

UMA SOLUÇÃO ALTERNATIVA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO FRACIONÁRIA: O CASO DE UMA FONTE ELEVADA NA CLP

Palmira Maria de Santana Acioli, palmira.engmec@gmail.com¹

Frederico Andrade Xavier Conceição, fredxavier85@gmail.com²

Davidson Martins Moreira, davidson.moreira@gmail.com³

¹Centro universitário SENAI CIMATEC, Salvador - BA

²Centro universitário SENAI CIMATEC, Salvador - BA

³Centro universitário SENAI CIMATEC, Salvador - BA

Resumo: O fenômeno de dispersão de poluentes na atmosfera é modelado através da equação de difusão-advecção. Neste trabalho apresenta-se uma solução da equação de difusão-advecção fracionária aplicada em problemas de dispersão de poluentes na camada limite planetária (CLP). A solução da equação é obtida através do método de decomposição por Laplace (MDL) e perturbação por homotopia, considerando-se a derivada de Caputo, o qual é a combinação do método de decomposição e a transformada de Laplace com a derivada de Caputo. Os resultados das simulações foram confrontados com dados experimentais tradicionais da literatura (Copenhagem), mostrando boa performance com a concentração observada ao nível do solo.

Palavras-chave: Método da decomposição por Laplace; equação de difusão-advecção; derivadas fracionárias; camada limite planetária.

1. INTRODUÇÃO

O processo de dispersão de poluentes geralmente é modelado pela equação de difusão-advecção, de forma que a comunidade científica tem um grande interesse na obtenção de soluções numéricas e analíticas desta equação. Neste sentido, existe um grande avanço científico em relação a obtenção de soluções da equação de difusão-advecção com derivadas tradicionais (ordem inteira). Vários métodos numéricos e analíticos foram usados na tentativa de solucionar esse problema com derivadas tradicionais: método da decomposição de Adomian (Adomian, 1994), transformada integral (Biazar et al., 2009), método da decomposição por Laplace (Khan et al., 2010), método das diferenças finitas (Debnath, 2012), método iterativo variacional (Golbabai et al., 2017), entre outros, mas todos possuem limitações. No entanto, na literatura, ainda há uma lacuna na obtenção de soluções analíticas considerando-se derivadas fracionárias aplicadas em problemas práticos de dispersão.

Neste contexto, o método de perturbação por homotopia (HPM) foi desenvolvido pelo matemático chinês He, em 1992. Este método introduz um parâmetro de homotopia, onde os valores variam entre 0 e 1. Quando o parâmetro for igual a zero, o sistema de equações geralmente se reduz para uma forma simplificada, a qual normalmente admite uma solução simples. Quando o parâmetro aumenta gradualmente para 1, o sistema passa por uma sequência de deformações e a solução de cada uma está próxima da fase anterior da deformação. Quando o parâmetro for igual a 1, o sistema assume a forma original da equação, e a fase final da deformação dá o resultado desejado. Uma das características mais marcantes do HPM é que apenas alguns termos de perturbação são suficientes para obter-se uma solução precisa.

Portanto, este trabalho tem como objetivo avaliar o método da decomposição por Laplace, aplicando-se o conceito de derivadas fracionárias na solução da equação de difusão-advecção estacionária bidimensional. A grande vantagem desta metodologia é a sua simplicidade na obtenção de uma solução analítica.

2. METODOLOGIA

2.1. Método He-Laplace

Para demonstrar a ideia básica do método considera-se uma equação diferencial não-linear e não-homogênea, na seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} + Ry(x,t) + Ny(x,t) = f(x,t) \quad (1)$$

com as condições iniciais dadas por:

$$y(x, 0) = \alpha(x) \quad (1a)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t}(x, 0) = \beta(x) \quad (1b)$$

onde R é um operador diferencial linear, N representa um operador diferencial não-linear e $f(x,t)$ é o termo fonte.

Aplicando-se a transformada de Laplace (denotada por L) na variável t em ambos os lados da Eq. (1) tem-se,

$$L \left[\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} \right] + L[Ry(x,t)] + L[Ny(x,t)] = L[f(x,t)] \quad (2)$$

resultando,

$$s^2 L[Y(x,t)] - sy(x,0) - \frac{\partial y}{\partial t}(x,0) = -L[Ry(x,t)] - L[Ny(x,t)] + L[f(x,t)] \quad (3)$$

Assim, aplicando-se as condições dadas e a inversa da transformada de Laplace, obtém-se:

$$y(x,t) = F(x,t) - L^{-1} \left[\frac{1}{s^2} (L[Ry(x,t)] + L[Ny(x,t)]) + \frac{1}{s^2} (L[f(x,t)]) \right] \quad (4)$$

onde $F(x,t)$ representa as condições iniciais prescritas. Agora, aplicando-se o método de perturbação por homotopia:

$$y(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x,t) \quad (5)$$

sendo que os termos não lineares podem ser decompostos como,

$$Ny(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} p^n H_n(y) \quad (6)$$

onde os termos H_n são os polinômios de He⁶. Logo, colocando-se as Eqs. (5) e (6) em (4) resulta,

$$\sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x,t) = F(x,t) - p \left(L^{-1} \left[\frac{1}{s^2} L \left[R \sum_{n=0}^{\infty} p^n y_n(x,t) + \sum_{n=0}^{\infty} p^n H_n(y) \right] \right] \right) \quad (7)$$

Finalmente, comparando-se os termos com potências de p surgem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} p^0: y_0(x,t) &= F(x,t) \\ p^1: y_1(x,t) &= - \left(L^{-1} \left[\frac{1}{s^2} L [Ry_0(x,t) + H_0(y)] \right] \right) \\ p^2: y_2(x,t) &= - \left(L^{-1} \left[\frac{1}{s^2} L [Ry_1(x,t) + H_1(y)] \right] \right) \\ p^3: y_3(x,t) &= - \left(L^{-1} \left[\frac{1}{s^2} L [Ry_2(x,t) + H_2(y)] \right] \right) \\ &\vdots \end{aligned} \quad (8)$$

onde os polinômios de He são definidos como:

$$H_n(y_0, \dots, y_n) = \frac{1}{n!} \frac{\partial^n}{\partial p^n} N\left(\sum_{k=0}^n p^k y_k\right)_{p=0}, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

Cabe ressaltar que neste trabalho será aplicado o método He-Laplace para resolver uma equação linear, sem perda de generalidade, pois o método é geral no sentido de ser possível resolver equações não-lineares.

2.2. Solução da equação de difusão-advecção utilizando derivada fracionária

A modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera pode ser dada pela equação de difusão-advecção bidimensional fracionária (Goulart, 2017) dada por:

$$U(z) \frac{\partial^\alpha c(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(z) \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) \quad (10)$$

para $0 < \alpha \leq 1$, onde c representa a concentração de poluentes, α é o termo de ordem fracionária, $U(z)$ representa o perfil vertical da velocidade média do vento na direção longitudinal (eixo x) e $K_z(z)$ é o perfil vertical do coeficiente de difusão vertical (eixo z). Neste trabalho utilizou-se a definição de Caputo, pois ela incorpora as condições iniciais da função, o que a torna fundamental para resolver problemas tais como os de dispersão de poluentes. Por simplicidade, sem perda de generalidade, considera-se U e K constantes:

$$U \frac{\partial^\alpha c(x, z)}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 c(x, z)}{\partial z^2} \quad (11)$$

para $0 < z < h$ e $x > 0$. Para solução da equação (11) necessita-se determinar as condições de contorno. Desta forma, tem-se a condição de fluxo nulo de contaminantes no topo do domínio vertical e na superfície:

$$K \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = h \quad (12a)$$

$$K \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = z_0 \quad (12b)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade e h é a altura da camada limite planetária (CLP). Além disto, tem-se uma fonte com taxa de emissão Q na altura da fonte, H_S :

$$c(0, z) = \frac{Q}{U} \delta(z - H_S) \quad \text{em } x = 0 \quad (13)$$

onde $\delta(\cdot)$ é a função delta de Dirac, sendo aproximada pela seguinte expressão:

$$\delta(z - H_S) = \frac{1}{h} [1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [\cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_S)]] \quad (14)$$

sendo os autovalores dados por:

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{h} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

Logo, a condição de fonte pode ser reescrita como:

$$c(0, z) = \frac{Q}{Uh} [1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [\cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_S)]] \quad (16)$$

Agora é possível usar a metodologia He-Laplace. Aplicando-se a transformada de Laplace na Eq. (11) utilizando a definição Caputo (Caputo, 1967), na variável x , obtém-se:

$$U[s^\alpha \hat{c}(s, z) - s^{\alpha-1} c(0, z)] = L \left[K \frac{\partial^2 \hat{c}(x, z)}{\partial z^2} \right] \quad (17)$$

onde $\hat{c}$ representa a concentração transformada. Rearranjando-se a equação anterior, obtém-se:

$$\hat{c}(s, z) = \frac{c(0, z)}{s} + \frac{K}{Us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 \hat{c}(x, z)}{\partial z^2} \right] \quad (18)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Eq. (18), resulta:

$$c(x, z) = c_0 + L^{-1} \left[\frac{K}{Us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 \hat{c}(x, z)}{\partial z^2} \right] \right] \quad (19)$$

onde c_0 é dado pela Eq. (16):

$$c_0 = \frac{Q}{Uh} [1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [\cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s)]] \quad (20)$$

De forma que é possível escrever na forma genérica os demais termos da solução em

$$c_n = L^{-1} \left[\frac{K}{Us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_{n-1}}{\partial z^2} \right] \right] \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (21)$$

com solução geral dada por:

$$c(x, z) = c_0 + c_1 + c_2 + \dots + c_n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \quad (22)$$

Logo, exemplificando com os dois primeiros termos provenientes da Eq. (21), tem-se:

$$c_1 = L^{-1} \left[\frac{K}{Us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{Us^{\alpha+1}} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} \right] = -\frac{2Q}{Uh} \frac{K}{U} \frac{x^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (23)$$

e

$$c_2 = L^{-1} \left[\frac{K}{Us^\alpha} L \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] \right] = L^{-1} \left[\frac{K}{Us^{2\alpha+1}} \frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} \right] = \frac{K^2}{U^2} \frac{2Q}{Uh} \frac{x^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \quad (24)$$

Portanto, agrupando-se estes primeiros termos resulta,

$$c(x, z) = \frac{Q}{Uh} + \frac{2Q}{Uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \cdot \left\{ 1 - \frac{K\lambda_n^2}{U} \frac{x^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} + \frac{K\lambda_n^4}{U} \frac{x^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} + \dots \right\} \quad (25)$$

De forma que a solução é dada por:

$$c(x, z) = \frac{Q}{Uh} + \frac{2Q}{Uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_\alpha \left(-\frac{\lambda_n^2 K}{U} x^\alpha \right) \quad (26)$$

onde E_α é a função de Mittag-Leffler, a qual é intrínseca a solução de problemas com derivadas fracionárias.

Neste trabalho o coeficiente de difusão vertical (Degrazia et al., 1997) é dado por:

$$K_z(z) = 0.22w^*h\left(\frac{z}{h}\right)^{1/3}\left(1-\frac{z}{h}\right)^{1/3}\left[1 - e^{\left(-4\frac{z}{h}\right)} - 0.0003e^{\left(8\frac{z}{h}\right)}\right] \quad (27)$$

onde w^* é a velocidade convectiva. Salienta-se que é feita uma média, desde o solo ($z = z_0$) até h (altura da CLA), para obtenção do coeficiente de difusão médio constante K_z .

3. RESULTADOS

As simulações realizadas com a Eq. (26) foram confrontadas os tradicionais experimentos de Copenhagen (Gryning, 1984). Neste experimento o traçador SF6 foi liberado de uma altura de 115 m e coletado ao nível do solo em distâncias entre 2 e 6 km do ponto de liberação. A estabilidade atmosférica pode ser considerada moderadamente convectiva.

As Figuras 1 e 2 abaixo mostra-se o gráfico de espalhamento da concentração em função de diferentes ordens da derivada ($\alpha = 0,7$; $\alpha = 0,9$ e $\alpha = 1,0$), com a seguinte distinção: Caso 1 usa U constante medido na altura de 10 m, e Caso 2 usa U constante medido na altura de 115 m. Observe que neste experimento os dados de concentração são normalizados pela taxa de emissão ($c(x,z)/Q$), resultando a unidade $s.m^{-2}$.

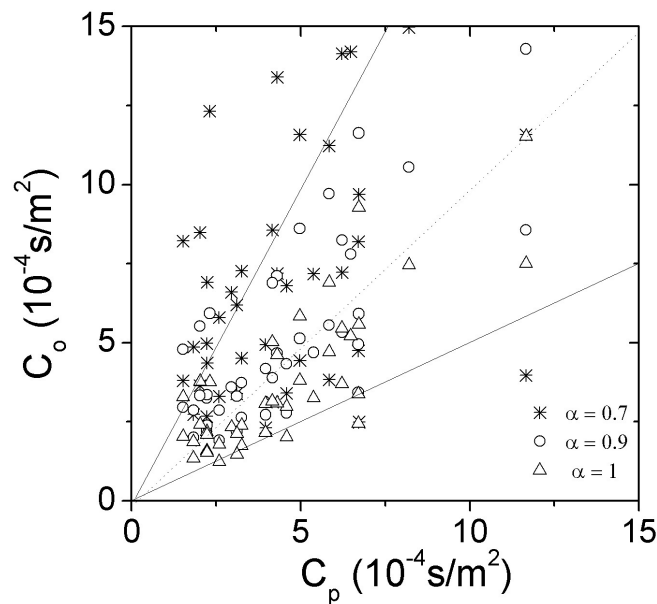


Figura 1: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p), normalizadas com a taxa de emissão (c/Q): Caso 1 (U em 10 m).

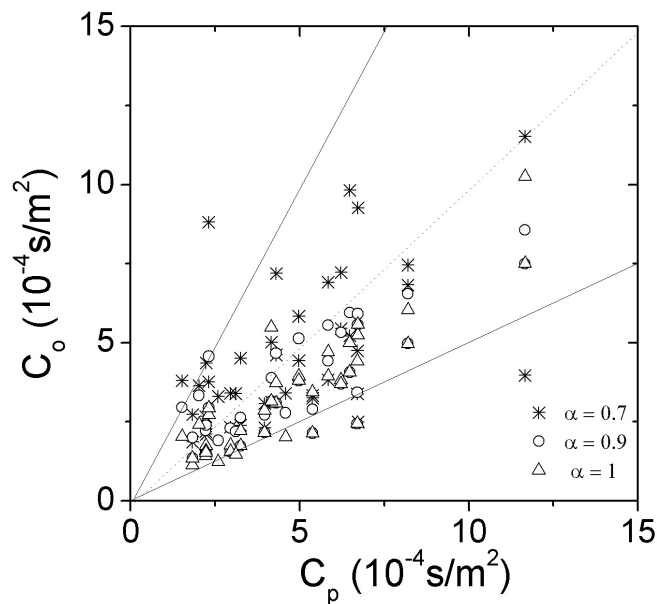


Figura 2: Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (C_o) e Preditas pelo modelo (C_p), normalizadas com a taxa de emissão (c/Q): Caso 2 (U em 115 m).

Na Tabela 1 a seguir mostram-se os resultados estatísticos do confronto do modelo nos dois casos. Os melhores resultados são para erro quadrático médio normalizado (NMSE), Fracional bias (FB) e desvio padrão (FS) próximos a zero, e fator de correlação (COR) e fator de (FAT2) iguais a 1.

Tabela 1: Índices estatísticos

Caso	NMSE	FAT2	COR	FB	FS
Caso 1 ($\alpha=0.7$)	0.68	0.39	0.58	-0.67	-0.28
Caso 1 ($\alpha=0.9$)	0.20	0.87	0.84	-0.32	-0.24
Caso 1 ($\alpha=1$)	0.90	0.96	0.85	0.04	-0.03
Caso 2 ($\alpha=0.7$)	0.38	0.83	0.22	0.00	0.18
Caso 2 ($\alpha=0.9$)	0.12	1.00	0.85	0.14	0.32
Caso 2 ($\alpha=1$)	0.32	0.78	0.87	0.42	0.42

Observa-se prontamente pela Figura 1(b) e Tabela 1 que os resultados são melhores para o Caso 2 ($\alpha = 0.9$), com vento a 115 m de altura. A solução com derivadas fracionárias não conseguiu capturar o efeito de memória e a forte convecção presente neste experimento.

Na figura 3 mostra as concentrações integradas lateralmente em função da distância da fonte, considerando-se a Eq. (26) em diferentes ordens da derivada: $\alpha = 0.7$; $\alpha = 0.9$ e $\alpha = 1.0$, utilizando o coeficiente de difusão médio na vertical (Eq. (27)), com a velocidade medida 115 m. Para esta situação utilizou-se o experimento 1 de Copenhagen.

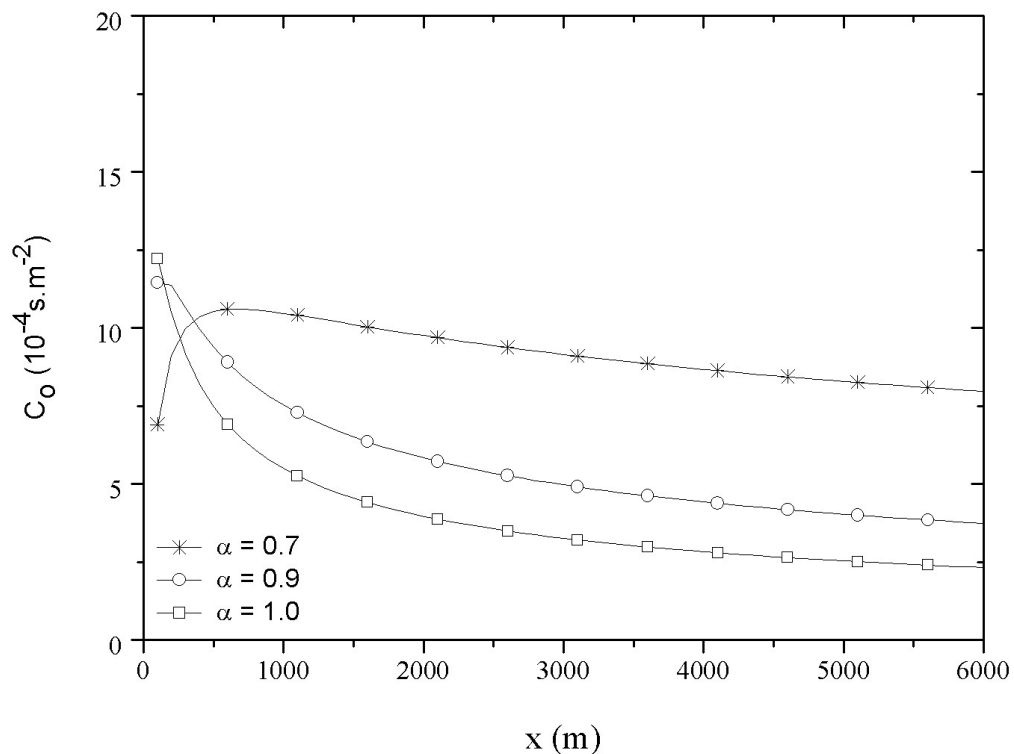


Figura 3: Gráfico das concentrações observadas (C_o) em função da distância da fonte (x) em diferentes ordens da derivada, para o experimento 1 de Copenhagen, com e a velocidade medida 115 m. Considerando-se a Eq. (27), utilizando o coeficiente de difusão da Eq. (28).

A figura 3 mostra claramente que o parâmetro alfa influencia no processo de dispersão. Para a simulação com ordem inteira ($\alpha = 1.0$), observa-se maior concentração de poluentes na região próxima a fonte, com tendência a diminuir mais rapidamente para distancias mais afastadas da fonte. A medida que alfa diminui percebe-se que o pico de concentração vai diminuindo e muda sua posição (localização do pico de concentração é um dos parâmetros mais

importantes no contexto de poluição atmosférica), com tendência de manter a concentração em níveis elevados para distâncias maiores.

4. CONCLUSÕES

No presente trabalho foi obtida pela primeira vez a solução da equação de difusão-advecção fracionária através do método da decomposição por Laplace. Os resultados foram satisfatórios e mostraram a influência do parâmetro α , ordem da derivada, sobre a concentração observada ao nível do solo. Verificou-se a grande utilidade de uma solução analítica, pois apresenta resultados de forma rápida e a influência direta sobre cada parâmetro da equação de forma simples.

Apesar de que para lidar com situações reais e mais complexas (por exemplo, reações químicas) é necessário usar um modelo numérico, é útil examinar primeiramente as possíveis soluções analíticas para se obter um quadro conhecido e testar as soluções. Nesse sentido, as soluções analíticas são úteis para uma variedade de aplicações, tais como fornecer análises aproximadas de cenários alternativos de poluição e realizar análises de sensibilidade para investigar os efeitos de vários parâmetros ou processos envolvidos no transporte de contaminantes. Finalmente, é importante frisar que a grande vantagem da metodologia empregada neste trabalho é a sua simplicidade na obtenção de uma solução analítica.

5. AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao apoio financeiro do CNPq e FAPESB.

6. REFERÊNCIAS

- Adomian, G. (1994), Solution of physical problems by decomposition. *Computers & Mathematics with Applications*, vol.27, n. 9-10, pp.145-154.
- Biazar, J. and Ghazvini, H. (2009), He's homotopy perturbation method for solving systems of Volterra integral equations of the second kind. *Chaos, Solitons and Fractals*, vol.39, pp.370-377.
- Caputo, Michele. Linear models of dissipation whose q is almost frequency independent—ii. *Geophysical Journal International*, Blackwell Publishing Ltd Oxford, UK, v. 13, n. 5, p. 529–539, 1967.
- Debnath, L. (2012), *Nonlinear partial differential equations for scientists and engineers*, Springer Science + Business Media, New York.
- Degrazia, G. A, Rizza, U. and Mangia, C., Tiribassi, T.: Validation of a new turbulent parameterization for dispersion models in convective conditions. *Boundary-Layer Meteorol.*, v.85, p.243-254. 1997.
- Golbabai, A. and javidi, M. (2007), A variational iteration method for solving parabolic partial differential equation. *Computers & Mathematics with Applications*, vol.54, n. 7-8, p.987-992.
- Goulart, A.G.O., Lazo M.J., Suarez. J.M.J and Moreira. D.M. (2017), Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants, *Physica A*, vol 477, pp 9-19.
- Gryning, S. and Lyck, E. (1984), Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, vol. 23, n. 4, 1984. pp. 651-660.
- He, J. (2006), Recent development of the homotopy perturbation method, *Topological methods in Nonlinear Analysis*, vol. 31, no. 2, pp. 205-209.
- Khan, Y. and Austin, F. (2010), Application of the Laplace decomposition method to nonlinear homogeneous and non-homogeneous advection equations. *Zeitschrift für Naturforschung A*, vol.65, n. 2, pp.1-5.

7. RESPONSABILIDADE AUTURAL

“Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo deste trabalho”.

ALTERNATIVE SOLUTION OF FRACTIONAL ADVECTION-DIFFUSION EQUATION: THE CASE OF PBL HIGH SOURCE

Palmira Maria de Santana Acioli, palmira.engmec@gmail.com¹
Frederico Andrade Xavier Conceição, fredxavier85@gmail.com²
Davidson Martins Moreira, davidson.moreira@gmail.com³

¹Centro universitário SENAI CIMATEC, Salvador - BA

²Centro universitário SENAI CIMATEC, Salvador - BA

³Centro universitário SENAI CIMATEC, Salvador - BA

Abstract. *Pollutants dispersion phenomenon in the atmosphere is modeled through the advection-difusion equation. This papper presents an advection-difusion equation solution applied on pollutants dispersion problems of planetary boudary layer (PBL). The equation solution is obtained through Laplace decomposition method and homotopy perturbation method. Caputo derivate is considered a combination of decomposition method and Laplace transform with Caputo derivate. Simulations results were compared with traditional experimental data from the literature (Copenhagen), showing good performance with concentration observed at on ground level.*

Keywords: *Laplace decomposition method, diffusion-advection equation; fractional derivatives, atmospheric boundary layer.*