

UMA NOVA PERSPECTIVA PARA A DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

Paulo Henrique Xavier, pahenfax@gmail.com¹

André Luiz Soledade, andre.soledade@fieb.org.br¹

D. M. Moreira, davidson.moreira@fieb.org.br¹

¹ Campus Integrado de Manufatura e Tecnologia SENAI CIMATEC, Avenida Orlando Gomes, 1845 - Piatã, Salvador - BA, Brasil. Cep.: 41650-010.

Resumo: Neste estudo, obtemos uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária para simular a dispersão de poluentes atmosféricos em uma camada limite planetária verticalmente não-homogênea. Propomos o método GILTT modificado para resolver o problema transformado com uma derivada fracionária, resultando em uma solução mais geral. Os resultados do modelo foram comparados com um modelo gaussiano fracionário e demonstram que, quando se considera um conjunto de dados experimentais em condições moderadamente instáveis, os modelos com derivadas fracionárias apresentam melhores resultados do que os modelos tradicionais de ordem inteira.

Palavras-chave: Dispersão de Poluentes, Camada Limite Planetária. GILTT.

1. INTRODUÇÃO

O transporte de um poluente sob os efeitos combinados de difusão e advecção é descrito pela equação de difusão-advecção, onde muitos processos físicos podem ser modelados por esta equação. A poluição atmosférica causada por efeitos naturais ou antropogênicos é um exemplo, a qual foi sistematicamente modelada por equações diferenciais tradicionais (ordem inteira) (Lin e Hildemann, 1997; Moreira *et al.*, 2005a, b, 2009, 2014; Sharan e Modani, 2006; Essa *et al.*, 2007; Tirabassi *et al.*, 2008; Perez-Guerrero *et al.*, 2012; Pimentel *et al.*, 2014). No entanto, há uma lacuna nas soluções analíticas de equações diferenciais de ordem fracionária na literatura sobre dispersão de poluentes atmosféricos, onde o uso do cálculo fracionário na modelagem da difusão turbulenta é justificado pelo comportamento não diferenciável no problema e pela presença da difusão anômala. Desta forma, a literatura que utiliza métodos de cálculo fracionário de difusão atmosférica é praticamente nula. Além disso, a literatura apresenta uma tendência no uso de soluções numéricas de equações diferenciais fracionárias em vários problemas, entre eles a equação de Navier-Stokes (Birajdar, 2014; Guo *et al.*, 2015).

Neste contexto, Goulart *et al.* (2017) propuseram uma alternativa na compreensão do processo de dispersão atmosférica modificando a estrutura matemática da equação difusão-advecção, introduzindo operadores fracionários nas equações que regem a distribuição de contaminantes na atmosfera. Esta modificação representa de forma mais realista a evolução espacial da concentração de poluentes atmosféricos dispersos em um fluxo turbulento, resultando em uma equação com derivada espacial fracionária no termo advectivo, dada por:

$$u \frac{{}^c \partial^\alpha \bar{c}_y(x, z)}{\partial x^\alpha} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_y(x, z)}{\partial z^2}, 0 < \alpha \leq 1 \quad (1)$$

onde $\bar{c}_y$ é a concentração integrada lateralmente, C representa a derivada de Caputo, α representa a ordem do operador espacial fracionário, u é a velocidade média longitudinal do vento e K é o coeficiente de difusão vertical. A equação (1) é a equação geral de difusão-advecção fracionária em estado estacionário que exhibe o deslocamento quadrático médio da lei de força anômala (Goulart *et al.*, 2017).

Neste trabalho, devido à modificação da estrutura matemática da equação tradicional de difusão-advecção (Goulart *et al.*, 2017), propomos um avanço na compreensão do processo de dispersão de poluentes atmosféricos com a obtenção de uma solução analítica com a metodologia GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*), que agora será representada com a solução da equação de difusão-advecção fracionária em problemas atmosféricos.

2. SOLUÇÃO USANDO ABORDAGEM FRACIONÁRIA

Neste trabalho, consideramos que u e K_z dependem da variável z . Portanto, podemos escrever a equação (1) da seguinte maneira:

$$u(z) \frac{\partial^\alpha \bar{c}_y(x, z)}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(z) \frac{\partial \bar{c}_y(x, z)}{\partial x} \right) \quad (2)$$

Assim, para resolver o problema representado na equação (2) pelo método GILTT, a equação pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$u(z) \frac{\partial^\alpha \bar{c}_y}{\partial x^\alpha} = \frac{\partial}{\partial z} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_y}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial x} \quad (3)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial z} = 0, \quad z = h \quad (3a)$$

$$K_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial z} = 0, \quad z = z_0 \quad (3b)$$

$$\bar{c}_y(x, y) = Q \delta(z - H_s), \quad x = 0 \quad (3c)$$

onde h é a altura da camada limite planetária (CLP), z_0 é o comprimento de rugosidade, Q é a taxa de emissão e $\delta(\cdot)$ é a função delta Dirac.

Seguindo a metodologia GILTT, agora podemos construir o problema associado à teoria de *Sturm-Liouville*:

$$\Psi_i''(z) + \lambda_i^2 \Psi_i(z) = 0, \quad 0 < z < h \quad (4a)$$

$$\Psi_i'(z) = 0, \quad z = 0, h \quad (4b)$$

e este problema tem a solução tradicional dada por:

$$\Psi_i'(z) = \cos(\lambda_i z) \quad (4c)$$

onde os autovalores λ_i e as autofunções $\Psi_i(z)$ satisfazem a condição de ortonormalidade. Portanto, assumindo as considerações acima, podemos escrever a fórmula inversa GILTT com a seguinte solução:

$$\bar{c}_y(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x) \Psi_i(z)}}{N_i^{1/2}} \quad (5)$$

Assim, ao inserir esta equação na equação (3), obtemos:

$$u \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i^\alpha(x) \Psi_i(z)}}{N_i^{1/2}} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x) \Psi_i''(z)}}{N_i^{1/2}} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x) \Psi_i'(z)}}{N_i^{1/2}} \quad (6)$$

Seguindo o formalismo GILTT, multiplicamos a equação (6) por $\frac{\Psi_j(z)}{N_j^{1/2}}$ e integramos em z de zero a h (altura da CLP):

$$- \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i^\alpha(x) \Psi_i(z)}}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h u \Psi_i \Psi_j dz - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x) \lambda_i^2 \Psi_i(z)}}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h K_z \Psi_i \Psi_j dz + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)}}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \Psi_i' \Psi_j dz \quad (7)$$

para $j=0, 1, 2, \dots, N$. Por conveniência, é possível reescrever a equação (7) na forma matricial, resultando:

$$\frac{d^\alpha Y(x)}{dx^\alpha} + FY(x) = 0, \quad x > 0, \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (8)$$

onde $Y(x)$ é um vetor, a matriz F é definida como $F = B^{-1}.E$ e α é um número real arbitrário. Neste ponto, é importante notar que a novidade deste trabalho aparece aqui: o problema transformado com derivada fracionária.

Assim, para resolver o problema representado pela equação (8), seguindo o formalismo GILTT, aplicamos a técnica de transformada de Laplace na variável x . Lembramos que a transformada de Laplace de uma derivada fracionária de ordem α é dada pela fórmula de Caputo, como segue:

$$L\{D_x^\alpha f(x)\} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^{\alpha-k-1} f^{(k)}(0) \quad n-1 < \alpha \leq n \quad (9)$$

onde s é a variável transformada. Portanto, no nosso caso, temos o seguinte:

$$L\{D_x^\alpha f(x)\} = s^\alpha F(s) - s^{\alpha-1} f(0) \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (10)$$

Assim, a equação (8) pode ser escrita como:

$$s^\alpha \overline{Y(s)} = F \overline{Y(s)} = s^{\alpha-1} Y_0 \quad (11)$$

onde $Y(s)$ resulta da aplicação da transformada de Laplace, e a matriz F pode ser escrita como:

$$F = XDX^{-1} \quad (12)$$

onde D são os autovalores da matriz diagonal, X é a matriz das autofunções, e X^{-1} é a inversa. Agora, colocando a equação (12) na equação (11), resulta:

$$(s^\alpha I + XDX^{-1}) \overline{Y(s)} = s^{\alpha-1} Y_0 \quad (13)$$

onde I é a matriz identidade. Assim, a equação (13) torna-se a seguinte:

$$X(s^\alpha I + D)X^{-1} \overline{Y(s)} = s^{\alpha-1} Y_0 \quad (14)$$

Logo,

$$X(s^\alpha I + D)^{-1} X^{-1} s^{\alpha-1} Y_0 \quad (15)$$

Aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na equação (15), temos:

$$Y(x) = XL^{-1} \left\{ \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha I + D} \right\} X^{-1} Y_0 \quad (16)$$

onde L^{-1} é a transformada inversa de Laplace.

Em seguida, usando a teoria padrão para a transformada de Laplace, obtemos:

$$L^{-1} \left\{ \frac{s^{\alpha-1}}{(s^\alpha I + D)^{-1}} \right\} = B(x) = \begin{pmatrix} E_\alpha(-d_1 x^\alpha) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_\alpha(-d_2 x^\alpha) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & E_\alpha(-d_N x^\alpha) \end{pmatrix} \quad (17)$$

onde d_i são os autovalores da matriz F , e E_α é a função de Mittag-Leffler dada por:

$$E_\alpha(-d_i x^\alpha) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-d_i x^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \quad (18)$$

Onde $\Gamma(\cdot)$ é a função Gamma. A função de Mittag-Leffler é intrínseca à solução de equações com derivadas fracionadas.

Finalmente, substituindo-se a equação (17) em (16), obtemos a seguinte solução para o problema dado pela equação (16):

$$Y(x) = X \begin{pmatrix} E_{\alpha}(-d_1 x^{\alpha}) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_{\alpha}(-d_2 x^{\alpha}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & E_{\alpha}(-d_N x^{\alpha}) \end{pmatrix} \quad (1,9)$$

Podemos observar prontamente que a solução para o problema transformado dado pela equação (19) é mais geral, no sentido de que ela retorna a solução GILTT tradicional ao assumir $\alpha = 1$.

3. RESULTADOS NUMÉRICOS

Para verificar a consistência física do modelo, este trabalho toma como base os dados experimentais tradicionais de Copenhagen descritos no trabalho de Gryning e Lyck (2002). Este experimento é considerado de convecção moderada (Pasquill e Smith, 1983).

Comparamos os resultados obtidos pelo modelo fracionário GILTT (aqui chamado α - GILTT) e o modelo Gaussiano fracionário do trabalho de Goulart *et al.* (2017), chamado α - GM (*Gaussian Model*). Os dados micrometeorológicos utilizados nas simulações iniciais deste estudo são aqueles do experimento nove de Copenhagen, com $u_* = 0.75 \text{ ms}^{-1}$ (velocidade de fricção), $w_* = 1.9 \text{ ms}^{-1}$ (velocidade convectiva), $h = 2090 \text{ m}$ (altura da CLP) e $L = -289 \text{ m}$ (comprimento de Monin-Obukov). Estes parâmetros micrometeorológicos podem ser obtidos a partir do trabalho de Degrazia *et al.* (2001).

A Figura 1 mostra o gráfico da concentração integrada lateralmente, ao nível do solo, em função da distância da fonte. Observamos que a concentração gerada pelo modelo α - GILTT com $\alpha = 0.95$ fornece os melhores resultados com a parametrização utilizada.

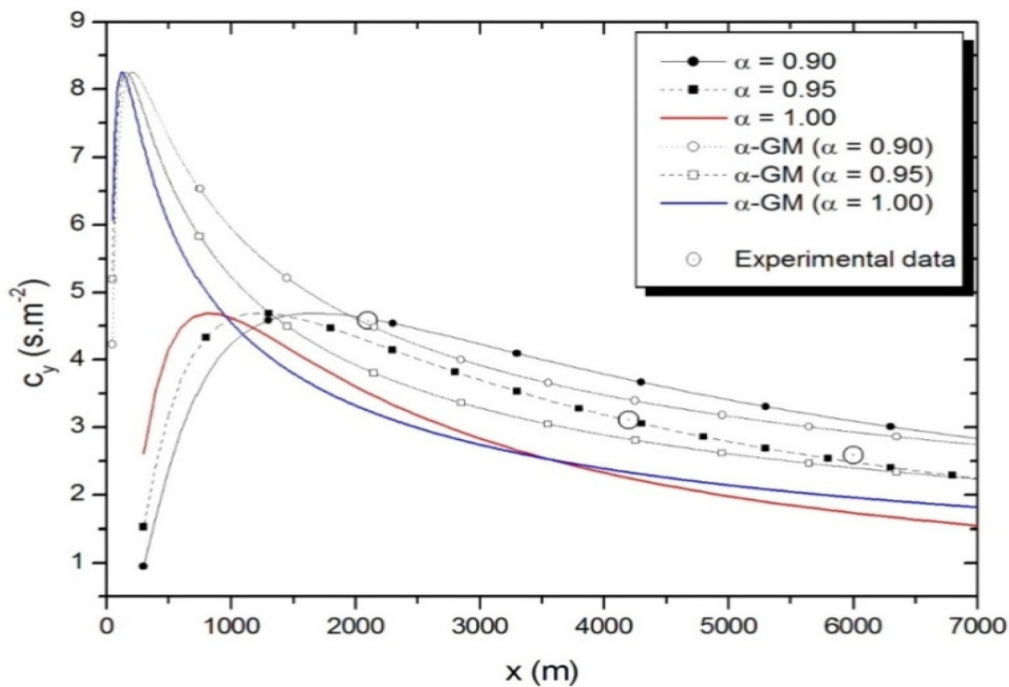


Figura 1: Concentração integrada lateralmente como função da distância da fonte para diferentes valores de α : 1.00, α : 0.95, 0.90 e 0.85 em comparação com os dados do experimento nove de Copenhagen.

No entanto, a concentração para a distância de 2100 m foi melhor representada usando $\alpha = 0.95$. O parâmetro α não altera o valor da concentração de pico, que é um dos aspectos mais importantes no contexto da poluição do ar, mas modifica sua posição.

Comparando este caso com o modelo GM, observamos que, para os pontos de coleta dos amostradores neste experimento (2 a 6 km), os resultados são semelhantes, mas os resultados do modelo α - GILTT ainda são

melhores. De fato, o modelo α -GM mostra um pico muito maior do que o α -GILTT em distâncias curtas, onde a posição máxima da concentração

Neste trabalho, propusemos e investigamos a sensibilidade de uma solução analítica da equação de difusão-advecção fracionária para estimar as concentrações de poluentes na CLP. O modelo permite o uso de perfis de vento e coeficientes de difusão vertical realistas (função da variável vertical z) em qualquer condição de estabilidade atmosférica, embora este trabalho mostre simulações em condições moderadamente instáveis.

As simulações e comparações realizadas com um modelo de dispersão Gaussiano sugerem melhores resultados estatísticos para o modelo α -GILTT quando se utiliza a parametrização proposta neste trabalho. No entanto, o desempenho do modelo Gaussiano também apresenta resultados comparáveis com os dados experimentais de Copenhague, os quais são apenas para concentrações ao nível do solo. No entanto, é importante mencionar que as simulações são muito diferentes para maiores alturas.

A solução obtida é analítica, no sentido de que nenhuma aproximação foi feita em sua derivação, além do fato de que o problema transformado é resolvido pela inversão analítica da transformada de Laplace, resultando em uma solução mais geral com a introdução da função de Mittag-Leffler, a qual está intrinsecamente associada a equações fracionárias. A solução do problema fracionário dá a solução tradicional (ordem inteira) quando $\alpha = 1$.

Esperamos que, com a formulação mostrada neste trabalho, abrimos o caminho para atualizar a formulação GILTT em simular a dispersão de poluentes considerando a dispersão anômala, que é um avanço importante nas ciências atmosféricas. Devemos concentrar nossa futura atenção nessa direção.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi parcialmente financiado (através de bolsa de pesquisa) pelo Campus Integrado de Manufatura e Tecnologia SENAI CIMATEC, BA, Brasil, a qual agradecemos e reiteramos a colaboração em estrutura bem como a FAPESB pelo apoio financeiro.

REFERÊNCIAS

- Birajdar, G., 2014. "Numerical Solution of Time Fractional Navier-Stokes Equation by Discrete Adomian decomposition method. *Nonlinear Engineering*", 3(1), pp. 21-26.
- Essa, K.S.M., Etman, S.M. and Embaby, M., 2007. "New analytical solution of the dispersion equation". *Atmos. Res.* 84, 337–344.
- Goulart, A.G.O., Lazo, M.J., Suarez, J.M.S. and Moreira, D.M., 2017. "Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants". *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 477, 9–19.
- Gryning, S.E. and Lyck, E., 2002. "The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements". *Riso National Laboratory*, 74 pp.
- Guo, B., Pu, X. and Huang, F., 2015. "Fractional partial differential equations and their numerical solutions". *World Scientific*, 348 pp.
- Lin, J.S. and Hildemann, L.M., 1997. "A generalised mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition". *Atmos. Environ.* 31, 59–71.
- Moreira, D. M., Vilhena, M.T., Tirabassi, T., Buske, D. and Cotta, R.M., 2005a. "Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method". *Atmos. Environ.* 39, 6289–6294.
- Moreira, D.M., Tirabassi, T. and Carvalho, J.C., 2005b. "Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers". *Atmos. Environ.* 39(20), 3643–3650.
- Moreira, D.M., Moraes, A.C., Goulart, A.G. and Albuquerque, T.T., 2014. "A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance". *Atmos. Environ.* 83, 254–259.
- Pasquill, F. and Smith, F.B., 1983. "Atmospheric diffusion". John Wiley & Sons, New York, 437 pp.
- Perez-Guerrero, J.S., Pimentel, L.C.G., Ulke, A.G. Oliveira-Junior, J.F. and Heilbron Filho, P.F.L., 2012. "A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation". *Atmos. Environ.* 55, 201-212.
- Pimentel, L.C.G., Perez-Guerrero, J.S., Ulke, A.G., Duda, F.P. and Heilbron Filho, P.F.L., 2014. "Assessment of the unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation for stable conditions". *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 470, 20140021-20140021.
- Tirabassi, T., Buske, D., Moreira, D.M. and Vilhena, M.T., 2008. "A two-dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground". *JAMC* 47, 2096–2104.

7. RESPONSABILIDADE AUTORAL

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo deste trabalho.

LONG-TERM CORRELATIONS OF WIND SPEED IN DIFFERENT REGIONS IN THE STATE OF BAHIA

Paulo Henrique Xavier, pahenfax@gmail.com¹
André Luiz Soledade, andre.soledade@fieb.org.br¹
D. M. Moreira, davidson.moreira@fieb.org.br¹

¹ Integrated Campus of Manufacturing and Technology SENAI CIMATEC, Orlando Gomes Avenue, 1845 - Piatã, Salvador - BA, Brazil. Cep .: 41650-010.

Abstract:

In this study, we obtain an analytical solution of the diffusion-fractional advection equation to simulate the dispersion of atmospheric pollutants in a vertically non-homogeneous planetary boundary layer. We propose the modified GILTT method to solve the transformed problem with a fractional derivative, resulting in a more general solution. The results of the model were compared with a fractional Gaussian model and show that, when considering a set of experimental data in moderately unstable conditions, fractional derivative models present better results than traditional full-order models.

Keywords: Pollutant Dispersion, Planetary Boundary Layer. GILTT.