

Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera em condições de vento fraco pelo método GILTT

Kelen Berra de Mello, Marco Túlio de Vilhena

Departamento de Matemática Aplicada, UFRGS,
Cep 91509-900, Porto Alegre, RS
E-mail: kelenber@yahoo.com.br, vilhena@mat.ufrgs.br

Davidson Martins Moreira

Programa de Pós-graduação em Engenharia: Energia, Ambiente e Materiais, ULBRA,
Cep 92425-900, Canoas, RS
E-mail: davidson@ulbra.tche.br

Introdução

Nas últimas décadas vem aumentando consideravelmente a preocupação do homem com a emissão de poluentes na atmosfera terrestre. Enquanto o nível de poluição natural pode ser considerado constante no tempo, o nível de poluição ocasionada pelo homem está em aumento contínuo.

Devido aos problemas ocasionados pela poluição do ar, é necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes para prever as possíveis conseqüências do impacto ambiental sobre os diversos ecossistemas. Sendo assim, a simulação de dispersão de poluentes se torna uma boa opção visto que, as observações de campo sofrem muitas dificuldades (problemas operacionais e alto custo).

Atualmente muitos estudos são realizados para resolver a equação de difusão-advecção que rege a dispersão de poluentes na camada limite planetária. Mas, normalmente, estão voltados à condição de vento forte e moderado.

Assim, neste trabalho é proposta uma solução da equação de difusão-advecção para uma das situações críticas para a dispersão de poluentes e que ocorre frequentemente: a condição de vento fraco ($U < 2\text{m/s}$). Nestas condições os poluentes não são capazes de dispersarem-se para longe da fonte e então as áreas próximas são as mais afetadas [1,3,4,6,7]. Vale salientar também, que a complexidade da camada limite planetária cresce com a diminuição dos ventos e aumenta o grau de estabilidade atmosférica. Além disso, instrumentos de medidas convencionais não funcionam adequadamente abaixo de algumas velocidades críticas e as tradicionais técnicas de modelagem são inadequadas para trabalhar em condições de ventos fracos [8,9,10].

Neste trabalho é resolvida a equação (1) que representa a dispersão de poluente na atmosfera em condição de vento fraco, pela técnica da GILTT [11]. Este é um modelo estacionário considerando-se a difusão longitudinal na equação de difusão-advecção.

Solução da equação de difusão-advecção

A equação de difusão-advecção considerando a difusão longitudinal é

$$U \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial z} \right) \quad (1)$$

para $0 < x < \infty$, $0 < z < z_i$, com condições de contorno:

$$\begin{cases} K_z \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial z} = 0, & z = 0, z_i \\ U \bar{c}(0, z) = Q \delta(z - Hs), & x = 0 \end{cases} \quad (2)$$

onde x é a distância longitudinal, z é a altura, \bar{c} é a concentração de poluentes integrada em relação a y (distância transversal), U é a velocidade média longitudinal, K_x é o coeficiente de difusão longitudinal e K_z é o coeficiente de difusão vertical.

Para resolver esta equação será utilizada a técnica GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique), que consiste em resolver a equação via GITT (Generalized Integral Technique) resultando numa EDO, a qual será resolvida pela Transformada de Laplace. Assim, será aplicada a técnica da GITT em z , pois as condições em z são homogêneas, a equação

apresenta o termo difusivo e o domínio em z é finito (condições necessárias para a aplicação da GITT).

Assim, aplicamos a regra da cadeia em (1) e dividimos em ambos os lados por K_z :

$$U \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}(x, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial K_x}{\partial x} \left(\frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial x} \right) + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}(x, z)}{\partial z^2} + \frac{\partial K_z}{\partial z} \left(\frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial z} \right) \quad (3)$$

Assim escolhendo $\frac{\partial^2 \bar{c}(x, z)}{\partial z^2}$ como o operador de Sturm-Liouville, e sendo

$$L\{\Psi\} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k(z) \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) + q(z) \Psi(z), \text{ onde } k(z) = 1$$

e $q(z) = 0$, logo $L\{\Psi\} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$ e assim as

condições de contorno se tornam $\frac{\partial \Psi'(0)}{\partial z} = 0$ e $\frac{\partial \Psi'(z_i)}{\partial z} = 0$.

Para determinar as autofunções de qualquer operador usamos $\Psi''(z) + \lambda^2 \Psi(z) = 0$, tendo $0 < z < z_i$ temos:

$$\begin{cases} \Psi''(z) + \lambda^2 \Psi(z) = 0 \\ \Psi'(0) = 0 \\ \Psi'(z_i) = 0 \end{cases} \quad (4)$$

cuja solução é $\Psi_i(\lambda, z) = \cos(\lambda_i z)$ e $\lambda_i = \frac{i\pi}{z_i}$,

com $i = 0, 1, 2, \dots$

Substituindo a fórmula da inversa

$$\bar{c}(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}, \text{ onde } \sqrt{N_i} = \int_0^{z_i} \Psi_i^2 dz$$

em (3)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) + \\ & \frac{K'_z}{K_z} \left(\frac{\partial}{\partial z} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) + \\ & \frac{K_x}{K_z} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) + \\ & \frac{K'_x}{K_z} \left(\frac{\partial}{\partial x} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) \\ & - \frac{U}{K_z} \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) \\ & - \frac{\omega}{K_z} \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Como as funções são suaves podemos reescrever a equação (5)

$$\begin{aligned} & K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi''_i(z)}{\sqrt{N_i}} + K'_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi'_i(z)}{\sqrt{N_i}} + \\ & K_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i''(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + K'_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i'(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \\ & - U \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i'(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} - \omega \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i'(x) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

onde $\Psi'_i(z)$ representa a derivada primeira de $\Psi_i(z)$ e $\Psi''_i(z)$ a derivada segunda.

Multiplicando ambos os lados por $\frac{\Psi_j}{\sqrt{N_j}}$

e integrando de 0 a z_i temos

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i(x)} \int_0^{z_i} K_z \frac{\Psi_i'(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz + \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i(x)} \int_0^{z_i} K'_z \frac{\Psi_i'(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz + \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i''(x)} \int_0^{z_i} K_x \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz + \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i'(x)} \int_0^{z_i} K'_x \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz - \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i'(x)} \int_0^{z_i} U \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz - \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i'(x)} \int_0^{z_i} \omega \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz = 0
\end{aligned} \tag{7}$$

Lembrando que $\Psi''(z) + \lambda^2 \Psi(z) = 0$ então $\Psi''(z) = -\lambda^2 \Psi(z)$, substituindo a equação

$$\begin{aligned}
& - \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 \overline{\bar{c}_i(x)} \int_0^{z_i} K_z \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz + \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i(x)} \int_0^{z_i} K'_z \frac{\Psi_i'(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz + \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i''(x)} \int_0^{z_i} K_x \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz + \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i'(x)} \int_0^{z_i} K'_x \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz - \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i'(x)} \int_0^{z_i} U(z) \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \\
& - \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i'(x)} \int_0^{z_i} \omega \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz = 0
\end{aligned} \tag{8}$$

Reorganizando a expressão (8) temos

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i''(x)} \int_0^{z_i} K_x \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz + \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i'(x)} \int_0^{z_i} (K'_x - U - \omega) \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \\
& \sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i(x)} \left(\int_0^{z_i} K'_z \frac{\Psi_i'(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \right. \\
& \left. - \lambda_i^2 \int_0^{z_i} K_z \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \right) = 0
\end{aligned} \tag{9}$$

Tomando

$$\begin{aligned}
Y &= \{ \overline{\bar{c}_j''(x)} \} \\
A &= \{ a_{i,j} \}, \text{ onde} \\
a_{i,j} &= \int_0^{z_i} K_x \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \\
B &= \{ b_{i,j} \}, \text{ onde} \\
b_{i,j} &= \int_0^{z_i} (K'_x - U - \omega) \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \\
C &= \{ c_{i,j} \}, \text{ onde} \\
c_{i,j} &= \frac{1}{K_x} \left(\int_0^{z_i} K'_z \frac{\Psi_i'(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \right. \\
& \left. - \lambda_j^2 \int_0^{z_i} K_z \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i N_j}} dz \right)
\end{aligned} \tag{10}$$

Substituindo (10) na equação (9), temos

$$AY'' + BY' + CY = 0 \tag{11}$$

Multiplicando ambos os lados pela inversa na matriz A, temos

$$A^{-1}AY'' + A^{-1}BY' + A^{-1}CY = 0$$

e renomeando

$$\begin{aligned}
F &= A^{-1}B \\
G &= A^{-1}C
\end{aligned}$$

Temos a seguinte equação diferencial

$$Y'' + FY' + GY = 0, \tag{12}$$

onde F e G são funções dependentes de x.

Para resolver esta equação fazemos a seguinte mudança de variável

$$\begin{cases} S_1 = Y \\ S_2 = Y \end{cases} \rightarrow \begin{cases} S'_1 = Y' \\ S'_2 = Y'' \end{cases}, \text{ então}$$

$$S'_1 = S_2 \rightarrow S'_1 - S_2 = 0 \quad (13)$$

Assim nos resulta no seguinte sistema

$$\begin{cases} S'_1 - S_2 = 0 \\ S'_2 + FS_2 + GS_1 = 0 \end{cases} \quad (14)$$

$$\begin{cases} S'_1 + 0S'_2 + 0S_1 - S_2 = 0 \\ 0S'_1 + S'_2 + FS_1 + GS_2 = 0 \end{cases}$$

Escrevendo (14) na forma matricial

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} S'_1 \\ S'_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & I \\ G & F \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

Resultando na EDO

$$S' + H \cdot S = 0, \text{ onde } H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix} \quad (16)$$

Para determinar qual é a condição inicial da EDO (16), aplicamos GITT na condição inicial da equação (1) em relação a x e para isto façamos a substituição da fórmula da inversa

$$\bar{c}(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(x)} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}, \text{ onde } \sqrt{N_i} = \int_0^{z_i} \Psi_i^2 dz$$

em (2), resultando em

$$U \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{c}_i(0)} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} = Q \delta(z - Hs). \quad (17)$$

Multiplicando ambos os lados por $\frac{\Psi_j}{\sqrt{N_j}}$

e integrando de 0 a z_i temos

$$\sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i(0)} \int_0^{z_i} U \frac{\Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz = \int_0^{z_i} \frac{\Psi_j(z) Q \delta(z - Hs)}{\sqrt{N_j}} dz \quad (18)$$

Pela propriedade de δ temos

$$\sum_{i=0}^{\infty} \overline{\bar{c}_i(0)} \int_0^{z_i} U \frac{\Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz = \frac{\Psi_j(Hs) Q}{\sqrt{N_j}}. \quad (19)$$

Seja $W = \int_0^{z_i} U \frac{\Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz$ e então

$$\overline{\bar{c}_i(0)} = \frac{\Psi_j(Hs) Q}{\sqrt{N_j}} W^{-1} = P \text{ e portanto, temos}$$

$$\begin{cases} S_1 = P \\ S_2 = \left. \frac{\partial y}{\partial x} \right|_{x=R} = 0 \end{cases} \quad (20)$$

onde R é muito distante da fonte.

A partir de agora utilizaremos o método GILTT onde faremos o uso da transformada de Laplace¹ na equação (16), vale salientar que H é uma função de x, assim para podermos aplicar a transformada de Laplace, dividimos H em subintervalos e em cada intervalo pegamos valores médio de H.

Aplicando a transformada temos

$$\begin{aligned} L\{S' + H \cdot S = 0\} &\rightarrow L\{S'\} + L\{HY\} = L\{0\} \\ &\rightarrow s\bar{S}(s) - S(0) + H\bar{S}(s) = 0 \\ &\rightarrow (sI + H) \cdot \bar{S}(s) = S(0) \end{aligned} \quad (21)$$

onde $\bar{S}(s)$ significa o S transformado.

Para facilitar a inversão da matriz $(sI + H)$ chamamos $H = X \cdot D \cdot X^{-1}$, onde X é a matriz dos autovetores de H, e D a matriz diagonal de autovalores de H, e lembrando que a matriz identidade pode ser escrita como $I = X \cdot X^{-1}$. A equação (21) se tornará

$$\begin{aligned} (sX \cdot X^{-1} + X \cdot D \cdot X^{-1}) \cdot \bar{S}(s) &= S(0) \\ X \cdot (sI + D) \cdot X^{-1} \cdot \bar{S}(s) &= S(0) \\ X^{-1} \cdot X \cdot (sI + D) \cdot X^{-1} \cdot \bar{S}(s) &= X^{-1} \cdot S(0) \\ (sI + D)^{-1} (sI + D) \cdot X^{-1} \cdot \bar{S}(s) &= \\ (sI + D)^{-1} X^{-1} \cdot S(0) & \\ X \cdot X^{-1} \cdot \bar{S}(s) &= X (sI + D)^{-1} X^{-1} \cdot S(0) \\ \bar{S}(s) &= X (sI + D)^{-1} X^{-1} \cdot S(0) \end{aligned} \quad (22)$$

¹ Se continuássemos a utilizar o método de GITT resolveríamos a equação (18) numericamente. A vantagem de utilizar o método GILTT é que esta equação será resolvida analiticamente.

$$\text{onde } (sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s + \lambda_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s + \lambda_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s + \lambda_n} \end{bmatrix}$$

Aplicando Laplace inversa em (22) temos

$$L^{-1}\{\overline{S}(s)\} = L^{-1}\{X(sI + D)^{-1}X^{-1} \cdot S(0)\}$$

$$S(x) = X \cdot L^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} \cdot X^{-1} \cdot S(0) \quad (23)$$

onde

$$L^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s + \lambda_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s + \lambda_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s + \lambda_n} \end{bmatrix}$$

$$= L^{-1}\left\{\frac{1}{s + \lambda_i}\right\} = e^{-x\lambda_i}$$

Denominamos E como a matriz $E = \{e^{-x\lambda_i}\}$ e assim, a equação (26) se torna

$$S(x) = X \cdot E \cdot X^{-1} \cdot S(0) \quad (24)$$

Como $S(x) = \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \end{bmatrix}$ então descobrimos

que é $S_1 = Y = \overline{c_i(x)}$

Portanto a solução da equação (1) é

$$\overline{c}(x, z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)}\Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + \overline{c_0(x)}\Psi_0(z) \quad (25)$$

$$\overline{c}(x, z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)}\Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + \overline{c_0(x)} \quad (26)$$

Conclusão

Neste trabalho foi obtida a solução analítica da equação de difusão-advecção bidimensional estacionária em situações de ventos fracos representada pela equação (26). Esta solução será

futuramente implementada e validada utilizando dados experimentais existentes na literatura [2,5].

Referências

- [1] P. Arya. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. Appl. Meteor, 34, 1112-1122, 1995.
- [2] M. L. Barad, Project Prairie Grass. Geophysical Research Paper, Vols I e II, GRD, Bedford, MA, 59, 1958.
- [3] G. Brusasca, G. Tinarelli, D. Anfossi. Particle model simulation of diffusion in low Wind speed stable conditions. Atmos. Environ, 26, 707-723, 1992.
- [4] M. C. Cirillo, A. A. Poli. An inter comparison of semi empirical diffusion models under low wind speed, stable conditions. Atmos. Environ., 26, 765-774, 1992.
- [5] S. E. Gryning. Elevated source SF6 – tracer dispersion experiments in the Copenhagen area. Report RISOE-R-446, Risoc National Laboratory, Roskilde, Denmark, 1981.
- [6] D. Oettl, R. A. Almbauer, P. J. Sturm. A new method to estimate diffusion in stable, low-wind conditions. Atmos. Environ., 40, 259-268, 2001.
- [7] J. F. Sagendorf, C. R. Dickson. Diffusion under low wind-speed, inversion conditions, U.S. National Oceanic and Atmospheric Administration Technical Memorandum ERL ARL-52, 1974.
- [8] M. Sharan, M.P. Singh, A.K., Yadav. A mathematical model for atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. Atmos. Environ., 30 (7), 1137-1145, 1996a.
- [9] M. Sharan, M.P. Singh, A.K., Yadav, P. Agarwal, S. Nigam, A mathematical model for dispersion of air pollutants in low wind conditions. Atmos. Environ., 30 (8), 1209-1220, 1996b.
- [10] P. Zannetti, Air pollution modeling, em Computational Mechanics Publications, Southampton, pp. 444, 1990.
- [11] S. Wortmann, M.T. Vilhena, D. M. Moreira, D. Buske, A new Analytical Approach to Simulate the Pollutant Dispersion in the PBL. Atmos. Environ., 39, 2187-2194, 2005.