

# UMA NOVA DIREÇÃO NA MODELAGEM DA POLUIÇÃO DO AR CONSIDERANDO DIFUSÃO ANÔMALA

Paulo Henrique Farias Xavier<sup>1</sup>; Anderson da Silva Palmeira<sup>2</sup>; André Luiz Santos da Soledade<sup>2</sup>; Erick Giovani Sperandio Nascimento<sup>2</sup>; Davidson Martins Moreira<sup>2</sup>.

1 Vínculo institucional (Doutorando MCTI);

Tipo de projeto (Doutorando Fapesb); pahenfax@gmail.com

2 Professor Titular; Centro Universitário SENAI CIMATEC; Salvador-BA; davidson.moreira@fieb.org.br

## RESUMO

O transporte de um poluente sob os efeitos combinados de advecção e difusão é descrito pela equação de advecção-difusão, com a qual muitos processos físicos podem ser modelados. A poluição atmosférica causada por efeitos naturais ou antropogênicos é um exemplo sistematicamente modelado por equações diferenciais tradicionais (ordem inteira). Existe, no entanto, uma lacuna nas soluções analíticas de equações diferenciais de ordem fracionária (ordem não-inteira) na literatura em relação à dispersão de poluentes atmosféricos, onde o uso do cálculo fracionário na modelagem de difusão turbulenta é justificado pelo comportamento não diferencial no problema e pela presença de difusão anômala. Neste estudo, uma solução analítica para a equação de difusão-advecção fracionária tridimensional foi obtida para simular a dispersão atmosférica de poluentes na camada limite planetária. Os autores propõem um método que utiliza o método da decomposição de Laplace e a metodologia GITT, considerando os coeficientes de difusão lateral e vertical dependentes da distância longitudinal da fonte com expoente fracionário da mesma ordem de derivada fracionária ( $K_{y,z} \propto x^\alpha$ ), resultando em uma solução mais geral.

**PALAVRAS-CHAVE:** Método de decomposição. GITT. Derivadas fracionárias. Camada limite planetária. Dispersão atmosférica.

## 1. INTRODUÇÃO

Este trabalho propõe o uso de uma nova metodologia para obter a solução da equação de difusão-advecção para simular a dispersão de poluentes emitidos na camada limite planetária. Normalmente, equações diferenciais permitem solução com ordens inteiras em suas derivadas. No entanto, em derivadas fracionárias essa ordem pode ser alterada para números não inteiros<sup>2,6,7,8,9</sup>. A metodologia proposta, juntamente com o conceito de derivadas fracionárias, resulta em uma solução analítica da equação de difusão-advecção de uma maneira mais simples e geral, enfatizando que ela pode ser estendida a problemas não lineares. Este procedimento foi utilizado pela primeira vez na simulação da dispersão de poluentes atmosféricos.

## 2. METODOLOGIA

A equação de difusão-advecção estacionária pode ser escrita da seguinte forma:

$$U \frac{c_{\partial^\alpha c(x,z)}}{\partial x^\alpha} = K_y(x) \frac{\partial^2 c(x,z)}{\partial y^2} + K_z(x) \frac{\partial^2 c(x,z)}{\partial z^2}, \quad 0 < \alpha \leq 1 \quad (1)$$

onde  $c$  é a concentração integrada lateralmente,  $C$  representa a derivada de Caputo,  $\alpha$  representa a ordem do operador espacial fracionário,  $U$  é a velocidade média do vento e,  $K_y$  e  $K_z$  são os coeficientes de difusão lateral e vertical representados pelas seguintes equações:

$$K_y(x) = \left(\frac{\sigma_v}{U}\right)^2 U x^\alpha = \beta x^\alpha \quad (2)$$

$$K_z(x) = \left(\frac{\sigma_w}{U}\right)^2 U x^\alpha = \omega x^\alpha \quad (3)$$

onde  $\alpha$  tem ordem similar da derivada fracionária<sup>2</sup>,  $\sigma_v$  e  $\sigma_w$  são os desvios padrões da velocidade lateral e vertical, respectivamente. Para obtenção da solução da equação (1), faz-se necessário uma substituição de variável<sup>8</sup>:

$$X^\alpha = \int_o^x x^\alpha (dx)^\alpha \quad (4)$$

Assim, a Eq. (1) pode ser reescrita como:

$$U \frac{\partial^\alpha c(x,z)}{\partial X^\alpha} = \beta \frac{\partial^2 c(x,z)}{\partial y^2} + \omega \frac{\partial^2 c(x,z)}{\partial z^2} \quad (5)$$

Com as seguintes condições de contorno:

$$K \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = z_0 \text{ e } h = z \quad (5a)$$

$$K \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \quad (5b)$$

E a seguinte condição de fonte,

$$c(0, y, z) = \frac{Q}{U} \delta(z - H_s) \delta(y - y_0) \text{ em } x = 0 \quad (5c)$$

onde  $H_s$  é a altura da fonte,  $Q$  é a taxa de emissão e  $h$  é a altura da camada limite planetária. A função delta de Dirac,  $\delta(\cdot)$ , é aproximada pela seguinte expressão:

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

com os autovalores dados por:

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{h}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

Assim, a condição de fonte pode ser reescrita como:

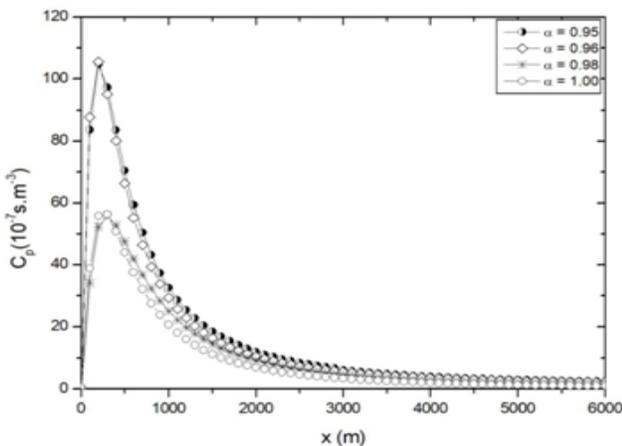
$$c(0, y, z) = \frac{Q}{Uh} \left[ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} [\cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s)] \right] \quad (8)$$

O primeiro passo para obtenção da solução tridimensional da Eq. (5) será a aplicação da GITT na variável  $y$ . Seguindo-se o formalismo GITT (*Generalized Integral Transform Technique*)<sup>1</sup> e o método da decomposição por Laplace, obtém-se.

$$C(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{N_j^{1/2}} \left\{ \frac{Q}{Uh} + \frac{2Q}{Uh} \sum_{i=1}^{\infty} \cos(\lambda_i z) \cos(\lambda_i H_s) E_\alpha \left[ - \left( \frac{\omega \lambda_i^2 x^{2\alpha} \Gamma(\alpha + 1)}{U \Gamma(\alpha + 1)} \right) - \left( \frac{\beta \lambda_i^2 x^{2\alpha} \Gamma(\alpha + 1)}{U \Gamma(\alpha + 1)} \right) \right] \right\} \quad (9)$$

### 3. RESULTADOSE DISCUSSÃO

Os dados gerados pelo modelo são comparados com os dados observados nos experimentos de Copenhagen que são descritos em<sup>4,5</sup>, consistindo na liberação do traçador SF6 (hexafluoreto de enxofre) ao norte de Copenhague (Dinamarca). O traçador foi liberado sem empuxo de uma torre com uma altura de 115m e foi coletado ao nível do solo, com unidades de coleta posicionadas a 2 a 6 km de distância.



**Figura 1:** Concentração ao nível do solo para diferentes valores fracionários em função da distancia da fonte.

Observa-se na Figura 1 que a solução com coeficiente de difusão dependente da distância da fonte altera o valor do pico de concentração. Além disso, claramente observa-se que o parâmetro  $\alpha$  influencia o processo de dispersão. Para a simulação de ordem inteira ( $\alpha = 1$ ), observa-se uma menor concentração de poluentes na região próxima à fonte, com tendência a diminuir com distâncias maiores da fonte. Com o decréscimo de  $\alpha$ , percebe-se que o pico de concentração aumenta (a localização do pico de concentração é um dos parâmetros mais importantes no contexto da poluição atmosférica), tendendo a manter a concentração em níveis elevados para maiores distâncias da fonte.

Modelo de Dispersão	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
$\alpha = 1.00$	0.57	0.85	0.69	0.51	0.51
$\alpha = 0.99$	0.41	0.82	0.73	0.39	0.39
$\alpha = 0.98$	0.31	0.80	0.78	0.26	0.26
$\alpha = 0.97$	0.25	0.78	0.87	0.14	0.14
$\alpha = 0.965$	0.24	0.77	0.96	0.78	0.08
$\alpha = 0.962$	0.24	0.76	0.96	0.04	0.45
$\alpha = 0.96$	0.24	0.76	0.91	0.01	0.02
$\alpha = 0.95$	0.27	0.74	0.82	-0.10	-0.93

**Tabela 1:** Indicadores estatísticos de desempenho do modelo para diferentes valores de  $\alpha$ .

A Tabela 1 indica que os melhores resultados ocorrem com  $\alpha = 0,965$  e  $0,962$ , com menor NMSE (0,24) e FAT2 de 96%. O pior resultado ocorre com  $\alpha = 1,00$ , que representa a derivada de ordem inteira com maior NMSE (0,57) e menor FAT2 (69%).

#### 4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho propõe o uso de uma nova metodologia para obtenção da solução da equação advecção-difusão tridimensional para simular a dispersão de poluentes emitidos na camada limite planetária. Normalmente, equações diferenciais permitem solução com ordens inteiras em suas derivadas. No entanto, em derivadas fracionárias, essa ordem pode ser alterada para números não inteiros. A metodologia proposta, juntamente com o conceito de derivadas fracionadas, resulta em uma solução analítica da equação linear difusão-advecção de uma maneira mais simples e mais geral, enfatizando que ela pode ser estendida a problemas não lineares.

Analisando-se os resultados de concentração no nível do solo do experimento de Copenhague (condições moderadamente convectivas a neutras), foi observado que o efeito de memória devido aos coeficientes de difusão dependes da distância da fonte com expoente fracionário da mesma ordem de derivada fracionária ( $K \propto x^\alpha$ ) apresentam os melhores resultados com  $\alpha = 0,962$  e  $\alpha = 0,965$ . Esta análise é confirmada pelos índices estatísticos e gráficos de dispersão resultantes das simulações, onde apresentou FAT2 com valor 0,96 e COR de 0,76 e 0,77, respectivamente. Este é um resultado interessante, pois é uma prática em problemas de dispersão na atmosfera levar em conta o efeito da memória apenas no coeficiente de difusão e não da ordem da derivada.

Finalmente, é importante dizer que, embora para lidar com situações reais seja necessário usar um método numérico, é útil examinar primeiro as

possíveis soluções analíticas para obter uma estrutura conhecida e soluções de teste. Neste sentido, as soluções analíticas são úteis para uma variedade de aplicações, tais como: fornecer análises de perto de cenários alternativos de poluição, realizar análise de sensibilidade para investigar os efeitos de vários parâmetros ou processos envolvidos no transporte de contaminantes. É importante ressaltar que a grande vantagem desta metodologia é a simplicidade na obtenção de uma solução analítica.

#### Agradecimentos

Agradecemos o apoio financeiro do CNPq, FAPESB e SENAI-CIMATEC.

#### 5. REFERÊNCIAS

- <sup>1</sup>Cotta, R. M., (1993). Integral transforms in computational heat and fluid flow. CRC Press.
- <sup>2</sup>Degrazia, G.A., Moreira, D.M., Vilhena, M.T., 2001. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for a vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. Journal of Applied Meteorology 40, 1233–1240.
- <sup>3</sup>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 477, 9-19.
- <sup>4</sup>Gryning, S.E. and Lyck, E., 1984. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. Journal of Climate and Applied Meteorology 23(4), 651–660.
- <sup>5</sup>Gryning, S.E., Holtslag, A.M.M., Irwin, J., Sivertsen, B., 1987. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. Atmospheric Environment 21, 79–89.
- <sup>6</sup>Moreira, D. M., Carvalho, J. C., Degrazia, G. A., Vilhena, M. T., & De Moraes, M. R. (2002). DISPERSION PARAMETERIZATION APPLIED TO STRONG CONVECTION: LOW SOURCES CASE. Hybrid Methods in Engineering, v. 4 n.1&2.
- <sup>7</sup>Moreira, D.M.; Tirabassi, T., 2004. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. Ambiente & sociedade, v. 7, n. 2.
- <sup>8</sup>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.
- <sup>9</sup>Xavier, P.H.F., Nascimento, E.G.S. & Moreira, D.M., 2018. A Model Using Fractional Derivatives with Vertical Eddy Diffusivity Depending on the Source Distance Applied to the Dispersion of Atmospheric Pollutants. Pure Appl. Geophys. <https://doi.org/10.1007/s00024-018-1977-8>.