quad x > 0. \quad (4.20)$$

Vale ressaltar que a resolução é análoga para valores de x menores que zero.

4.2 Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Linear e Homogênea para uma substância conservativa

Dando continuidade às equações, para o presente caso, a substância foi considerada conservativa, ou seja, não degrada ou decai ao longo do reator, o que implica em $\kappa = 0$. Além disso, o sistema está em estado transiente, logo há variação na concentração em um dado ponto ao longo do tempo. Assim a Eq. (4.14) resulta em:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (4.21)$$

A Eq. (4.21) é caracterizada como uma equação diferencial parcial de segunda ordem linear e homogênea cujas condições iniciais e de contorno são:

- $C = 0$ em $x > 0$ e $t = 0$;
- $C = 0$ em $x = \infty$ e $t > 0$;
- $C = C_0$ em $x = 0$ e $t > 0$

A resolução da Eq. (4.14) foi detalhada em (O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975), no qual ela foi analisada e resolvida analiticamente. Como a Eq. (4.21) é uma simplificação da Eq. (4.14), a resolução aqui empregada ocorreu de forma semelhante à dos autores supracitados. Dessa forma, inicialmente, deve-se isolar a derivada de C em relação a t e aplicar a transformada de Laplace em relação à variável t dos dois lados da equação. Assim, temos:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\} = \mathcal{L}\left\{-U \frac{\partial C}{\partial x}\right\} + \mathcal{L}\left\{K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right\} \text{ e como} \quad (4.22)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\} = s\bar{C} - C(x, 0) = s\bar{C}, \text{ pois } C(x, 0) = 0 \text{ e} \quad (4.23)$$

$$\mathcal{L}\left\{-U \frac{\partial C}{\partial x}\right\} + \mathcal{L}\left\{K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right\} = -U \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + K \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2}. \quad (4.24)$$

A notação aqui utilizada para indicar a transformada de Laplace da função $C(x, t)$ é $\bar{C}(x, s)$. Essa notação também foi utilizada por O'loughlin e Bowmer (1975). Além disso, observa-se a aplicação da propriedade da transformada da derivada, equação (2.21), juntamente com a condição inicial $C = 0$ em $x > 0$ e $t = 0$, que resulta em $C(x, 0) = 0$.

Como a transformada aplicada é em relação a t , a variável x é entendida como uma constante e como a transformada de Laplace é uma integral, a derivada em relação a x pode ser aplicada após a transformada sem alteração no resultado.

Assim, substituindo (4.23) e (4.24) em (4.22), temos:

$$K \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} - U \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - s \bar{C} = 0 \quad (4.25)$$

A partir disso, a EDP foi transformada em uma EDO de segunda ordem, linear e homogênea, passível de resolução. Dessa forma, podemos chamar:

$$\bar{C} = e^{px}, \quad (4.26)$$

$$\frac{d\bar{C}}{dx} = p e^{px}, \quad (4.27)$$

$$\frac{d^2 \bar{C}}{dx^2} = p^2 e^{px}. \quad (4.28)$$

Substituindo (4.26), (4.27) e (4.28) em (4.25), obtemos:

$$K p^2 e^{px} - U p e^{px} - s e^{px} = 0 \Rightarrow e^{px} (K p^2 - U p - s) = 0 \Rightarrow K p^2 - U p - s = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow p_{1;2} = \frac{U \pm \sqrt{U^2 + 4Ks}}{2K}, \text{ com } p_1 > 0 \text{ e } p_2 < 0.$$

Disso, temos a seguinte solução geral:

$$\bar{C}(x, s) = A e^{p_1 x} + B e^{p_2 x}.$$

Tendo em vista as condições de contorno, devemos aplicar o seguinte limite:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \bar{C}(x, s) = \lim_{x \rightarrow \infty} (A e^{p_1 x} + B e^{p_2 x}) = 0. \quad (4.29)$$

Para que a afirmação feita em (4.29) seja verdadeira, A deve ser igual a zero, pois quando x tender ao infinito, $e^{p_1 x}$ tende ao infinito, o que é resolvido com a atribuição de zero

a A. Já $e^{p_2 x}$ tende a zero, desde que $U < \sqrt{U^2 + 4Ks}$, o que é sempre verdade, independente do valor de B . Diante disso, temos:

$$\overline{C(x, s)} = B e^{p_2 x}. \quad (4.30)$$

Por fim, considerando a última condição de contorno, $C = C_0$ em $x = 0$ e $t > 0$, temos:

$$C(0, t) = C_0. \quad (4.31)$$

Aplicando a transformada de Laplace em relação a t dos dois lados da Eq. (4.31), resulta em:

$$\mathcal{L}\{C(0, t)\} = \mathcal{L}\{C_0\} \Rightarrow \overline{C(0, s)} = \frac{C_0}{s}. \quad (4.32)$$

Portanto, igualando (4.30) e (4.32) quando $x = 0$, resulta em:

$$B = \frac{C_0}{s}. \quad (4.33)$$

Em seguida, substituindo (4.33) em (4.30), temos:

$$\overline{C(x, s)} = C_0 \exp(Ux/2K) \left[\frac{1}{s} \exp\left(\frac{-x}{\sqrt{K}} \sqrt{s + \frac{U^2}{4K}}\right) \right]. \quad (4.34)$$

A transformada inversa de Laplace para uma função semelhante a (4.34) está presente em O'loughlin e Bowmer (1975). Assim, a generalização da solução apresentada pelos autores pode ser expressa por:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{s} \exp(-a\sqrt{s+b})\right\} &= \\ &= \frac{1}{2} \left[e^{-a\sqrt{b}} \operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}} - \sqrt{bt}\right) + e^{a\sqrt{b}} \operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}} + \sqrt{bt}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Dessa forma, para (4.34), temos:

$$a = \frac{x}{\sqrt{K}}, \quad (4.36)$$

$$b = \frac{U^2}{4K}, \quad (4.37)$$

$$\sqrt{b} = \sqrt{\frac{U^2}{4K}} \Rightarrow \sqrt{b} = \frac{U}{2\sqrt{K}}, \quad (4.38)$$

$$\frac{a}{2\sqrt{t}} = \frac{x}{\sqrt{K}} \frac{1}{2\sqrt{t}} = \frac{x}{2\sqrt{Kt}}, \quad (4.39)$$

$$a\sqrt{b} = \frac{x}{\sqrt{K}} \frac{U}{2\sqrt{K}} \Rightarrow a\sqrt{b} = \frac{xU}{2K}, \quad (4.40)$$

$$\sqrt{bt} = \frac{U}{2\sqrt{K}} \sqrt{t} \Rightarrow \sqrt{bt} = \frac{U\sqrt{t}}{2\sqrt{K}}, \quad (4.41)$$

$$\frac{a}{2\sqrt{t}} - \sqrt{bt} = \frac{x-Ut}{2\sqrt{Kt}}, \quad (4.42)$$

$$\frac{a}{2\sqrt{t}} + \sqrt{bt} = \frac{x+Ut}{2\sqrt{Kt}}. \quad (4.43)$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace em relação a t em (4.34) e substituindo as equações (4.40), (4.42) e (4.43), temos:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{\overline{C(x, s)}\} &= C_0 \exp(Ux/2K) \mathcal{L}^{-1}\left\{\left[\frac{1}{s} \exp\left(\frac{-x}{\sqrt{K}} \sqrt{s + \frac{U^2}{4K}}\right)\right]\right\} \Rightarrow \\ \Rightarrow C(x, t) &= \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{x-Ut}{2\sqrt{Kt}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{K}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+Ut}{2\sqrt{Kt}}\right) \right], x > 0, t > 0. \end{aligned} \quad (4.44)$$

4.3 Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Linear Homogênea: pulso e interrupção.

Como dito anteriormente, a resolução da EDP (4.14), considerando uma substância não conservativa e um sistema não estacionário, está detalhada em O'loughlin e Bowmer (1975). Entretanto, tendo em vista as condições de contorno específicas indicadas em Potter (2009), faz-se necessário buscar diferentes técnicas para embarcar essas condições de contorno e essas soluções estão detalhadas nas subseções a seguir.

4.3.1 Condição de Contorno: pulso unitário

Uma das condições de contorno presente em Potter (2009) para a Eq. (4.14) é:

Entrada instantânea em $x = 0$:

- $C = \frac{M}{A}\delta(x)$, $x = 0$, $t = 0$;
- $C = 0$, $x = \infty$, $t > 0$;
- $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$, $x = 0$, $t > 0$, essa condição não foi utilizada nesta solução. Em

Potter (2009) essa condição se aplica para casos particulares em que a velocidade é nula ou o coeficiente de degradação é nulo.

Dando continuidade, iniciamos considerando a seguinte hipótese, também aplicada em (OGATA & BANKS, 1961):

$$C(x, t) = \Psi(x, t)e^{\alpha x - \beta t}, \quad (4.45)$$

onde α e β são constantes a serem determinadas adiante. Inicialmente, calculam-se as derivadas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= \frac{\partial(\Psi e^{\alpha x - \beta t})}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} = \Psi e^{\alpha x - \beta t}(-\beta) + e^{\alpha x - \beta t} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} &= \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \beta \Psi \right) e^{\alpha x - \beta t}, \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial x} &= \frac{\partial(\Psi e^{\alpha x - \beta t})}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial x} = \Psi e^{\alpha x - \beta t}(\alpha) + e^{\alpha x - \beta t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial x} &= \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha \Psi \right) e^{\alpha x - \beta t}, \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} &= \frac{\partial \left(\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha \Psi \right) e^{\alpha x - \beta t} \right)}{\partial x} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} &= \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha \Psi \right) e^{\alpha x - \beta t}(\alpha) + e^{\alpha x - \beta t} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\alpha \partial \Psi}{\partial x} \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} &= \left(\left(\frac{\alpha \partial \Psi}{\partial x} + \alpha^2 \Psi \right) + \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\alpha \partial \Psi}{\partial x} \right) \right) e^{\alpha x - \beta t} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} &= \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2\alpha \partial \Psi}{\partial x} + \alpha^2 \Psi \right) e^{\alpha x - \beta t}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Para os passos seguintes, adotou-se a notação Ψ_x para indicar a derivada primeira da função $\Psi(x, t)$ em relação a x , análogo para as demais derivadas. Com isso, substituindo (4.46), (4.47) e (4.48) em (4.14), temos:

$$\begin{aligned}
 & (\Psi_t - \beta\Psi)e^{\alpha x - \beta t} + U(\Psi_x + \alpha\Psi)e^{\alpha x - \beta t} = \\
 & = K(\Psi_{xx} + 2\alpha\Psi_x + \alpha^2\Psi)e^{\alpha x - \beta t} - \kappa\Psi e^{\alpha x - \beta t} \Rightarrow \\
 & \Rightarrow (\Psi_t - \beta\Psi) + U(\Psi_x + \alpha\Psi) = K(\Psi_{xx} + 2\alpha\Psi_x + \alpha^2\Psi) - \kappa\Psi \Rightarrow \\
 & \Rightarrow \Psi_t = K\Psi_{xx} + \Psi_x(2\alpha K - U) + (K\alpha^2 - U\alpha + \beta - \kappa)\Psi.
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

Assim como em (OGATA & BANKS, 1961), adotou-se:

$$2\alpha K - U = 0 \Rightarrow \alpha = U/2K, \tag{4.50}$$

$$K\alpha^2 - U\alpha + \beta - \kappa = 0. \tag{4.51}$$

Substituindo o valor de α da Eq. (4.50) na Eq. (4.51), temos:

$$K\left(\frac{U}{2K}\right)^2 - U\left(\frac{U}{2K}\right) + \beta - \kappa = 0 \Rightarrow \beta = \frac{U^2}{4K} + \kappa. \tag{4.52}$$

Dessa forma, substituindo (4.50) e (4.52) em (4.45):

$$C(x, t) = \Psi(x, t) \exp\left[\frac{Ux}{2K} - \left(\frac{U^2}{4K} + \kappa\right)t\right]. \tag{4.53}$$

Substituindo a Eq. (4.53) em (4.14), obtemos:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = K \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}. \tag{4.54}$$

A Eq. (4.54), como indicado em Chapra (2008), é a segunda Lei de Fick, que representa a equação de difusão pura e é reconhecida como uma EDP de segunda ordem linear homogênea. Diante disso, aplicou-se a transformada de Fourier em relação a x dos dois lados da Eq. (4.54). Assim:

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right\} = K\mathcal{F}\left\{\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right\}, \quad (4.55)$$

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial \Psi}{\partial t}\right\} = \frac{\partial \widehat{\Psi}}{\partial t}, \quad (4.56)$$

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right\} = K(i\omega)^2 \widehat{\Psi} = -K\omega^2 \widehat{\Psi}. \quad (4.57)$$

A notação $\widehat{\Psi}$ foi utilizada para indicar a transformada de Fourier da função $\Psi(x, t)$ em relação a x . Substituindo as Eqs. (4.56) e (4.57) em (4.55), temos:

$$\frac{d\widehat{\Psi}}{dt} = -K\omega^2 \widehat{\Psi}. \quad (4.58)$$

Efetuada a separação das variáveis na Eq. (4.58) e aplicando a integral dos dois lados da equação, obtemos:

$$\int \frac{d\widehat{\Psi}}{\widehat{\Psi}} = - \int K\omega^2 dt \Rightarrow \ln \widehat{\Psi} = -K\omega^2 t + a \Rightarrow \widehat{\Psi}(\omega, t) = C_0 e^{-K\omega^2 t}, \quad (4.59)$$

onde a é a constante de integração.

Aplicando a condição inicial, em $t = 0$ na equação (4.53), temos:

$$C(0, 0) = \Psi(0, 0) \exp\left(\frac{U_0}{2K} - \left(\frac{U^2}{4K} + K\right)0\right) \Rightarrow C(0, 0) = \Psi(0, 0) = \frac{M}{A} \delta(0). \quad (4.60)$$

Ao aplicar a transformada de Fourier na Eq. (4.60), obtemos:

$$\mathcal{F}\{C(0, 0)\} = \mathcal{F}\{\Psi(0, 0)\} \Rightarrow \mathcal{F}\{\Psi(0, 0)\} = \mathcal{F}\left\{\frac{M}{A} \delta(0)\right\} \Rightarrow \widehat{\Psi}(0, 0) = M/A. \quad (4.61)$$

Portanto, igualando (4.59) e (4.61) no ponto $(0,0)$, temos:

$$\widehat{\Psi}(0, 0) = C_0 e^{-k_0^2 0} \Rightarrow C_0 = M/A. \quad (4.62)$$

Por fim, obtemos:

$$\widehat{\Psi}(\omega, t) = \frac{M}{A} e^{-K\omega^2 t}. \quad (4.63)$$

Para retornar às variáveis originais, aplicamos a transformada inversa de Fourier em relação a ω dos dois lados da Eq. (4.63). Logo:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1}\{\widehat{\Psi}\} &= \frac{M}{A} \mathcal{F}^{-1}\{e^{-(kt)\omega^2}\} \Rightarrow \mathcal{F}^{-1}\{\widehat{\Psi}\} = \frac{M}{A} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Kt\omega^2 - ix\omega) d\omega \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathcal{F}^{-1}\{\widehat{\Psi}\} = \frac{M}{A} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Kt(\omega + \frac{ix}{2Kt})^2 - \frac{x^2}{4Kt}) d\omega \Rightarrow \\ &\Rightarrow \mathcal{F}^{-1}\{\widehat{\Psi}\} = \frac{M}{A} \frac{1}{2\pi} \exp(-\frac{x^2}{4Kt}) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-Kt(\omega + \frac{ix}{2Kt})^2) d\omega. \end{aligned} \quad (4.64)$$

A equação (4.64) é uma Gaussiana, como desenvolvido em (CIOLETTI, 2025), que converge para $\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$, onde $\alpha = Kt$. Logo:

$$\mathcal{F}^{-1}\{\widehat{\Psi}\} = \Psi(x, t) = \frac{M}{A} \frac{1}{\sqrt{4\pi Kt}} \exp(-\frac{x^2}{4Kt}). \quad (4.65)$$

Substituindo a Eq. (4.65) em (4.53), temos:

$$\begin{aligned} C(x, t) &= \frac{M}{A} \frac{1}{\sqrt{4\pi Kt}} \exp(-\frac{x^2}{4Kt}) \exp(\frac{Ux}{2K} - \frac{U^2 t}{4K} - \kappa t) \Rightarrow \\ C(x, t) &= \frac{M}{A\sqrt{4\pi Kt}} \exp((-\frac{x^2}{4Kt} + \frac{2Uxt}{4Kt} - \frac{U^2 t^2}{4Kt}) - \kappa t) \Rightarrow \\ C(x, t) &= \frac{M}{A\sqrt{4\pi Kt}} \exp(-\frac{(x-Ut)^2}{4Kt} - \kappa t), \quad t > 0 \text{ e } x \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

4.3.2 Condição de Contorno: entrada retangular

Outra condição de contorno presente em Potter (2009) para a Eq. (4.14) é:

Entrada retangular em $C = 0$:

- $x \geq 0, t = 0$;

- $C = C_0, x = 0, \xi > t > 0;$
- $C = 0, x = 0, t > \xi$

Isso significa que o contaminante é injetado na posição inicial com concentração constante C_0 durante um intervalo de tempo específico, $\xi > t > 0$. Depois disso, a injeção é interrompida quando $t > \xi$. Para esse tipo de entrada, determinou-se uma função $g(t - \xi)$ de modo a estabelecer as condições de contorno. Assim, foi considerado que em $\xi > t > 0$ a função $g(t - \xi)$ é igual a zero e quando $t > \xi$, a função $g(t - \xi)$ é igual a 1. Assim, quando t for maior que ξ , a concentração na posição inicial será anulada, pois não há mais injeção na posição de entrada, assim como uma diminuição gradual da concentração na direção de interesse com o decorrer do tempo. Ademais, a função $g(t - \xi)$, para este caso, pode ser denominada como degrau unitário ou Heaviside, como apresentado na subseção 2.4.5.

Desse modo, a solução final será dada por:

$$C(x, t) = C_{\text{geral}}(x, t) - g(t - \xi)C_{\text{geral}}(x, t - \xi), \quad (4.67)$$

Onde:

$$\begin{aligned} g(t - \xi) &= 0, \text{ se } 0 < t < \xi \text{ e} \\ g(t - \xi) &= 1, \text{ se } t > \xi. \end{aligned}$$

Como possível solução para a Eq. (4.14), tendo em vista as condições de contorno descritas no início desta subseção, devemos inicialmente aplicar a transformada de Laplace em relação a t nos dois lados da equação com objetivo de simplificá-la. Assim:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\} = \mathcal{L}\left\{-U\frac{\partial C}{\partial x} + K\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \kappa C\right\}, \quad (4.68)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\} = s\bar{C} - C(x, 0) = s\bar{C}, \quad (4.69)$$

$$\mathcal{L}\left\{-U\frac{\partial C}{\partial x} + K\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \kappa C\right\} = -U\frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + K\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} - \kappa \bar{C}. \quad (4.70)$$

Substituindo (4.69) e (4.70) em (4.68), temos:

$$K \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} - U \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - (s + \kappa) \bar{C} = 0. \quad (4.71)$$

Pode-se observar que a Eq. (4.71) é uma EDO de segunda ordem linear homogênea, com método de resolução conhecido e já aplicado em momentos anteriores. Dessa forma, ao considerar $\overline{C(x, s)} = e^{\lambda x}$, temos:

$$\begin{aligned} K \frac{\partial^2 (e^{\lambda x})}{\partial x^2} - U \frac{\partial (e^{\lambda x})}{\partial x} - (s + \kappa) e^{\lambda x} &= 0 \\ \Rightarrow K \lambda^2 e^{\lambda x} - U \lambda e^{\lambda x} - (s + \kappa) e^{\lambda x} &= 0. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Em seguida, dividimos os dois lados da Eq. (4.72) por $e^{\lambda x}$, tendo em vista que essa expressão é maior que zero para qualquer que seja o valor de $x \in \mathfrak{R}$. Logo:

$$K \lambda^2 - U \lambda - (s + \kappa) = 0. \quad (4.73)$$

Assim, temos:

$$\lambda = \frac{U \pm \sqrt{U^2 + 4K(s + \kappa)}}{2K}, \quad (4.74)$$

$$\lambda_1 = \frac{U + \sqrt{U^2 + 4K(s + \kappa)}}{2K} > 0, \quad (4.75)$$

$$\lambda_2 = \frac{U - \sqrt{U^2 + 4K(s + \kappa)}}{2K} < 0. \quad (4.76)$$

Portanto, a solução geral para a função $\overline{C(x, s)}$ é dada por:

$$\overline{C(x, s)} = A e^{\lambda_1 x} + B e^{\lambda_2 x}. \quad (4.77)$$

A raiz positiva foi descartada, pois a concentração diminui à medida que se afasta do ponto de injeção. Para a segunda condição de contorno estipulada, temos:

$$C(0, t) = C_0 \Rightarrow \mathcal{L}\{C(0, t)\} = \mathcal{L}\{C_0\} \Rightarrow \overline{C(0, s)} = \frac{C_0}{s}. \quad (4.78)$$

Assim:

$$\overline{C(0, s)} = B e^{\lambda_0} \Rightarrow \frac{C_0}{s} = B; \quad (4.79)$$

Portanto:

$$\overline{C(x, s)} = \frac{C_0}{s} e^{\lambda_2 x} \Rightarrow \overline{C(x, s)} = C_0 \exp\left(\frac{Ux}{2K}\right) \left[\frac{1}{s} \exp\left(\frac{-x}{\sqrt{K}} \sqrt{s + \left(\kappa + \frac{U^2}{4K}\right)}\right) \right]. \quad (4.80)$$

A fim de aplicar a transformada inversa de Laplace nos dois lados da equação (4.80) em relação a t , vamos utilizar a generalização desenvolvida em (O'LOUGHLIN & BOWMER, 1975):

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{s} \exp(-a\sqrt{s+b})\right\} = \frac{1}{2} \left[e^{-a\sqrt{b}} \operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}} - \sqrt{bt}\right) + e^{a\sqrt{b}} \operatorname{erfc}\left(\frac{a}{2\sqrt{t}} + \sqrt{bt}\right) \right],$$

onde:

$$a = \frac{x}{\sqrt{K}}, \quad (4.81)$$

$$b = \kappa + \frac{U^2}{4K}, \quad (4.82)$$

$$\sqrt{b} = \frac{U}{2\sqrt{K}} \sqrt{1 + \frac{4K\kappa}{U^2}} \Rightarrow \sqrt{b} = \frac{U\Gamma}{2\sqrt{K}}, \quad (4.83)$$

$$a\sqrt{b} = \frac{xU\Gamma}{2K}, \quad (4.84)$$

$$\frac{a}{2\sqrt{t}} = \frac{x}{2\sqrt{Kt}}, \quad (4.85)$$

$$\sqrt{bt} = \frac{U\Gamma\sqrt{t}}{2\sqrt{K}}, \quad (4.86)$$

$$\text{onde } \Gamma = \sqrt{1 + \frac{4K\kappa}{U^2}}.$$

A simplificação utilizando Γ foi adotada de forma semelhante a utilizada em O'loughlin e Bowmer (1975). Dessa forma, dando continuidade, substituindo as Eqs. (4.84), (4.85) e (4.86) na transformada de Laplace inversa em relação a t , temos:

$$C(x, t)_{\text{geral}} = \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(\frac{Ux}{2K} (1 - \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x-Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{2K} (1 + \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) \right];$$

Considerando que $C_f(x, t) = C(x, t)_{geral} - g(t - \xi)C(x, t - \xi)_{geral}$, logo:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 - \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 + \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) \right] -$$

$$- g(t - \xi) \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 - \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - U(t - \xi)\Gamma}{2\sqrt{K(t - \xi)}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 + \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + U(t - \xi)\Gamma}{2\sqrt{K(t - \xi)}}\right) \right].$$

(4.87)

4.4 Discussões

Na literatura, a equação de difusão-advecção vem sendo utilizada para modelar o transporte de substâncias em diversos meios, de reatores a rios. Como descrito em (FERNANDES, 2025) e como observado em (EQUER, 2017; PERIN & QUADROS, 2021) as equações, nestes trabalhos, foram desenvolvidas por métodos numéricos (Método das Diferenças Finitas - MDF), com aprimoramentos necessários para cada cenário considerado.

Especificamente em relação às resoluções analíticas, essas podem ser utilizadas como fator de comparação para as soluções numéricas, assim como também podem ser utilizadas como ferramenta para análise e tomada de decisão na interpretação do transporte de massa em meio líquido. No Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas disponibilizado pela Companhia Ambiental do Estado de São Paulo (CETESB, 2025), a Eq. (4.14) é indicada como o modelo para representar o transporte unidirecional de solutos em subsuperfície, com especificidades nos coeficientes de difusão e na velocidade. Tendo em vista a diversidade de condições de contorno e valores iniciais que podem determinar diferentes soluções, em (VAN GENUCHTEN & ALVES, 1982) estão listadas soluções analíticas para condições iniciais e de contorno distintas, sendo o documento caracterizado como referência para possíveis casos a serem estudados.

No presente trabalho foram abordados modelos unidimensionais, que, segundo observado em (FERNANDES, 2025), podem ser aplicados quando as dimensões transversais são pequenas em relação a longitudinal (dimensão de interesse), ou quando a largura ou a profundidade podem ser consideradas desprezíveis em comparação com o comprimento. Já em Chapra (2009) o modelo unidimensional é voltado para reatores em que a concentração varia apenas na direção a ser investigada. Além disso, os coeficientes de dispersão, decaimento e velocidade são valores estimados ou obtidos experimentalmente. Como exemplo disso, em (EQUER, 2017) foi utilizado o modelo clássico de difusão-advecção,

equação (4.14), com a integração de um coeficiente de difusão que variasse com a posição transversal ao fluxo do rio, tendo em vista a presença de vegetação nas margens. Além da estimativa da velocidade do rio a partir de um perfil parabólico, apenas na direção horizontal. Já em (CETESB, 2025), o coeficiente difusivo é a soma da difusão molecular e a dispersão mecânica. Assim, ressalta-se a necessidade de avaliação das condições específicas do meio para a obtenção dos coeficientes mencionados.

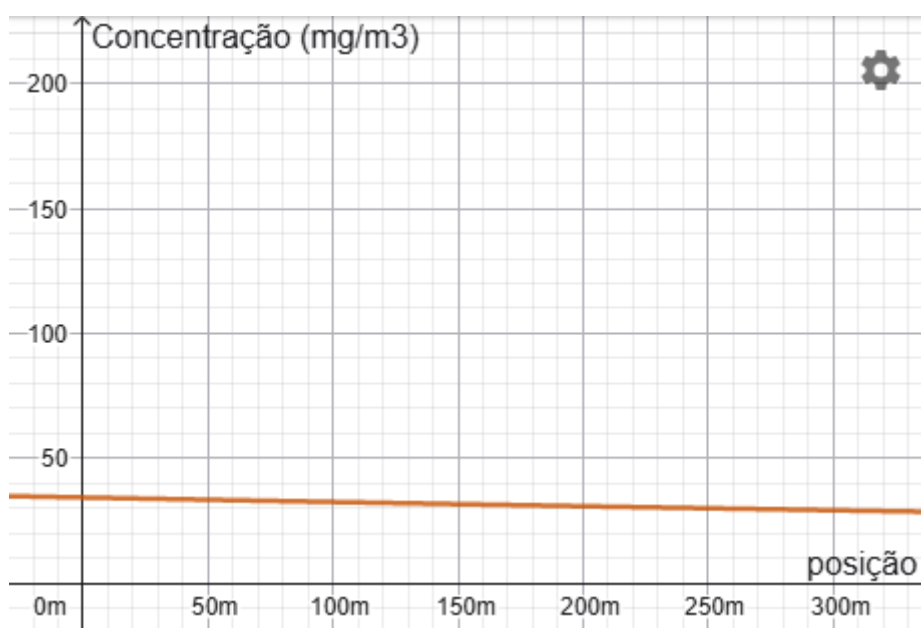
Em continuidade, as representações gráficas apresentadas nesta subseção, 4.4, foram obtidas a partir da plotagem das soluções analíticas tanto no Geogebra (GeoGebra Calculator-Windows-Intaller-6-0-920-0), quanto no GNU OCTAVE on-line, onde neste último foi utilizada a inteligência artificial, Gemini, para a formalização dos códigos (Apêndice A). Vale ressaltar que esses softwares são de acesso livre. Os valores gerais adotados para a modelagem das soluções (4.20 e 4.66) basearam-se nos parâmetros obtidos por O'Loughlin e Bowmer (1975) no canal "Cobram 5", onde foi injetada uma carga de 34,32 mg/m³ (15 ppm) do herbicida acroleína. Nesse cenário, a velocidade média no canal é de 280 m/h e o coeficiente de degradação é de 0,151 h⁻¹. Adicionalmente, empregou-se um coeficiente de dispersão de 1800 m²/h, valor representativo de rios com regime de escoamento moderado, conforme fundamentado por Fernandes (2025). Para a substância conservativa, equação (4.66), utilizaram-se os dados de Perin e Quadros (2021) referentes ao mercúrio, com velocidade média de 1 m/s, concentração inicial de 1 mg/m³ e o coeficiente 0,5 m²/s. como indicado em Fernandes (2025)

Diante disso, a Eq. (4.15) modela o transporte de uma substância não conservativa em um canal, como para um reator do tipo MFR, onde a entrada desta substância ocorre de forma contínua a uma concentração inicial C_0 , na posição inicial (ponto de injeção). Além disso, determina que na saída desse canal a concentração seja nula e que em cada posição do canal a concentração seja constante, ou seja, um sistema em estado estacionário. Ao plotar a solução analítica obtida no Geogebra, Figura 4, observou-se as condições iniciais estabelecidas, ou seja, a concentração inicial $C(0) = 34,32 \text{ mg/m}^3$ constante na posição inicial, além da diminuição dos valores da concentração à medida que aumentam os valores de x .

Acréscimos nos valores de U tornam a advecção mais significativa, o que resulta em valores de concentração maiores para maiores valores de x , como discutido em (FERNANDES, 2025). Esse comportamento também ocorre com o aumento da dispersão. Já para variações no coeficiente de decaimento, o inverso acontece, ou seja, maiores valores desse coeficiente, diminuem as concentrações em relação a posição.

A segunda equação desenvolvida neste trabalho (Eq. (4.21)) modela o transporte de uma substância não conservativa, como o mercúrio, cujo sistema apresenta variações na concentração em um dado ponto ao longo do tempo, um sistema em estado não estacionário. Além disso, considerando as condições de contorno, a concentração é nula em qualquer ponto antes da entrada da substância, sendo que a entrada é constante na posição inicial para qualquer tempo e a concentração é nula para valores de x no limite do corpo analisado (tendendo ao infinito) a qualquer tempo.

Figura 4: Representação da Eq. (4.20)



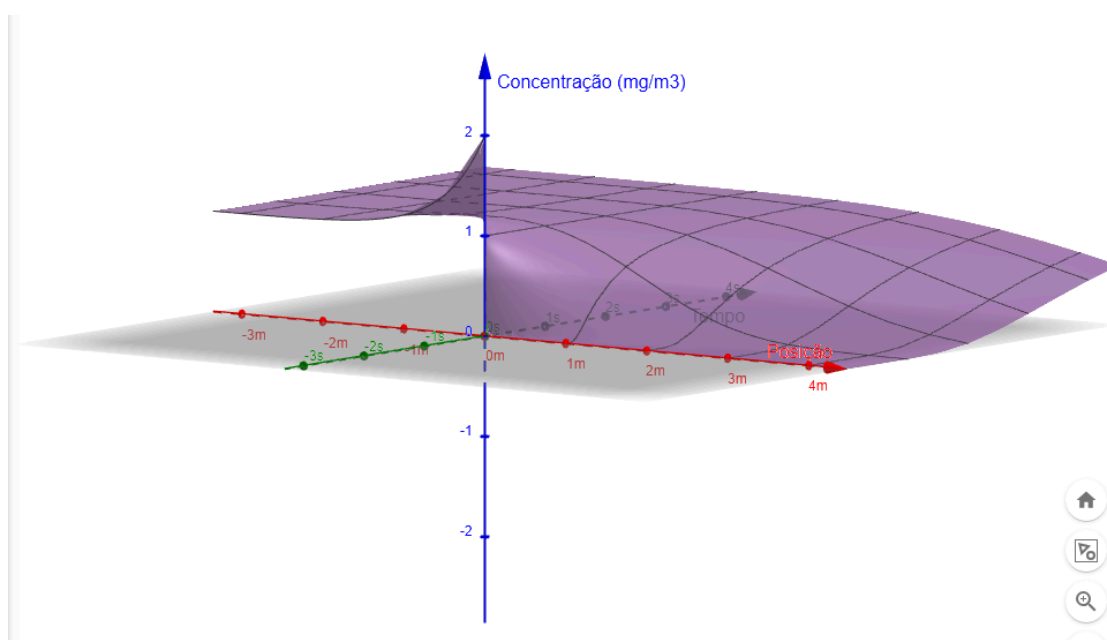
Fonte: próprio autor.

A função ao ser plotada no Geogebra resultou em uma superfície no plano tridimensional (Figura 5), no qual o eixo das abscissas corresponde à posição, o eixo das ordenadas corresponde ao tempo e o eixo ortogonal ao plano posição versus tempo corresponde à concentração. Já para a representação 2D, o eixo horizontal correspondendo à distância e o eixo vertical correspondendo à concentração para $t = 5$ s (Figura 6). A concentração $C_0 = 1$ mg/m³ é a intersecção da curva com o eixo vertical, e se mantém independente do valor de t , respeitando a condição de contorno estabelecida. Os aumentos da velocidade e do coeficiente de difusividade resultam em maiores concentrações a maiores distâncias, ou seja, em ambientes aquáticos com alta velocidade e turbulência, o material será espalhado de forma mais abrangente, assim como indicado em (FERNANDES, 2025).

Quando a velocidade é nula, a concavidade muda, de modo que o transporte só depende da dispersão, ou seja, o transporte ocorre a menores distâncias no tempo.

Já no modelo desenvolvido no Octave on-line, consiste em um mapa de contornos de concentração, no qual o eixo vertical representa o tempo, o eixo horizontal representa a posição e as cores representam a concentração, de modo a ilustrar três variáveis em um plano bidimensional. Com isso, observa-se o comportamento da pluma de contaminação para as condições estabelecidas, considerando valores arbitrários de U e K (Figura 7).

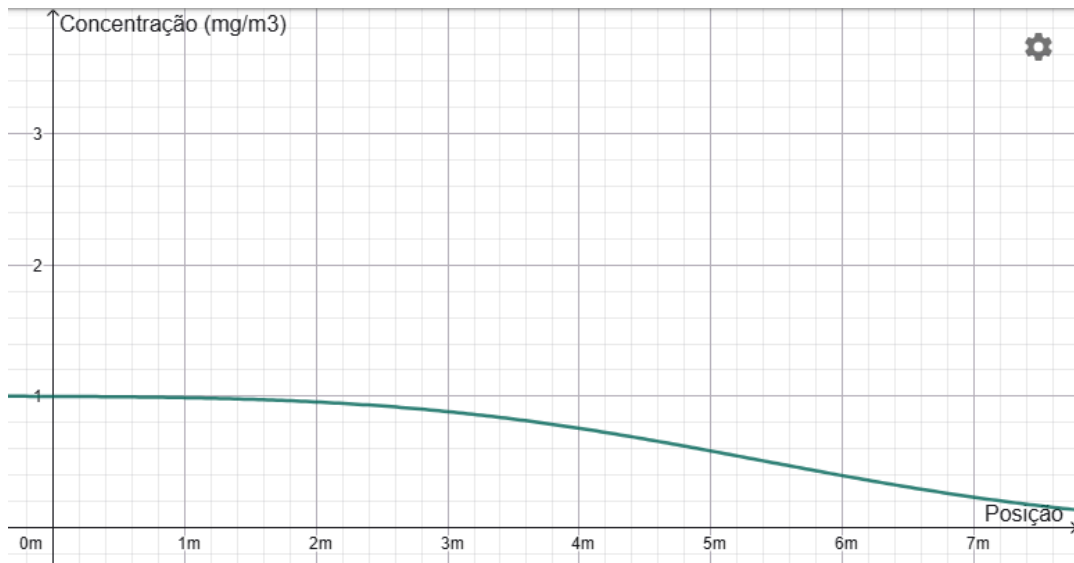
Figura 5: Representação 3D da Eq. (4.44)



Fonte: próprio autor.

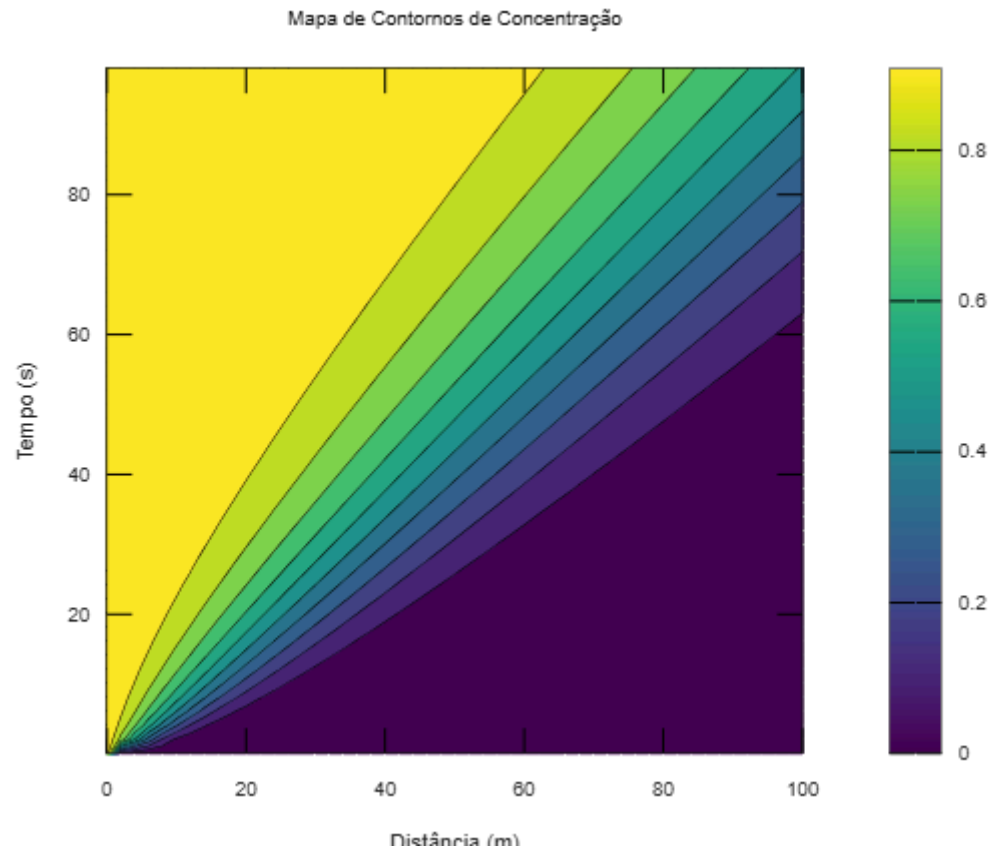
As equações (4.66) e (4.87) se diferenciam pelas condições de controle e valores iniciais, indicando como essas variáveis podem determinar a problemática que se busca modelar. A Eq. (4.66) representa um pulso definido por $C = \frac{M}{A} \delta(x)$ em $x = 0$ e $t = 0$, que, em outras palavras, modela a injeção de matéria por um curto período de tempo, onde M é a massa total da substância entrando no sistema, A é a área da seção transversal onde o constituinte está sendo difundido e $\delta(x)$ é a "função" Delta de Dirac, que modela a entrada instantânea (POTTER, 2009 & ZILL & CULLEN 2001). Foi tomado A igual a 2 m^2 como forma de exemplificação e a M igual a 34,32. Os demais valores para as variáveis são os que foram mencionados anteriormente como caso geral.

Figura 6: Representação 2D da Eq. (4.44) para $t = 5$ s



Fonte: próprio autor.

Figura 7: Mapa de contornos de concentração da Eq. (4.44)

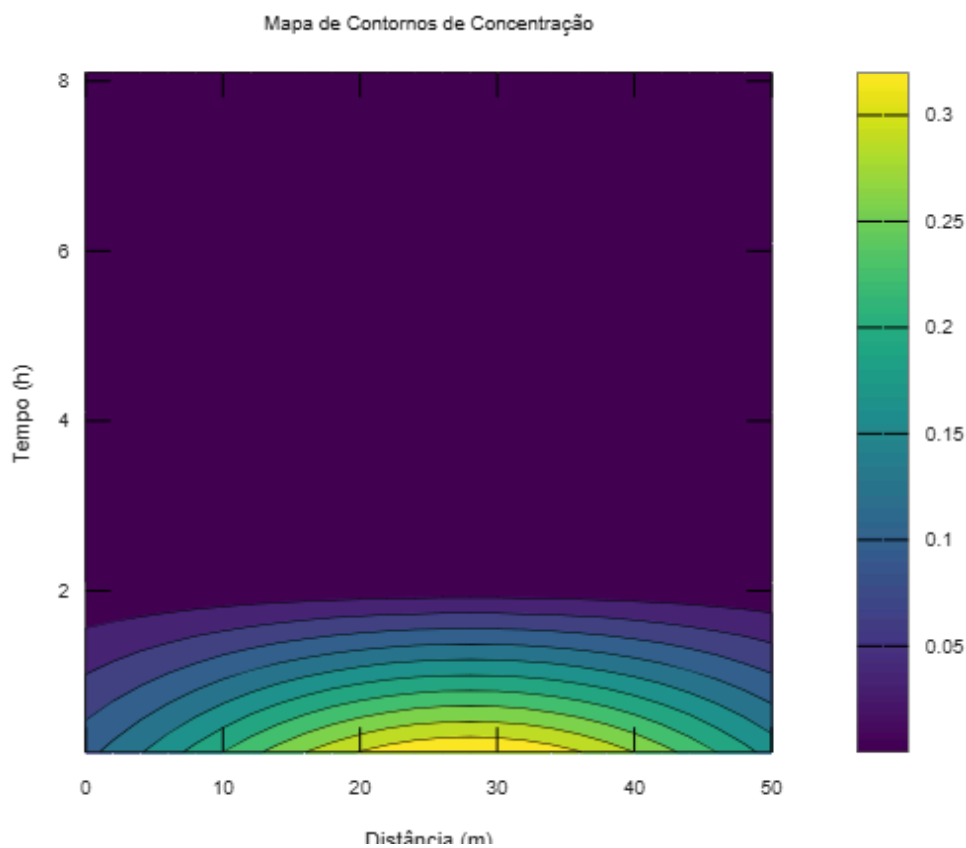


Fonte: próprio autor.

Já para $x = \infty$ em $t > 0$, novamente, a concentração tende a zero. Tendo em vista a natureza do pulso, a quantidade injetada é transportada de modo que a concentração máxima é deslocada da origem (Figuras 8, 9, e 10). Além disso, na representação 3D, figura 9, observa-se o pico de injeção na posição inicial, e a medida que o tempo aumenta, o formato de sino é difundido rapidamente, tendo em vista os altos valores do coeficiente de difusão e velocidade. Outro ponto a ser destacado é o formato da curva modelo que corresponde a uma Distribuição Gaussiana da concentração, como estabelecido no desenvolvimento analítico (Eq. (4.64)).

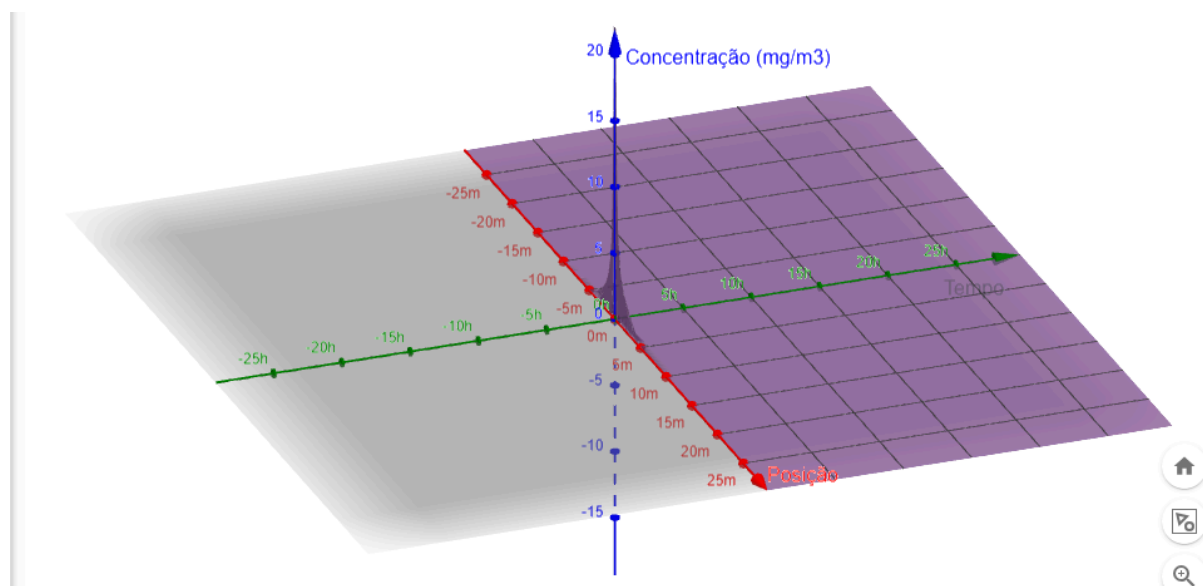
Em particular, para a última solução, (4.87), foram atribuídos valores genéricos para facilitar a observação do comportamento da substância no modelo. Dessa forma, essa solução possui as seguintes condições inicial e de contorno de entrada retangular em $x = 0$; $C = 0, x \geq 0, t = 0$; $C = C_0, x = 0, \xi > t > 0$; $C = 0, x = 0, t > \xi$. Disso, entende-se a modelagem de um sistema onde um constituinte é introduzido a uma concentração constante na posição inicial em um intervalo de tempo. Após esse intervalo, a entrada é cessada, e o contaminante continua a ser transportado. Tendo isso em vista, esse modelo faz uso da função Heaviside, ou degrau unitário, simplesmente para representar um período ligado, entrada constante de constituinte, e desligado, interrupção da entrada (Figuras 11, 12 e 13) (ZILL & CULLEN, 2001 & BOYCE et al. 2020). Em específico, na representação 2D, figura 13, concentração versus posição, para valores arbitrários de tempo tomados como constantes, pode-se observar o comportamento da concentração até o período de tempo imediatamente anterior a ξ , e após isso, percebe-se que a concentração na posição inicial começa a ser considerada nula, cessa a injeção de constituinte, modificando a característica do transporte, com a modificação do pico de concentração.

Figura 8: Mapa de contornos da concentração da Eq. (4.66).



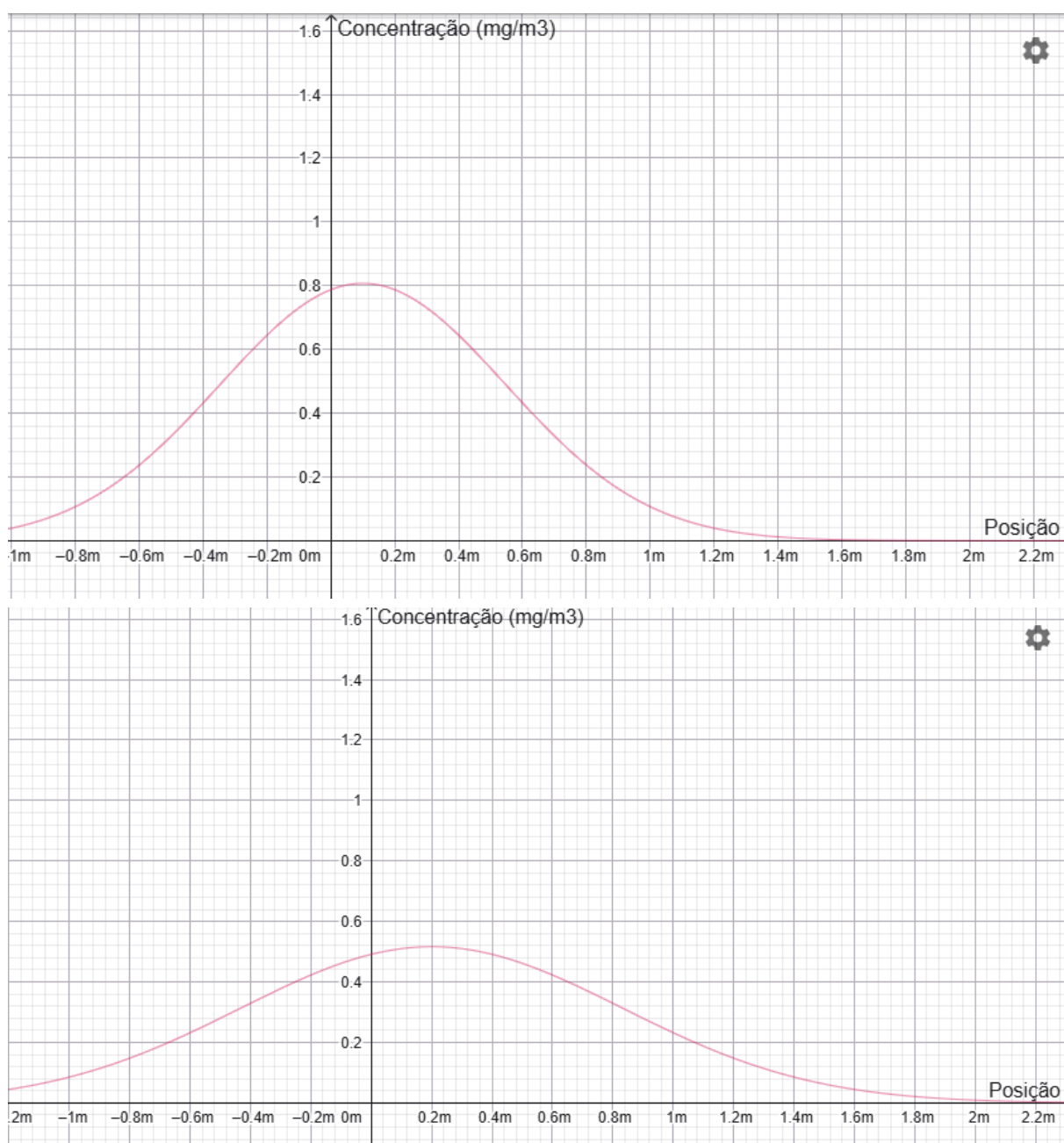
Fonte: próprio autor..

Figura 9: Representação 3D da equação (4.66)



Fonte: próprio autor.

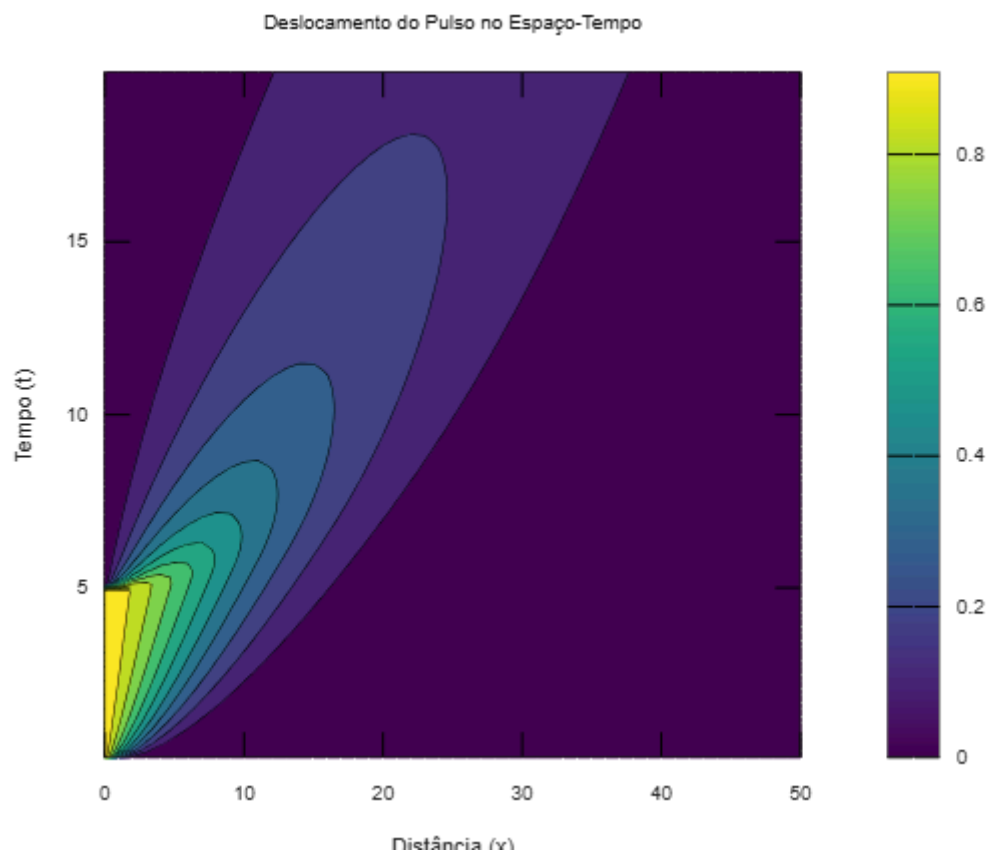
Figura 10: Representação 2D da equação (4.66) para $t = 0,1$ s e $t = 0,2$ s



*A primeira imagem de cima para baixo corresponde ao tempo 0,1 s e a segunda imagem de cima para baixo corresponde ao tempo 0,2 s.

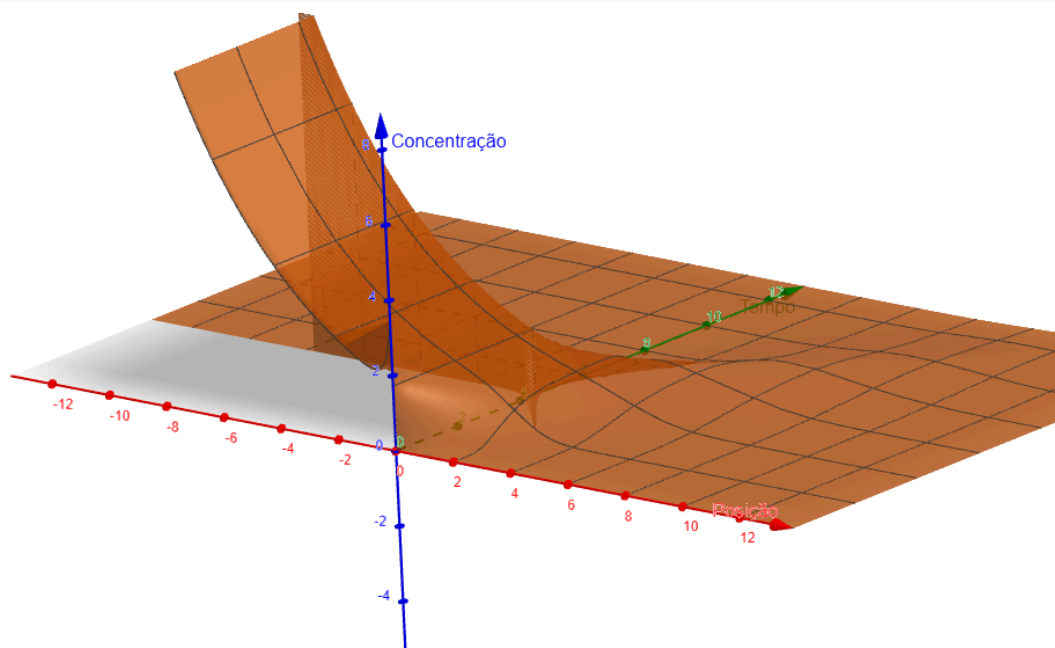
Fonte: próprio autor.

Figura 11: Mapa de contornos da concentração da Eq. (4.87)



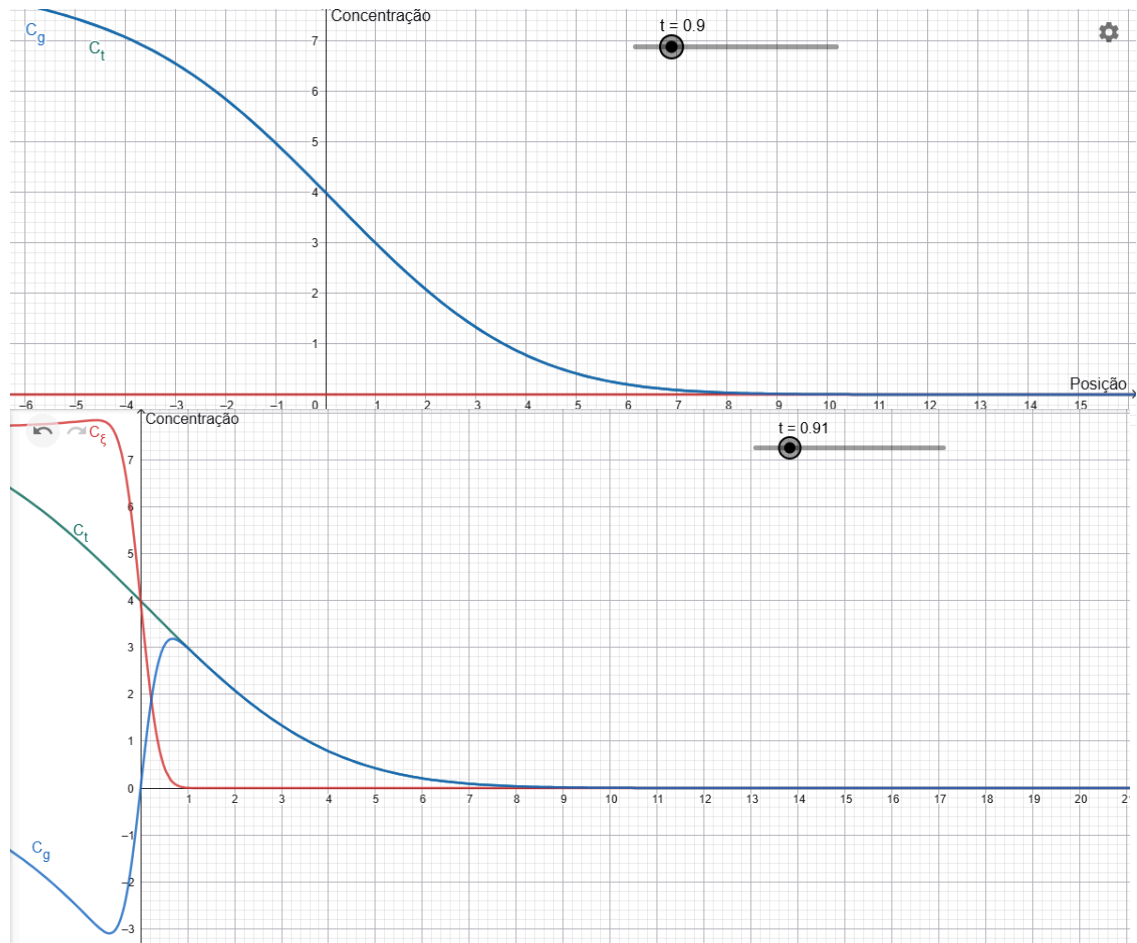
Fonte: próprio autor.

Figura 12: Representação 3D da Eq. (4.87)



Fonte: próprio autor.

Figura 13: Representação 2D da Eq. (4.87) para diferentes tempos



* C_g : a função que representa a equação geral; C_t : a função que representa a equação sem considerar a interrupção da injeção; C_ξ : a função que representa o comportamento após o tempo ξ .

Fonte: próprio autor.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A poluição dos corpos aquáticos como resultado das atividades humanas é alarmante, tendo em vista a magnitude e a complexidade dos constituintes incorporados a esses ambientes. Dessa forma, a modelagem matemática baseada em equações diferenciais que representam o fenômeno difusivo-advectivo pode ser utilizada como uma ferramenta robusta para a previsão do comportamento desses contaminantes nesses meios.

As equações diferenciais lineares de segunda ordem selecionadas neste trabalho foram desenvolvidas analiticamente a partir de métodos como as transformadas de Fourier e Laplace, de modo a simplificar a resolução dos modelos. Os resultados obtidos foram plotados em softwares de código aberto e livre acesso, indicando assim a viabilidade econômica e a acessibilidade operacional da metodologia proposta.

Os coeficientes, as variáveis relacionadas e as condições iniciais e de contorno ajustam a modelagem do transporte de substâncias em ambientes aquáticos, de modo que modificações nesses fatores implicam diferentes cenários simulados, o que ressalta a estrita necessidade de analisá-los com critérios técnicos. Por fim, evidencia-se a importância da caracterização dessas equações para o desenvolvimento de soluções de engenharia e mitigação de impactos ambientais. Ademais, destaca-se a relevância de estudos futuros que incorporem novas condições de contorno e cenários multidimensionais, bem como parâmetros variáveis no espaço e no tempo (como velocidade, coeficiente de difusão e degradação) e a comparação com soluções analíticas. Tais abordagens visam amparar de forma mais abrangente os profissionais que utilizam modelos de advecção-difusão na gestão de recursos hídricos.

REFERÊNCIAS

BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C.; MEADE, D. B. **Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno**. Tradução e revisão técnica Valéria de Magalhães Iorio. 11. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2020.

CETESB (São Paulo). **Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas**. 3. ed. São Paulo: CETESB, 2025. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/areas-contaminadas/documentacao/manual-de-gerenciamento-de-areas-contaminadas/informacoes-gerais/apresentacao-2/>. Acesso em: 18 maio 2026.

CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling**. [S. l.]: Tufts University, 2008.

CIOLETTI, L. **Integrais e Variáveis Aleatórias Gaussianas**. Brasília: UnB, Departamento de Matemática, 2025.

EQUER, D. B. **Modelagem, aproximação e simulações computacionais de impacto ambiental com difusividade variável: um estudo de caso**. 2017. Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2017.

EVANS, L. C. **Partial Differential Equations**. Providence: American Mathematical Society, 1998. v. 19.

FALCO, J. W.; MULKEY, L. A. Modeling the effect of pesticide loading on riverine ecosystems. In: **CONFERENCE ON ENVIRONMENTAL MODELING AND SIMULATION**, 1976, Cincinnati. Proceedings [...]. Cincinnati: [s. n.], 1976. p. 156-160.

FENG, W.; DENG, Y.; YANG, F.; MIAO, Q.; NGIEN, S. K. Systematic Review of Contaminants of Emerging Concern (CECs): Distribution, Risks, and Implications for Water Quality and Health. **Water**, v. 15, n. 22, p. 3922, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/w15223922>. Acesso em: 30 abr. 2026.

FERNANDES, R. L. **Simulação da dispersão de poluentes em meio aquático utilizando a equação de advecção-difusão**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Sistemas de Informação) – Centro de Ensino Superior do Seridó, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Caicó, RN, 2025.

FONTELLES, M. J.; SIMÕES, M. G.; FARIAS, S. H.; FONTELLES, R. G. S. Metodologia da Pesquisa Científica: diretrizes para a Elaboração de um protocolo de Pesquisa. **Revista Paraense de Medicina**, Belém, v. 23, n. 3, p. 55-61, 2009.

GIL, A. C. **Como elaborar projetos de pesquisa**. São Paulo: Atlas, 2008.

IVRII, V. **Partial Differential Equations**. Toronto: University of Toronto, Department of Mathematics, 2026.

KREFT, A.; ZUBER, A. On the Physical meaning of the Dispersion Equation and Its Solutions for Different Initial and Boundary Condition. **Chemical Engineering Science**, Great Britain, v. 33, p. 1471-1480, 1978.

OGATA, A.; BANKS, R. B. **A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media: Geological Survey Professional Paper 411-A**. Washington: United States Government Printing Office, 1961.

O'LOUGHLIN, E. M.; BOWMER, K. H. Dilution and Decay of Aquatic Herbicides in Flowing Channels. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 26, n. 3-4, p. 217-231, 1975.

PERIN, P. Z.; QUADROS, R. S. Modelo Numérico Aplicado à Dispersão de Mercúrio em Sistemas Hídricos. **Revista Brasileira de Engenharia e Sustentabilidade**, Pelotas, v. 9, p. 1-7, 2021.

POTTER, M. C. **Mecânica dos Fluidos**. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

RATHBUN, R. E.; STEPHENS, D. W.; SHULTZ, D. J.; TAI, D. Y. Fate of acetone in an outdoor model stream in southern Mississippi, U.S.A. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 104, n. 1-4, p. 181-209, 1988. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(88\)90165-5](https://doi.org/10.1016/0022-1694(88)90165-5). Acesso em: 26 maio 2025.

SAUVÉ, S.; DESROSIERS, M. A review of what is an emerging contaminant. **Chemistry Central Journal**, [S. l.], v. 8, p. 1-7, 2014. Disponível em: <http://doi.org/10.1186/1752-153X-8-15>. Acesso em: 29 maio 2026.

UNITED NATIONS. **The United Nations World Water Development Report 2024: Water for Prosperity and Peace**. Paris: UNESCO, 2024.

VAN GENUCHTEN, M. T.; ALVES, W. J. **Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation**. Washington: U.S. Department of Agriculture, 1982. (Technical Bulletin, n. 1661).

ZILL, D. G.; CULLEN, M. R. **Equações Diferenciais**. São Paulo: Pearson Makron Books, 2001. v. 1.

ZILL, D. G.; CULLEN, M. R. **Equações Diferenciais**. São Paulo: Pearson Makron Books, 2001. v. 2.

APÊNDICE A – CÓDIGOS DESENVOLVIDOS A PARTIR DAS EQUAÇÕES NO GEMINI PARA SEREM PLOTADOS NO GNU OCTAVE ON-LINE

Código para a função $C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{x-Ut}{2\sqrt{Kt}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{K}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{2\sqrt{Kt}}\right) \right];$

Textproto

% 1. Definição das constantes

C_0 = 1;

U = 1; % Velocidade

K = 5; % Coeficiente de dispersão (ou difusão)

% 2. Criação das malhas para x e t

% Nota: Começamos t em 0.1 para evitar divisão por zero na raiz quadrada

x_vec = 0:2:100;

t_vec = 0.1:2:100;

[X, T] = meshgrid(x_vec, t_vec);

% 3. Cálculo da função C(x,t)

% Dividimos a fórmula em duas partes para facilitar a leitura

termo1 = erfc((X - U .* T) ./ (2 .* sqrt(K .* T)));

termo2 = exp(U .* X ./ K) .* erfc((X + U .* T) ./ (2 .* sqrt(K .* T)));

C = (C_0 / 2) .* (termo1 + termo2);

% Opcional: Visualização 2D (Curvas de nível)

figure;

contourf(X, T, C);

title('Mapa de Contornos de Concentração');

xlabel('Distância (x)');

ylabel('Tempo (t)');

colorbar;

Código para a função $C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Kt}} \exp\left(\frac{-(x-Ut)^2}{4Kt} - \kappa t\right)$


```

Textproto
% 1. Definição das constantes
U = 1;    % Velocidade
K = 5;    % Coeficiente de dispersão
kp = 0.005; % Coeficiente de decaimento
M = 5;    % Massa inicial
A = 10;   % Área da seção Transversal

% 2. Criação das malhas para x e t
x_vec = 0:2:50;
t_vec = 0.1:2:10;

[X, T] = meshgrid(x_vec, t_vec);

% 3. Cálculo da função C(x,t)
termo1 = exp(-((X-U.*T).^2)./(4*K.*T)-kp.*T);
termo2 = M ./ (A .* sqrt(4 * pi * K .* T));

C = termo1 .* termo2;

% Visualização 2D (Mapa de Contornos de Concentração)
figure;
contourf(X, T, C);
title('Mapa de Contornos de Concentração');
xlabel('Distância (x)');
ylabel('Tempo (t)');
colorbar;

```

Código	para	a	função
--------	------	---	--------

$$\begin{aligned}
 C(x, t) = & \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(\frac{Ux}{2K} (1 - \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x-Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{2K} (1 + \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) \right] - \\
 & - g(t - \xi) \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(\frac{Ux}{2K} (1 - \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x-U(t-\xi)\Gamma}{2\sqrt{K(t-\xi)}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{2K} (1 + \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+U(t-\xi)\Gamma}{2\sqrt{K(t-\xi)}}\right) \right];
 \end{aligned}$$

Textproto

% 1. Definição das constantes

C_0 = 1; % Concentração inicial

U = 1; % Velocidade

K = 5; % Coeficiente de dispersão

kp = 0.005; % Coeficiente de decaimento

epsilon = 5;

% 2. Criação das malhas para x e t

x_vec = 0:1:100; % Aumentei para 100 para ver a pluma viajar mais

t_vec = 0.1:0.2:20; % Aumentei para 20 para ver o pulso após o fechamento

[X, T] = meshgrid(x_vec, t_vec);

% 3. Definição da Fórmula usando Função Anônima (evita repetir código)

Gamma = sqrt(1 + (4 * K * kp) / U^2);

% Definimos a função f(x, t)

f_concentracao = @(x, t) (C_0 / 2) .* (...

exp(((U .* x) ./ (2 * K)) .* (1 - Gamma)) .* erfc((x - U .* t .* Gamma) ./ (2 .* sqrt(K .* t))) + ...

exp(((U .* x) ./ (2 * K)) .* (1 + Gamma)) .* erfc((x + U .* t .* Gamma) ./ (2 .* sqrt(K .* t))) ...

);

% 4. Cálculo do Pulso (Superposição)

% Injeção que começou em t = 0

C_ini = f_concentracao(X, T);

% Injeção "negativa" que começa em t = epsilon

T_atrasado = T - epsilon;

```
% Criamos uma matriz de zeros para o C_fim
C_fim = zeros(size(X));

% Apenas calculamos C_fim onde o tempo atrasado é positivo
% Isso evita divisões por zero e erros de raiz quadrada
indices_ativos = T_atrasado > 0;
C_fim(indices_ativos) = f_concentracao(X(indices_ativos), T_atrasado(indices_ativos));

% O Pulso Real é a diferença (Superposição)
C_pulso = C_ini - C_fim;

% Visualização 2D (Mapa de Contornos da Concentração da Concentração)
figure;
contourf(X, T, C_pulso);
title('Mapa de Contornos da Concentração');
xlabel('Distância (x)');
ylabel('Tempo (t)');
colorbar;
```

APÊNDICE B – COMANDO PLOTADOS NO GEOGEBRA

Textproto

Equação (4.20): $c(x) = C_0 \cdot \exp\left(\frac{U}{2K} \cdot (1 - \sqrt{1 + (4Kk/U^2)})\right) \cdot x$

Equação (4.44): $f(x, y) = \left(\frac{C_0}{2}\right) \cdot (\operatorname{erfc}((x - u \cdot y) / (2 \cdot \sqrt{k \cdot y}))) + \exp(u \cdot x / k) \cdot \operatorname{erfc}((x + u \cdot y) / (2 \cdot \sqrt{k \cdot y})))$

Equação (4.66): $c(x, y) = \left(\frac{M}{A \cdot \sqrt{4 \cdot \pi \cdot K \cdot y}}\right) \cdot e^{-\left(\frac{((x - U \cdot y)^2)}{(4 \cdot K \cdot y)} - k \cdot y\right)}$

Equação (4.87):

Definir $\text{gama} = \sqrt{1 + (4 \cdot K \cdot kp) / U^2}$

$f(x, y) = \left(\frac{C_0}{2}\right) \cdot (\exp((u \cdot x) / (2 \cdot k)) \cdot (1 - \text{gama})) \cdot (1 - \operatorname{erf}((x - u \cdot y \cdot \text{gama}) / (2 \cdot \sqrt{k \cdot y}))) + \exp((u \cdot x) / (2 \cdot k)) \cdot (1 + \text{gama})) \cdot (1 - \operatorname{erf}((x + u \cdot y \cdot \text{gama}) / (2 \cdot \sqrt{k \cdot y})))) - \text{Se}(y > \text{eps}, \left(\frac{C_0}{2}\right) \cdot (\exp((u \cdot x) / (2 \cdot k)) \cdot (1 - \text{gama})) \cdot (1 - \operatorname{erf}((x - u \cdot (y - \text{eps}) \cdot \text{gama}) / (2 \cdot \sqrt{k \cdot (y - \text{eps})})))) + \exp((u \cdot x) / (2 \cdot k)) \cdot (1 + \text{gama})) \cdot (1 - \operatorname{erf}((x + u \cdot (y - \text{eps}) \cdot \text{gama}) / (2 \cdot \sqrt{k \cdot (y - \text{eps})}))))), 0)$

**APÊNDICE C – GUIA PRÁTICO PARA ENGENHEIROS: O FENÔMENO
DIFUSÃO-ADVECÇÃO.**



GUIA PRÁTICO PARA ENGENHEIROS:

O Fenômeno
Difusão-Advecção

Autor: Valdecir Siqueira Ramos



Esta obra é licenciada sob uma licença **Creative Commons Atribuição (CC BY 4.0)**. Esta licença permite a cópia e redistribuição do material, em qualquer suporte ou formato, bem como sua tradução, adaptação e outras modificações, para qualquer fim, mesmo que comercial, desde que o crédito seja atribuído ao autor e que as alterações, se houver, sejam informadas. Os termos da licença são detalhados em <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/legalcode.pt>.

Ramos, Valdecir Siqueira. Estudo de equações diferenciais para aplicabilidade ambiental : o fenômeno difusão-advecção. 2026. 76 f. Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Engenharia Ambiental) - **Universidade Estadual Paulista (UNESP)**, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Rio Claro, 2026.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas

Ramos, Valdecir Siqueira

Guia prático para engenheiros [recurso eletrônico] : o fenômeno difusão-advecção / Valdecir Siqueira Ramos. — Rio Claro, 2026.

15 p. ; PDF ; 1.78 MB : il. color., fórmulas

Recurso educacional derivado de trabalho de conclusão de curso em Engenharia Ambiental - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Rio Claro. Orientado por Nelson Callegari Júnior.

1. Modelagem 2. EDO 3. EDP 4. Transformada 5. Contaminação



Sumário

- 01** Introdução
 - 02** Conceitos e Definições
 - 03** Equações
 - 04** Códigos
- 

01

Introdução

“A água nutre a prosperidade ao atender às necessidades humanas básicas, apoiar a saúde, os meios de subsistência e o desenvolvimento econômico, sustentar a segurança alimentar e energética, e defender a integridade ambiental.” (UN, 2024)

Neste guia estão descritos os métodos analíticos para a resolução de quatro condições iniciais e de contorno do modelo do fenômeno de difusão-advecção, que se constitui como uma ferramenta economicamente viável para previsão do transporte de constituintes em água, estudo essencial na contaminação de recursos hídricos.

Conceitos e Definições

A equação que governa a transferência de massa em corpos aquáticos está associada à difusão, advecção e às transformações bioquímicas (CETESB, 2025; POTTER, 2009; CHAPRA, 2008)

Difusão Molecular: o transporte de massa decorrente de um gradiente de concentração, situação na qual as moléculas se movimentam a resultar em uma mistura uniforme (POTTER, 2009; CHAPRA, 2008).

$$J = -D \frac{dC}{dx}$$

Dispersão Mecânica: ocorre a partir de valores de velocidade locais diferentes da velocidade média (CETESB, 2025)

Advecção: é a mudança da posição de uma determinada substância pelo movimento unidirecional do fluxo, cuja velocidade de transporte é igual a velocidade média do fluido (CETESB, 2025; POTTER, 2009; CHAPRA, 2008).

$$J = Uc$$

Processo de degradação: é a transformação de uma substância em outra por meio de reações químicas ou biologicamente mediadas (POTTER, 2009).

$$\frac{dC}{dt} = -\kappa C^n$$

Conceitos e Definições

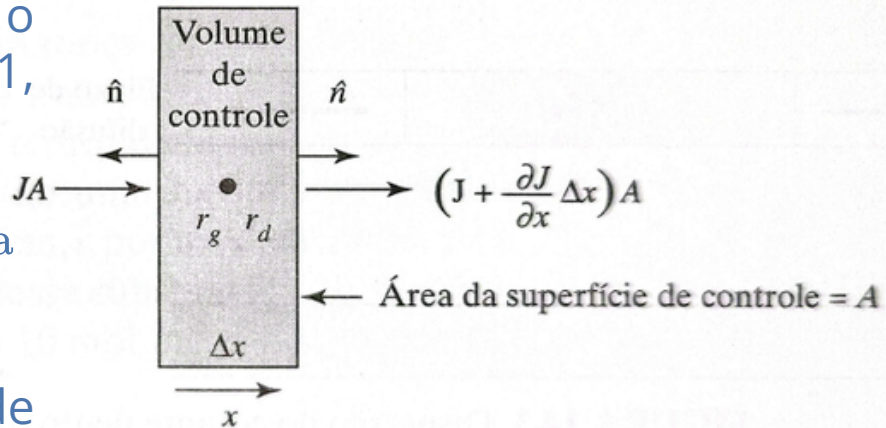
02

O balanço de massa para o volume de controle, figura 1, é dado por:

$$\Delta V \frac{\partial C}{\partial t} = J_{in} A_c - J_{out} A_c \pm \text{rea}$$

Onde:

- $V = A_C \Delta x$: volume de controle [L^3];
- C : concentração da substância [M/L^3];
- $A_C = BH$: a área da seção transversal do reator perpendicular ao fluxo [L^2];
- B : largura do canal [L];
- H : altura do canal [L];
- J_{in} e J_{out} : fluxo de massa que entra e sai, respectivamente, do volume de controle decorrente do transporte [$ML^{-2}T^{-1}$];
- rea : ganho ou perda de massa do elemento por meio de reações ao longo do canal [MT^{-1}].



Dado o balanço de massa:

Fluxo de entrada:

$$J_{in} = UC - K \frac{\partial C}{\partial x}$$

Fluxo de saída:

$$J_{out} = U(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x) - K[\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial C}{\partial x} \Delta x)]$$

Degradação de primeira ordem:

$$-\kappa \Delta V C$$

Substituindo essas informações no balanço de massa, dividindo por $\Delta V = A_c \Delta x$ e tomando o limite quando $\Delta x \rightarrow 0$, temos a equação de difusão-advecção dada por:

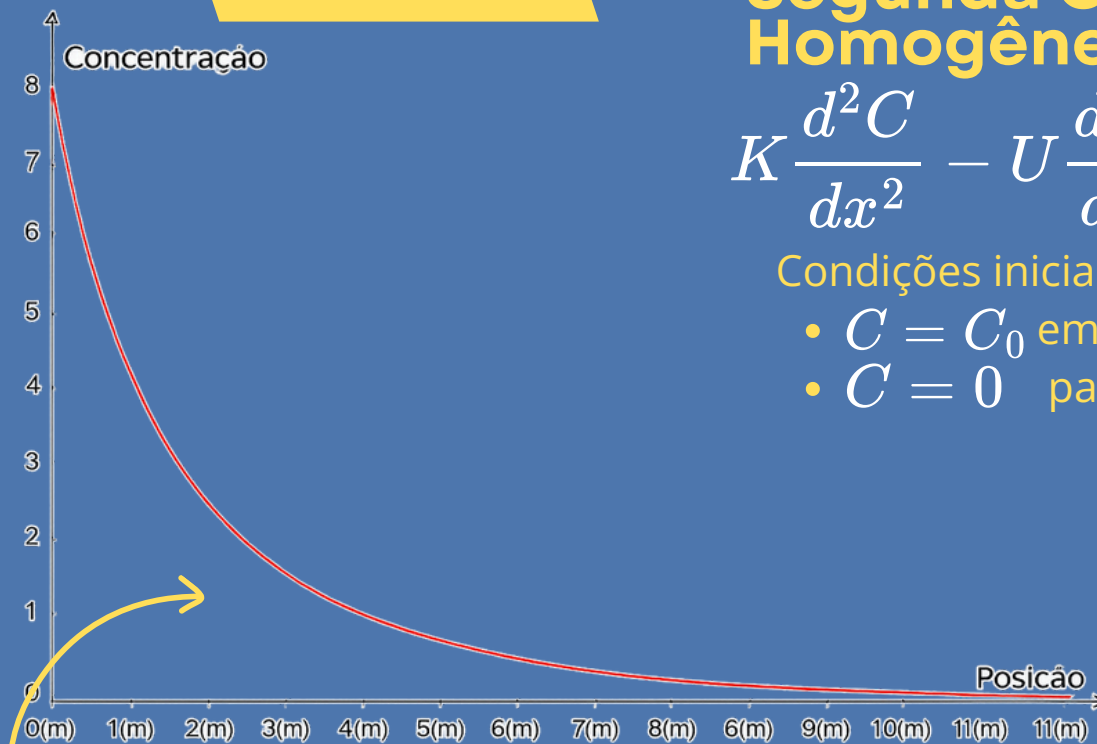
$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \kappa C$$

Equação Diferencial Ordinária Linear de Segunda Ordem Homogênea

$$K \frac{d^2 C}{dx^2} - U \frac{dC}{dx} - \kappa C = 0$$

Condições iniciais e de contorno:

- $C = C_0$ em $x = 0$
- $C = 0$ para $x = \pm\infty$

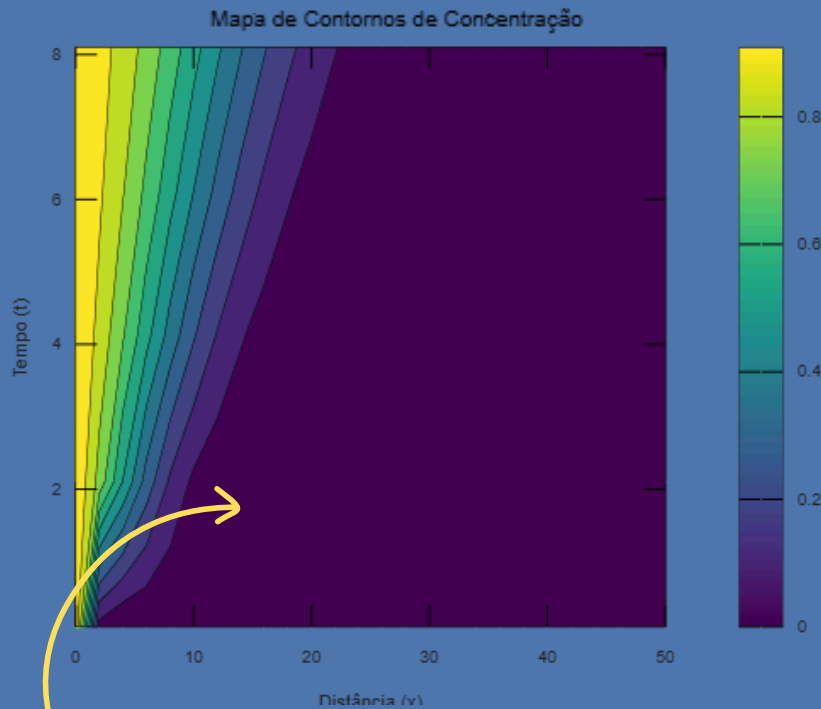


$$C(x) = C_0 e^{\left(\frac{U}{2K} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4K\kappa}{U^2}} \right) \right) x}$$

A equação descrita nesta página modela o transporte **unidimensional** de massa, para um constituinte **não conservativo** em um **sistema estacionário**, ou seja, a concentração em um dado ponto não varia com o tempo. Em específico, a **concentração no ponto de injeção é constante** e, de acordo com o modelo, a **concentração tende a zero à medida que se afasta desse ponto**. Ademais, o método de resolução foi a partir da consideração inicial da concentração ser expressa por uma função exponencial do tipo $C(x) = e^{px}$;

03

Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Homogênea: substância Conservativa.



$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Condições iniciais e de contorno:

- $C = 0$ em $x = 0$ e $t = 0$
- $C = 0$ em $x = \infty$ e $t \geq 0$
- $C = C_0$ em $x = 0$ e $t > 0$

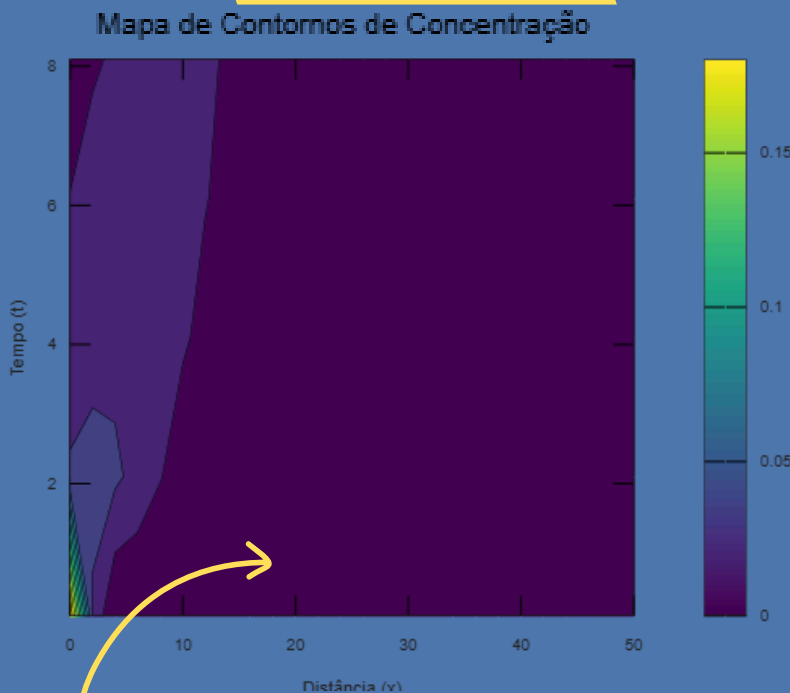
$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - Ut}{2\sqrt{Kt}} \right) + \exp \left(\frac{Ux}{K} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + Ut}{2\sqrt{Kt}} \right) \right]$$

A Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Linear e Homogênea descrita nesta página modela o transporte de uma substância **conservativa** em um **sistema não estacionário**. As condições de contorno estabelecem que não há constituinte no meio anteriormente à injeção e que após o tempo inicial, a concentração no ponto de injeção é constante. Por fim, à medida que se afasta da posição inicial, a concentração tende a zero.

O método de solução adotado foi a **transformada de Laplace**, especificamente a aplicação da propriedade da **transformada da derivada**.

03

Equação Diferencial Parcial Linear Homogênea: pulso instantâneo



$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \kappa C$$

Condições iniciais e de contorno:

- Entrada Instantânea em $x = 0$
- $C = \frac{M}{A} \delta(x)$ em $x = 0$ e $t = 0$
- $C = 0$ em $x = \infty$ e $t > 0$

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Kt}} \exp\left(-\frac{(x - Ut)^2}{4Kt} - \kappa t\right)$$

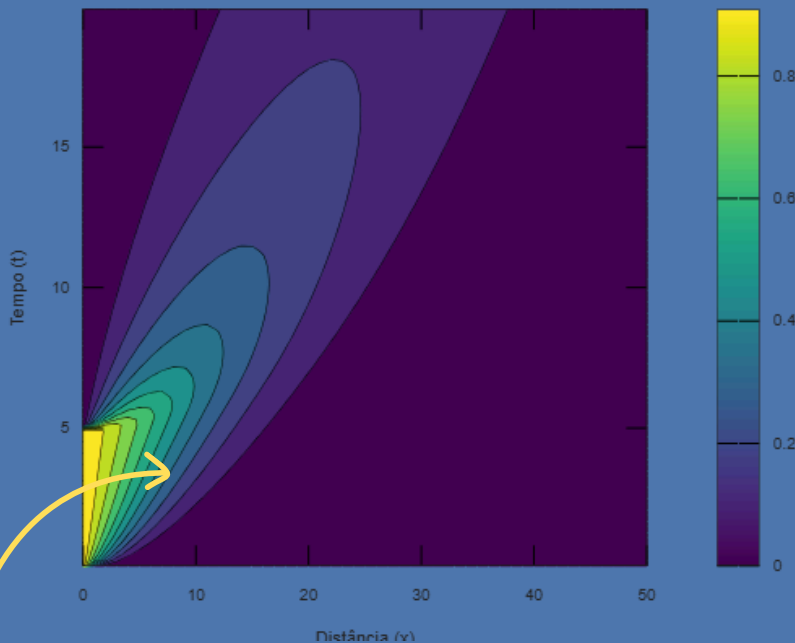
A Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Linear Homogênea: pulso instantâneo modela uma substância **não conservativa** em um **sistema não estacionário**. O modelo considera uma **injeção instantânea na posição inicial**, na qual não há **gradiente de concentração**. Além disso, à medida que se afasta da posição de injeção, a concentração tende a zero.

A resolução foi iniciada com a concentração sendo considerada uma **equação do tipo exponencial** e, em seguida, a aplicação da **transformada de Fourier**, tendo em vista a **propriedade da função Delta de Dirac** quando aplicada essa transformada.

03

Equação Diferencial Parcial Linear Homogênea: entrada retangular

Deslocamento do Pulso no Espaço-Tempo



$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \kappa C$$

Condições iniciais e de contorno:

- Entrada Retangular em $x = 0$
- $C = 0$ em $x = 0$ e $t = 0$
- $C = C_0$ em $x = 0$ e $\xi > t > 0$
- $C = 0$ em $x = 0$ e $t > \xi$

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 - \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 + \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) \right] - g(t - \xi) \frac{C_0}{2} \left[\exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 - \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) + \exp\left(\frac{Ux}{2K}(1 + \Gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + Ut\Gamma}{2\sqrt{Kt}}\right) \right]$$

Onde: $\Gamma = \sqrt{1 + \frac{4K\kappa}{U^2}}$

A Equação Diferencial Parcial de Segunda Ordem Linear Homogênea: entrada retangular modela o transporte de uma substância **não conservativa** em **estado não estacionário**. Em específico, o modelo considera que a entrada de substância é **contínua e constante até cessar em um intervalo de tempo especificado**. Depois de cessar a entrada de constituinte, a substância continua sendo transportada.

O método de resolução aplicado foi a **transformada de Laplace** em relação a variável t , assim como a utilização da **função de degrau unitário**, para representar que a partir de um certo instante já não há mais injeção na posição inicial.

Código GNU on-line

EDP: substância conservativa

Os códigos a seguir podem ser copiados e executados diretamente no software GNU Octave ou em plataformas online de simulação compatíveis com a linguagem MATLAB

```
% 1. Definição das constantes
```

```
C_0 = 1;
```

```
U = 1;    % Velocidade
```

```
K = 5;    % Coeficiente de dispersão (ou difusão)
```

```
% 2. Criação das malhas para x e t
```

```
% Nota: Começamos t em 0.1 para evitar divisão por zero na raiz quadrada
```

```
x_vec = 0:2:100;
```

```
t_vec = 0.1:2:100;
```

```
[X, T] = meshgrid(x_vec, t_vec);
```

```
% 3. Cálculo da função C(x,t)
```

```
% Dividimos a fórmula em duas partes para facilitar a leitura
```

```
termo1 = erfc((X - U .* T) ./ (2 .* sqrt(K .* T)));
```

```
termo2 = exp(U .* X ./ K) .* erfc((X + U .* T) ./ (2 .* sqrt(K .* T)));
```

```
C = (C_0 / 2) .* (termo1 + termo2);
```

```
% Opcional: Visualização 2D (Curvas de nível)
```

```
figure;
```

```
contourf(X, T, C);
```

```
title('Mapa de Contornos de Concentração');
```

```
xlabel('Distância (x)');
```

```
ylabel('Tempo (t)');
```

```
colorbar;
```


Código GNU on-line

EDP: pulso Instantâneo

% 1. Definição das constantes

U = 1; % Velocidade

K = 5; % Coeficiente de dispersão

kp = 0.005; % Coeficiente de decaimento

M = 5; % Massa inicial

A = 10; % Área da seção Transversal

% 2. Criação das malhas para x e t

x_vec = 0:2:50;

t_vec = 0.1:2:10;

[X, T] = meshgrid(x_vec, t_vec);

% 3. Cálculo da função C(x,t)

termo1 = exp(-(X-U.*T).^2)./(4*K.*T)-kp.*T);

termo2 = M ./ (A .* sqrt(4 * pi * K .* T));

C = termo1 .* termo2;

% Visualização 2D (Mapa de Contornos de Concentração)

figure;

contourf(X, T, C);

title('Mapa de Contornos de Concentração');

xlabel('Distância (x)');

ylabel('Tempo (t)');

colorbar;

Código GNU on-line

EDP: entrada retangular

```
% 1. Definição das constantes
C_0 = 1; % Concentração inicial
U = 1; % Velocidade
K = 5; % Coeficiente de dispersão
kp = 0.005; % Coeficiente de decaimento
epsilon = 5;

% 2. Criação das malhas para x e t
x_vec = 0:1:100; % Aumentei para 100 para ver a pluma viajar mais
t_vec = 0.1:0.2:20; % Aumentei para 20 para ver o pulso após o fechamento

[X, T] = meshgrid(x_vec, t_vec);

% 3. Definição da Fórmula usando Função Anônima (evita repetir código)
Gamma = sqrt(1 + (4 * K * kp) / U^2);

% Definimos a função f(x, t)
f_concentracao = @(x, t) (C_0 / 2) .* ( ...
    exp(((U .* x) ./ (2 * K)) .* (1 - Gamma)) .* erfc((x - U .* t .* Gamma) ./ (2 .* sqrt(K .* t))) + ...
    exp(((U .* x) ./ (2 * K)) .* (1 + Gamma)) .* erfc((x + U .* t .* Gamma) ./ (2 .* sqrt(K .* t))) ...);

% 4. Cálculo do Pulso (Superposição)

% Injeção que começou em t = 0
C_ini = f_concentracao(X, T);

% Injeção "negativa" que começa em t = epsilon
T_atrasado = T - epsilon;

% Criamos uma matriz de zeros para o C_fim
C_fim = zeros(size(X));

% Apenas calculamos C_fim onde o tempo atrasado é positivo
% Isso evita divisões por zero e erros de raiz quadrada
indices_ativos = T_atrasado > 0;
C_fim(indices_ativos) = f_concentracao(X(indices_ativos), T_atrasado(indices_ativos));

% O Pulso Real é a diferença (Superposição)
C_pulso = C_ini - C_fim;

% Visualização 2D (Mapa de Contornos da Concentração da Concentração)
figure;
contourf(X, T, C_pulso);
title('Mapa de Contornos da Concentração');
xlabel('Distância (x)');
ylabel('Tempo (t)');
colorbar;
```



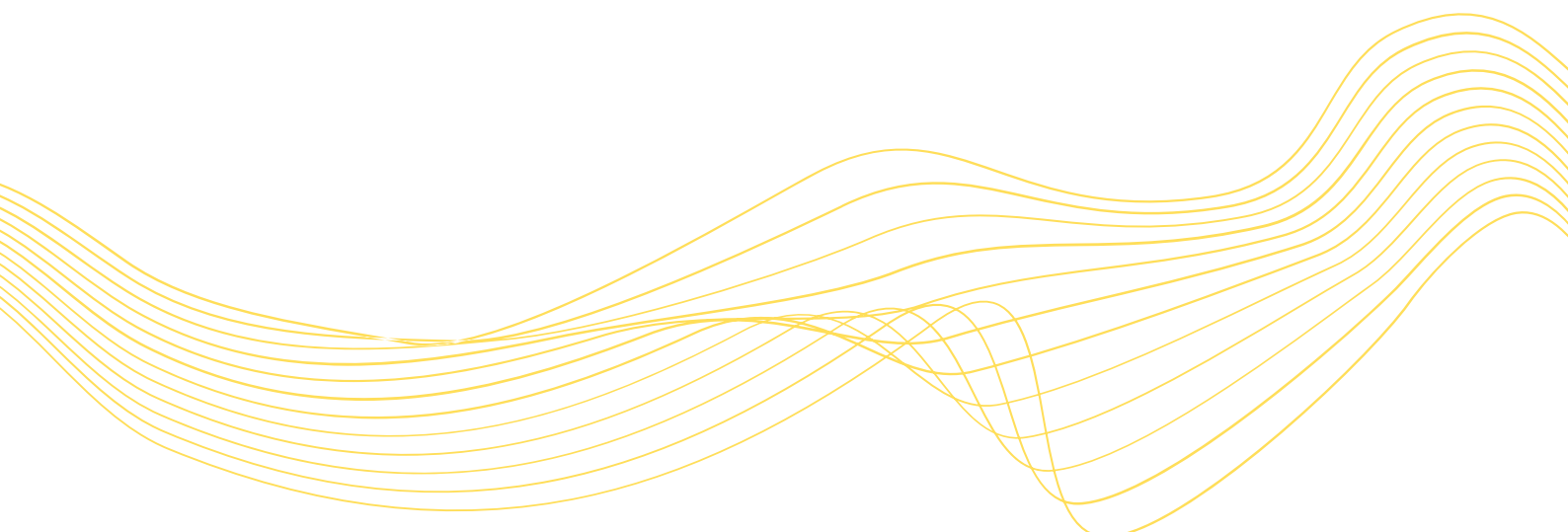
Referências

CETESB (São Paulo). **Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas**. 3. ed. São Paulo: CETESB, 2025. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/areas-contaminadas/documentacao/manual-de-gerenciamento-de-areas-contaminadas/informacoes-gerais/apresentacao-2/>. Acesso em: 18 maio 2026.

CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling**. [S. l.]: Tufts University, 2008.

POTTER, M. C. **Mecânica dos Fluidos**. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

UNITED NATIONS. **The United Nations World Water Development Report 2024: Water for Prosperity and Peace**. Paris: UNESCO, 2024.



e-mail

valdecir.ramos@unesp.br

