UMA SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS USANDO DERIVADA CONFORMÁVEL

José Roberto Dantas da Silva[1,2]; Paulo Henrique Farias Xavier[2] Davidson Martins Moreira[2]
[1] Vínculo institucional: Doutorando em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial; Tipo de projeto: Agência de fomento; dantas.joseroberto@gmail.com
[2] Centro Universitário SENAI CIMATEC; Salvador - BA; davidson.moreira@gmail.com

RESUMO

Este trabalho apresenta uma solução analítica da equação de difusão-advecção bidimensional fracionária no estudo do transporte de poluentes atmosféricos usando o método de decomposição por Laplace (MDL) e a derivada conformável. Os resultados simulados em comparação com dados experimentais são encorajadores e abrem um leque de perspectivas para sua utilização em outras áreas do conhecimento.

PALAVRAS-CHAVE: cálculo fracionário; derivada conformável; método decomposição por Laplace; equação de difusão-advecção.

1. INTRODUÇÃO

O cálculo de ordem fracionária emerge das correspondências entre L'Hôpital e Leibniz, em 1695.[1,2] Atualmente, é definido como a generalização do cálculo diferencial e integral e vem ampliando sua formulação conceitual e de aplicação, apesar de ainda apresentar alguns desafios a serem superados.[3] A proposição de novas formulações no âmbito do cálculo fracionário impõe como desafio o desenvolvimento de metodologias que, potencialmente, utilizando essas novas formulações, apresentem-se como mais adequados à modelagem de fenômenos físicos tal como a dispersão de poluentes na atmosfera.

A modelagem da poluição do ar está entre as áreas mais desafiadoras, pois a turbulência atmosférica desempenha um papel fundamental na dispersão de poluentes com o surgimento da difusão anômala. Soma-se, a esse desafio, lacunas existentes como a dificuldade de obtenção de uma solução exata para o modelo de dispersão em função de parâmetros não lineares que descrevem adequadamente a velocidade do vento e a turbulência característica deste fenômeno. Assim, faz-se algumas aproximações para se obter uma solução analítica, pois a aplicação de derivadas fracionárias torna as equações mais complexas e, logicamente, mais difíceis do que uma de ordem inteira. Destarte, o preenchimento dessas lacunas venha sendo proposto em diversos trabalhos com soluções analíticas[3], semi-analíticas[4] e numéricas[5], que utilizam técnicas tais como: o método de decomposição de Adomian[6], método iterativo variacional[7], método da transformada integral[8], método de decomposição por Laplace.[9] No entanto, algumas lacunas permanecem, pois, todos esses métodos possuem suas limitações.

Assim, de forma bastante sucinta, o objetivo principal deste trabalho é mostrar a combinação do método de decomposição por Laplace (MDL) aplicada a derivada conformável como perspectiva no cálculo fracionário para modelagem de fenômenos físicos. Esta metodologia representa o estado da arte em termos de modelagem matemática fracionária e pode ser aplicada nas mais diversas áreas do conhecimento.

2. METODOLOGIA

O método MDL é semelhante ao método de Adomian[6], o qual possibilita reduzir o trabalho computacional na resolução de equações diferenciais e melhora a acurácia dos resultados. As derivadas de ordem inteira sempre foram utilizadas para modelar a dispersão de poluentes na atmosfera. Contudo, ultimamente, as derivadas fracionárias vêm sendo aplicadas com resultados que descrevem mais adequadamente a dispersão anômala. Neste trabalho, utiliza-se a derivada conformável ($T\alpha$), onde "α" é a ordem do operador fracionário:[10]

$$T_\alpha\left[f(x)\right] = x^{1-\alpha}\frac{df(x)}{dx} \tag{1}$$

A equação de difusão advecção em sua forma bidimensional pode ser escrita como:

$$u\frac{\partial^\alpha c(x,z)}{\partial x^\alpha} = K_z(x)\frac{\partial^2 c(x,z)}{\partial z^2} \tag{2}$$

onde u é a velocidade média do vento na direção longitudinal (x), c é a concentração de poluentes integrada lateralmente, Kz é o coeficiente de difusão vertical (no caso em análise, dependente da variável x) e representa o parâmetro fracionário ($0<\alpha\leq 1$).

Observa-se que a Eq. (2) fica inconsistente na sua dimensão (lado esquerdo diferente do lado direito). Portanto, aplicando-se a derivada conformável dada pela Eq. (1), a consistência dimensional é obtida através do parâmetro ϕ (dimensão de comprimento).[11,12] Dessa forma, a Eq. (2) pode ser reescrita como:

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}}\, x^{\alpha-1}\,\frac{\partial c(x,z)}{\partial x} = K_z(x)\,\frac{\partial^2 c(x,z)}{\partial z^2} \quad , \quad 0<\alpha\leq 1 \tag{3}$$

com 0 < *z* < *h* e *x* > 0, onde *h* é a altura da camada limite planetária (CLP). Na direção z as condições de contorno são as de fluxo nulo na superfície do solo e na altura da CLP.

O coeficiente de difusão vertical, por simplicidade, é dependente apenas da distância longitudinal da fonte e dado por:

$$K_z(x) = \left(\frac{\sigma_w}{u}\right)^2 ux = \omega x \tag{4}$$

com ω sendo uma constante, pois σ_w^2 é dado experimentalmente (variância da velocidade vertical). Além disto, tem-se uma taxa de emissão (Q) na altura da fonte (H_s) que é a condição fonte:

$$c\left(0,z\right) = \frac{Q}{u}\,\delta\left(z-H_S\right) \tag{5}$$

onde a função delta de Dirac $\delta(.)$ pode ser reescrita com a seguinte aproximação:

$$\delta(z-H_s) = \frac{1}{h}\left[1+2\sum_{n=1}^{\infty}\left[\cos\left(\lambda_n z\right)\cos\left(\lambda_n H_s\right)\right]\right] \tag{6}$$

Observa-se das Eq. (3) e Eq. (4) que se pode fazer uma mudança de variável.[12,13]

$$X = \int_0^x x'^{\alpha}\,dx' = \frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} \tag{7}$$

Portanto, a equação a ser resolvida é dada por:

$$\frac{u}{\phi^{1-\alpha}}\,\frac{\partial c(X,z)}{\partial X} = \omega\,\frac{\partial^2 c(X,z)}{\partial z^2} \tag{8}$$

com as condições de contorno e de fonte dadas anteriormente.

Finalmente, aplica-se na Eq. (8) o método MDL, considerando-se a transformada de Laplace na variável *X*. Após algum algebrismo e, retornando à variável *x*, obtém-se a solução final dada por:

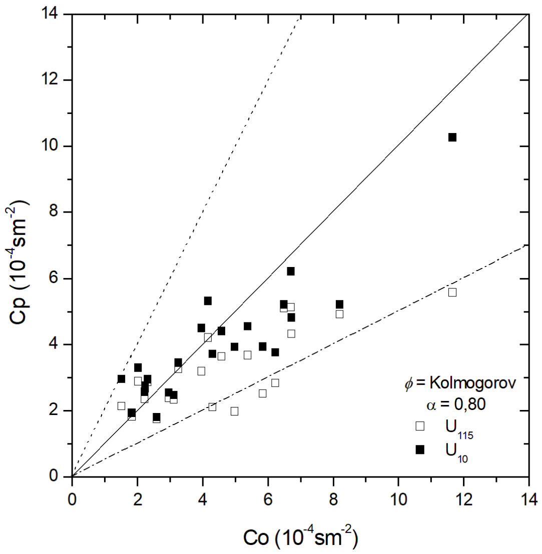
$$c(x,z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh}\sum_{n=1}^{\infty}\cos(\lambda_n z)\cos(\lambda_n H_s)\exp\left[-\left(\frac{\sigma_w}{u}\right)^2\left(\frac{\phi^{1-\alpha}x^{\alpha+1}}{x^{\alpha+1}}\right)\lambda_n^2\right] \tag{9}$$

Ressalte-se que, caso não fosse aplicada a derivada conformável, a solução resultante incluiria uma função de Mittag-Leffler (E_α), que é a mãe de todas as equações exponenciais.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O gráfico de espalhamento entre as concentrações previstas (Cp) pelo modelo dado pela Eq. (9) e as observadas (Co) no experimento de Copenhagen é mostrado na Figura 1. A Figura 1, usando a microescala de comprimento de Kolmogorov[14] para correção da dimensão ($\phi=\eta=10^{-3}m$), mostra também os resultados para velocidade do vento medido na altura de 10 m (U_{10}) e em 115 m (U_{115}) com o parâmetro fracionário $\alpha=0,8$. Os pontos entre as linhas pontilhadas correspondem a razão $C_p/C_o\in\left[0.5,2\right]$.

Figura 1 - Espalhamento da concentração de poluentes usando $\phi = \eta$ e $\alpha = 0{,}80$.



Observa-se que os melhores resultados do modelo são obtidos para a velocidade do vento medido em 10 m de altura ($\alpha = 0{,}8$), pois todos os pontos estão entre as linhas pontilhadas, representando um fator de 2 de 100%.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo principal deste trabalho foi desenvolver uma nova metodologia para obter uma solução da equação difusão-advecção de ordem fracionária. A grande vantagem da metodologia apresentada é sua simplicidade na obtenção de uma solução analítica. A metodologia proposta, juntamente com o conceito de derivadas fracionárias, resulta em soluções analíticas da equação de difusão-advecção linear de maneira mais simples e mais geral, sugerindo que ela pode ser estendida a problemas não lineares. É importante salientar que ao se lidar com situações reais faz-se necessário usar métodos numéricos (solução numérica da equação de difusão-advecção). No entanto, é bastante útil primeiro examinar possíveis soluções analíticas para obter-se uma formulação conhecida e testar soluções numéricas. Contudo, muitos desafios ainda persistem e carecem de muita atenção por todos os pesquisadores que usam derivadas e integrais na solução de problemas de engenharia e demais área de aplicação.

Agradecimentos

Agradecemos à FAPESB (BOL 0194/2019) e ao SENAI-CIMATEC.

5. REFERÊNCIAS

[1] OLDHAM, K.B. SPANIER, J. **The Fractional Calculus**, Academic Press, New York, p. 234. 1974.
[2] ROSS, B. **Fractional Calculus, and its Applications**. Proceedings of the International Conference, New Haven, June, Springer Verlag, New York, p. 386, 1974
[3] GOULART, A.G.O. LAZO, M.J. SUAREZ, J.M.J. MOREIRA, D.M**. Fractional derivative models for atmospheric dispersion of pollutants**, Phys. A 477, p. 9–19, 2017.
[4] COSTA, C.P. VILHENA, M.T. MOREIRA, D.M. IRABASSI, T. **Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the PBL**, Atmos. Environ. 40, p. 5659–5669, 2006.
[5] JUNIOR, J. L. RODRIGUES, P.P.G.W. BEVILACQUA, L. KNUPP, D.C. VASCONCELLOS, J.F.V. & NETO, A.J.S. **Solução Numérica de um Problema de Advecção e Difusão Anômala Unidimensional**. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, *6*(2), 2018.
[6] ADOMIAN, G. **Solving Frontier Problem of Physics**: The Decomposition Method, Springer, Netherlands, p. 354, 1994.
[7] GOLBABAI, A. JAVID, M. **A variational iteration method for solving parabolic partial differential equation**, Computers & Mathematics with Applications, vol. 54, no. 7-8, pp. 987-992, 2007.

[8] BIAZER, J. GHAZVINI, H. **HE's homotopy perturbation method for solving systems of Volterra Integral equations**, Chaos, Solitons, Fractals, vol. 39, pp. 370-377, 2009.
[9] XAVIER, P.H.F. NASCIMENTO, E.G.S. MOREIRA, D.M. **A model using fractional derivatives with vertical eddy diffusivity depending on the source distance applied to the dispersion of atmospheric pollutants**, Pure Appl. Geophys. 176, p.1797–1806, 2018.
[10] KHALIL, Roshdi et al. **A new definition of fractional derivative**. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 264, p. 65-70, 2014.
[11] GOMEZ-AGUILAR, J.F. MIRANDA-HERNANDEZ, M. LOPEZ-LOPEZ, M.G. ALVARADO-MARTINEZ, V.M. and BALEANU, D. **Modeling and simulation of the fractional space-time diffusion equation**. Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 30, p.115-127, 2016.
[12] MOREIRA, D.M., MORAES, A.C., GOULART, A. G. and ALBUQUERQUE, T.T. **A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance**. Atmos. Environ. 83, p.254-259, 2014.
[13] CRANK, J. **The mathematics of diffusion**. Oxford University Press, 414 pp, 1979.
[14] COLIN, C., MASSION, V., & PACI, A. **Adaptation of the meteorological model Meso-NH to laboratory experiments**: implementations and validation. Geoscientific Model Development Discussions, p. 1-32, 2017.