

## SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA O PROBLEMA UNIDIMENSIONAL TRANSIENTE DE DISPERSÃO DE POLUENTES COM COEFICIENTE DE DIFUSÃO VARIÁVEL

Sérgio Wortmann – [s\\_wortmann@hotmail.com](mailto:s_wortmann@hotmail.com)

Angela B. D. Moura – [angelabm@ufrgs.br](mailto:angelabm@ufrgs.br)

Marco T. M. B. Vilhena – [vilhena@cesup.ufrgs.br](mailto:vilhena@cesup.ufrgs.br)

PROMEC - Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Sarmento Leite, 425, 3º andar – 90035-972 – Porto Alegre, RS, Brasil

***Resumo.** O objetivo deste trabalho consiste em apresentar uma solução analítica, utilizando-se a Técnica de Transformada Integral Generalizada (GITT) e a Transformada de Laplace, para a dispersão vertical de poluentes em uma camada limite atmosférica estável usando um coeficiente de difusão derivado das teorias da similaridade local e da difusão estatística. As simulações numéricas são apresentadas.*

**Palavras-Chave:** GITT, Solução analítica, Dispersão Atmosférica, T. Laplace.

### 1. INTRODUÇÃO

A investigação da dispersão e do transporte de poluentes na camada limite planetária é um fator importante em problemas que envolvem a qualidade do ar. Para este fim um modelo de dispersão atmosférico deve ser capaz de reproduzir os principais padrões das distribuições espaciais de concentrações de poluentes. O modelo matemático clássico representando este tipo de problema é fornecido pela conhecida equação de difusão advecção. Nesta aproximação, os termos associados à dispersão turbulenta são parametrizados pela hipótese de transferência por gradiente (ou Teoria K), onde os fluxos turbulentos de concentração são relacionados à concentração média via um coeficiente de difusão turbulento. Para fluxos turbulentos na camada limite planetária (CLP) estes coeficientes são funções do espaço e devem encerrar obrigatoriamente os principais parâmetros meteorológicos descrevendo a estrutura física da baixa atmosfera.

A dispersão vertical em uma camada limite atmosférica estável noturna já foi investigada anteriormente por Nieuwstadt(1984), cujo trabalho envolveu um coeficiente de difusão constante. Já o trabalho numérico de Campos Velho (1992), pelo método de diferenças finitas, faz investigação semelhante, agora utilizando um coeficiente de difusão variável. O mesmo coeficiente foi utilizado por Moura et al.(1995) que propõe uma solução analítica com aplicação da transformada de Laplace, mas usando um artifício do seccionamento da camada limite e um coeficiente de difusão médio em cada uma das camadas.

O objetivo deste trabalho é propor uma nova solução analítica para a dispersão vertical, a partir de uma fonte área, em uma camada limite planetária estável (CLE) de altura  $h$ , utilizando-se a metodologia própria da Técnica de Transformada Integral Generalizada (GITT), associada a aplicação da Transformada de Laplace. Isto feito de forma a permitir o uso de um coeficiente de difusão vertical variável com a altura, de uma forma direta, sem a necessidade de se fazer o seccionamento da camada limite (Moura et al.,1995). Este

coeficiente é derivado da teoria de similaridade local (Nieuwstadt, 1984) e da teoria de difusão estatística. A CLE analisada neste trabalho apresenta uma turbulência contínua mantida pelo cisalhamento vertical da velocidade média do vento. Esta situação pode ocorrer mesmo durante a noite quando o fluxo de calor negativo tende a suprimir a atividade turbulenta (Venkatran e Paine, 1985). Investiga-se a dispersão de uma fonte área localizada na superfície e no topo da Camada Limite Estável (CLE), para dois diferentes tempos de evolução a partir de medidas experimentais realizadas em experimentos de Cabauw e Minnesota (Nieuwstadt, 1984).

## 2. O MODELO MATEMÁTICO

De acordo com a teoria K, é considerado o seguinte modelo transiente de dispersão de poluentes passivos:

$$\frac{\partial}{\partial z} (K_{zz} \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z}) = \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} \quad 0 < z < h ; 0 \leq t \leq \infty, \quad (1)$$

sujeito às condições inicial e de contorno, respectivamente:

$$\bar{c}(z,t) = Q\delta(z - hf) \quad em \ t = 0, \quad (2)$$

$$K_{zz} \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z} = 0 \quad em \ z = 0 \quad e \quad z = h. \quad (3)$$

No sistema acima  $\bar{c}(z,t)$  denota a concentração média de um poluente passivo como função de uma altura  $z$  e do tempo  $t$ ;  $Q$  é a intensidade da fonte,  $h$  é a altura da camada limite estável noturna,  $\delta(z - hf)$  é a função delta de Dirac e  $hf$  é a altura da fonte.

O coeficiente de difusão turbulento vertical assumido neste trabalho foi deduzido por Degrazia e Moraes (1992), a partir da teoria de similaridade local e da teoria da difusão estatística. A sua forma, adimensionalizada pela altura  $h$  e pela velocidade de fricção  $u_*$  é:

$$\frac{K_{zz}}{u_* h} = \frac{0.33(1 - z/h)^{\alpha_1/\alpha_2} z/h}{1 + 3.7(z/h)(h/\Lambda)} \quad (4)$$

onde  $\Lambda$  é o comprimento local de Monin-Obukhov,  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  são constantes que dependem do estado de desenvolvimento temporal, da inclinação do terreno, da baroclinicidade e de outros fatores que influenciam a estrutura da CLE. A escala de comprimento  $h$ , que é fixada como a altura da CLE, expressa a profundidade da camada estável turbulenta, ou seja, a turbulência existe mesmo na presença de um fluxo negativo de calor sensível.

As medidas realizadas logo após o pôr-do-sol em Minnesota, quando processos evolutivos não estacionários na transição ainda existem, e as medidas realizadas duas a três horas após o pôr-do-sol em Cabauw, em condições bem mais estacionárias do que Minnesota, sugerem os valores de  $\alpha_1=3/2$  e  $\alpha_2=1$  para Cabauw e  $\alpha_1=2$  e  $\alpha_2=3$  para Minnesota.

A Eq. (1) é reescrita na seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} = K_{zz} \frac{\partial^2 \bar{c}(z,t)}{\partial z^2} + K_{zz}' \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z}, \quad (5)$$

Aplicando-se a idéia da Transformada Integral Generalizada – GITT (Cotta e Mikhailov, 1997), a solução do problema dado pela Eq. (1) é:

$$\bar{c}(z,t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) X(z, \beta_n) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) X_n(z). \quad (6)$$

Substituindo-se a Eq. (6) na Eq. (5) :

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n'(t) X_n(z) = K_{zz} \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) X_n''(z) + K_{zz}'(z) \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) X_n'(z) \quad (7)$$

Aqui é adotada a notação ' e '' para indicar a primeira e a segunda derivada respectivamente. Onde  $X_n(z)$  é a autofunção associada ao seguinte problema auxiliar:

$$X_n''(z) + \beta_n^2 X_n(z) = 0, \quad (8)$$

com condições de contorno que são:

$$X_n'(0) = X_n'(h) = 0. \quad (9)$$

Este problema auxiliar tem solução conhecida e dada por:

$$X_n(z) = \cos(\beta_n z), \quad (10)$$

onde  $\beta_n$  são as raízes positivas da expressão  $\sin(\beta_n h) = 0$ .

Seguindo-se com formalismo da GITT, é aplicado o operador  $\int_0^h X_m(z) dz$  na equação do problema principal, Eq. (7), obtendo-se:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} A_n'(t) \int_0^h X_m(z) X_n(z) dz &= \sum_{n=0}^{\infty} -A_n(t) \int_0^h K_{zz} X_m(z) \beta_n^2 X_n(z) dz \\ &+ \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) \int_0^h K_{zz}' X_m(z) X_n'(z) dz. \end{aligned} \quad (11)$$

Fazendo-se:

$$A(t) = \{A_n(t)\} \quad (12)$$

$$B = \left\{ \int_0^h X_m(z) X_n(z) dz \right\}, \quad (13)$$

Onde  $B=0$  quando  $n \neq m$  e  $B=Norma$  quando  $n=m$ , uma vez que as autofunções  $X_m$  e  $X_n$  são ortogonais.

$$E = \left\{ \int_0^h K_{zz} X_m(z) X_n'(z) dz \right\} + \left\{ -\beta_n^2 \int_0^h K_{zz} X_m(z) X(z) dz \right\}, \quad (14)$$

e

$$F = -B^{-1} E. \quad (15)$$

A Eq. (15) pode ser escrita na forma matricial como:

$$A'(t) + F A(t) = 0. \quad (16)$$

Aplicando-se, neste ponto, a transformada de Laplace na variável temporal da equação acima, tem-se:

$$s\bar{A}(s) - A(0) + F\bar{A}(s) = 0 \quad (17)$$

Onde a barra superior indica potencial transformado. Cabe ressaltar aqui, que a aplicação da transformada de Laplace representa a novidade em relação ao encontrado na literatura referente à GITT (Cotta e Mikhailov, 1997), onde os domínios semi-infinitos são resolvidos numericamente.  $A(0)$  na Eq. (17) representa o vetor condição inicial do sistema EDO resultante da aplicação da GITT no problema original. Para determiná-lo utiliza-se o mesmo procedimento aplicado anteriormente, resultando em:

$$A_0(0)h = X_0(hf), \quad (18)$$

e

$$A_m(0)h/2 = X_m(hf) \quad p/m \neq 0. \quad (19)$$

Retornando-se à Eq. (17), o coeficiente matricial  $F$  pode ser decomposto na seguinte forma (Cegatto e Vilhena, 1997):

$$F = \underline{X} \underline{D} \underline{X}^{-1}, \quad (20)$$

onde  $\underline{X}$  é a matriz dos autovetores e  $\underline{D}$  é a matriz diagonal dos autovalores de  $F$ . Estes são determinados numericamente utilizando-se o pacote de rotinas do Microsoft-IMSL.

Reescrevendo a Eq. (17):

$$s\bar{A}(s) + \underline{X} \underline{D} \underline{X}^{-1} \bar{A}(s) = A(0). \quad (21)$$

Que, após manipulações algébricas convenientes, resulta em:

$$\bar{A}(s) = \underline{X} (sI + \underline{D})^{-1} \underline{X}^{-1} A(0). \quad (22)$$

Onde  $I$  é a matriz identidade.

Aplicando-se a transformada inversa obtém-se:

$$\bar{A}(t) = L^{-1}\{\bar{A}(s)\} = \underline{X}L^{-1}\{(sI + \underline{D})^{-1}\}\underline{X}^{-1}A(0) \quad (23)$$

ou

$$\bar{A}(t) = \underline{XGX}^{-1}A(0). \quad (24)$$

Onde  $G$  é a matriz diagonal cujos elementos são  $\exp(-d_i t)$  e  $d_i$  os elementos da matriz diagonal de autovalores  $\underline{D}$ .

Estas matrizes são truncadas em valores suficientemente grandes para se obter a solução do sistema de equações diferenciais ordinárias acima.

Finalmente, uma vez encontrada a solução para  $A(t)$ , fica completamente definida a solução final do problema da dispersão unidimensional transiente dada pela Eq. (6).

## 2. ANÁLISE DOS RESULTADOS

Os resultados das simulações da solução analítica do modelo matemático apresentado neste trabalho, empregando os perfis de  $K_{zz}$  dados pela eq.(4) são agora apresentados. Para tanto, em todas as simulações foram usados parâmetros experimentais ( $Q = 400 \text{ g/m}^2$ ;  $h = 400 \text{ m}$ ;  $u_* = 0,31 \text{ m/s}$  e  $\Lambda = 116 \text{ m}$ ) dos experimentos de Cabaw e Minnesota.

Na tabela 1 é mostrado a convergência dos resultados de concentração obtidos para diferentes tempos e em função de diferentes números de autovalores(AV). Já na tabela 2 é mostrada a convergência em função de diferentes alturas para diferentes números de autovalores (AV).

Tabela 1. Concentração em função do tempo e do número de autovalores (AV) e altura adimensionalizada ( $Z = (z/h)$ ) de 0,2.

t	Número de Autovalores – AV									
	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
1h	216.285	216.740	216.814	216.830	216.776	216.743	216.695	216.672	216.648	216.642
2h	175.945	176.224	176.359	176.380	176.361	176.348	176.321	176.311	176.297	176.295
3h	152.566	152.713	152.839	152.854	152.844	152.840	152.822	152.819	152.810	152.809
4h	137.783	137.876	137.984	137.995	137.989	137.989	137.977	137.976	137.969	137.969

Tabela 2. Concentração em função do número de autovalores(AV) para várias alturas adimensionalizadas com a altura da camada limite e um tempo de 6700 s

Z	Número de Autovalores – AV (t=6700s)									
	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50
0.2	1.80282	1.80592	1.80726	1.80748	1.80726	1.80711	1.80683	1.80671	1.80657	1.80654
0.47	1.07376	1.06467	1.06426	1.06401	1.06411	1.06431	1.06429	1.06441	1.06437	1.06441
0.73	0.34521	0.33362	0.33394	0.33373	0.33383	0.33414	0.33423	0.33436	0.33442	0.33449
1	0.01207	0.02141	0.02227	0.02329	0.02201	0.02147	0.02135	0.02093	0.02079	0.02068

Estes resultados evidenciam a rápida convergência da solução proposta. Os resultados foram rodados em um microcomputador AMD K6 com 64MB de memória RAM.

Na Fig. 1 é mostrado o gráfico do tempo de processamento em função do número de autovalores para o cálculo da concentração em  $Z = 0.2$  e  $t = 1h$ .

Aqui é importante ressaltar que com a aplicação da Transformada de Laplace o custo computacional diminui sensivelmente em relação à aplicação clássica da GITT que resolve o domínio temporal numericamente.

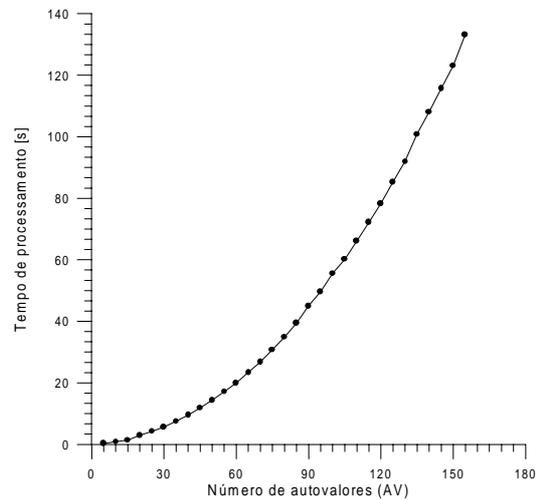


Figura 1 – Tempo de Processamento em função do número de autovalores para o cálculo da concentração na altura adimensionalizada de 0,2 e tempo 6700s.

Na Fig. 2 são apresentados os perfis verticais de  $K_{zz}$  para Cabauw e para Minnesota usados neste trabalho.

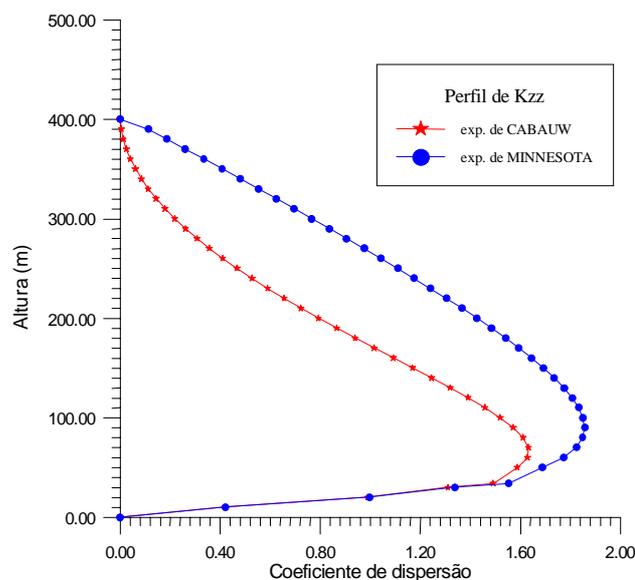


Fig. 2 – Perfil médio de  $K_{zz}$ (Degrázia e Moraes, 1992) a partir de dados experimentais de Cabauw e Minnesota

Observa-se que a camada limite planetária superficial de Minnesota e Cabauw apresentam a mesma intensidade de turbulência vertical. Para regiões mais elevadas, o caráter mais neutro da camada limite de Minnesota exibe uma maior intensidade da turbulência.

As Figuras 3 e 4 mostram o perfil vertical de concentração de poluentes emitidos por uma fonte área de altura 12,5m, localizada, respectivamente, na camada limite estável de Minnesota e Cabauw. Observa-se que a concentração em ambas as figuras não é refletida a partir do topo das CLEs. Com o passar do tempo, o poluente desloca-se de baixo para cima e preenche lentamente a CLE. Este resultado é provocado pelo decréscimo gradual da turbulência à medida que o topo da camada limite é alcançado. As concentrações superficiais são maiores no caso de Cabauw.

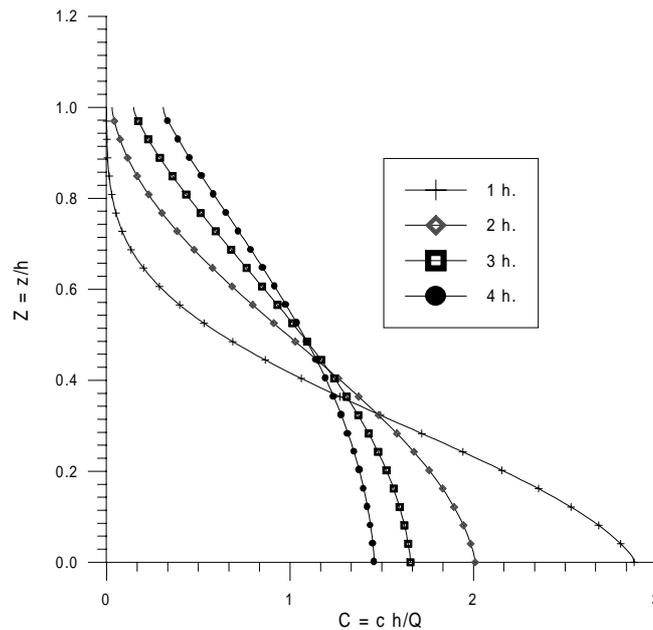


Figura 3 – Perfil vertical da concentração para diferentes tempos, com fonte área a 12,5m e  $K_{zz}$  a partir de dados de Minnesota.

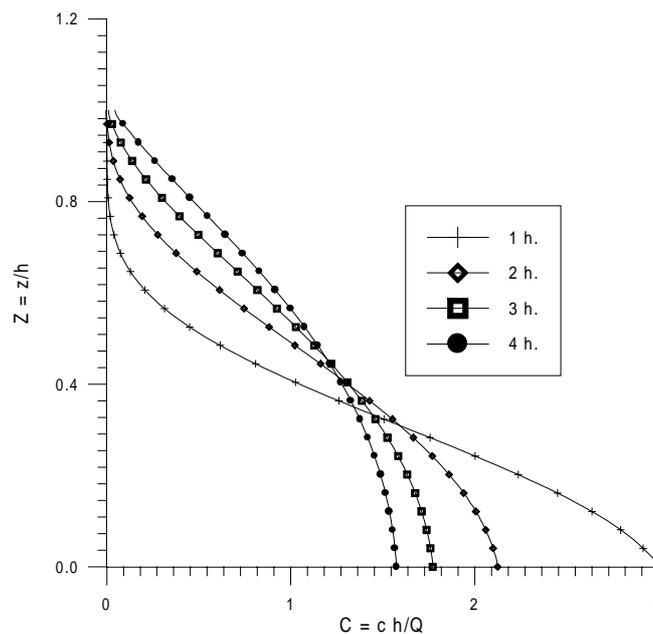


Figura 4 – Perfil vertical da concentração para diferentes tempos, com fonte área a 12,5m e  $K_{zz}$  a partir de dados de Cabauw.

Este comportamento é provocado pelo fato de existir em Minnesota uma maior mistura turbulenta na metade superior da camada limite, ou seja, em Minnesota, diferentemente de Cabauw, a maior turbulência envia uma maior quantidade de poluentes para as regiões superiores da CLP.

As Figuras 5 e 6, que expressam os perfis verticais de concentração para diferentes alturas como função do tempo indicam claramente que o poluente abandonado na CLP de Minnesota apresenta uma distribuição mais homogênea do que aquele abandonado em Cabauw.

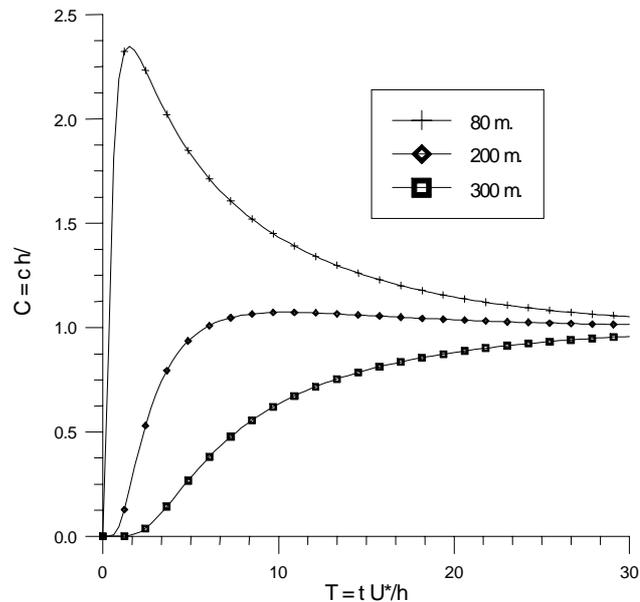


Figura 5 - Evolução temporal da concentração para diferentes alturas, com fonte área a 12,5m e  $K_{zz}$  a partir de dados de Cabauw.

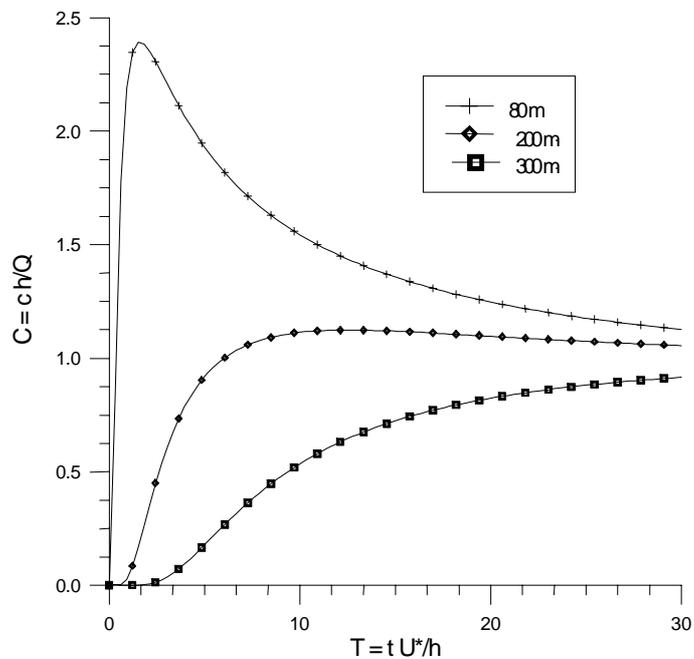


Figura 6 - Evolução temporal da concentração para diferentes alturas, com fonte área a 12,5m e  $K_{zz}$  a partir de dados de Cabauw.

Tanto para a CLP de Cabauw como para a de Minnesota, o processo de difusão turbulenta é relativamente lento quando comparado a processos de transporte em camadas limite neutra e instável, onde as escalas de tempo do transporte turbulento são menores. Percebe-se que a mistura vertical limitada no caso da CLE é a principal responsável pelo caráter não estacionário observado nos diferentes parâmetros nesta camada.

Na Figura 7, mostra-se o perfil vertical de concentração de poluentes abandonados por uma fonte área localizada na altura de 300m na CLE de Minnesota. Observa-se que mesmo para grandes tempos o poluente tende a se manter na altura da fonte. Este comportamento pode ser atribuído ao pequeno tamanho dos turbilhões e à baixa intensidade da turbulência presente nestas alturas. Os poluentes abandonados difundem-se lentamente sob a influência dos pequenos turbilhões. Estes produzem um campo turbulento quase homogêneo de modo que apenas em grandes tempos, os poluentes podem perceber o caráter mais difusivo e não homogêneo da turbulência presente em regiões mais baixas da CLE.

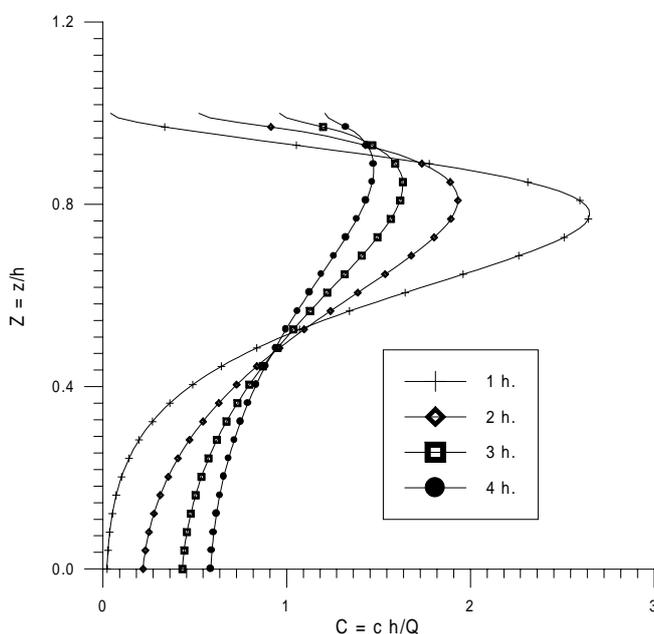


Figura 7 - Evolução temporal da concentração para diferentes alturas, com fonte área a 300m e  $K_{zz}$  a partir de dados de Minnesota.

#### 4. CONCLUSÕES

Na camada limite estável, a simulação analítica da concentração de poluentes abandonados de fontes áreas, reproduz satisfatoriamente a limitada mistura vertical observada. Os parâmetros de escala locais são consistentes com a descrição da difusão turbulenta em termos de uma teoria K. Embora no regime turbulento estável não exista a presença de transporte organizado de grande escala, o caráter não homogêneo da turbulência vertical influencia fortemente a difusão de poluentes. A altura da fonte em relação à profundidade da mistura turbulenta estável é de crucial importância na avaliação do impacto ambiental causado por poluentes abandonados de fontes elevadas. Esta posição relativa determina a evolução da altura da máxima concentração superficial.

Finalmente cabe observar que os resultados obtidos por este método apresentam boa coincidência com os resultados numéricos obtidos por diferenças finitas por Campos Velho (1992) e Nieustadt (1984). O mesmo acontece com o resultado da solução analítica de Moura et al.(1995), sem a necessidade do emprego de hipóteses simplificativas. Além do

mais, como este último, por apresentar uma solução analítica para a concentração em qualquer tempo, elimina deste modo o erro acumulado inerente aos métodos numéricos de integração no tempo. E de forma não menos importante, o emprego da transformada de Laplace no domínio temporal do problema transformado pela GITT, representa um importante avanço no sentido de que o tempo computacional foi consideravelmente reduzido.

### *Agradecimentos*

Os autores agradecem o apoio financeiro da CAPES e CNPQ.

### REFERÊNCIAS

- Campos Velho, H.F., 1992, Matriz não modal em integração e inicialização num modelo barotrópico e um estudo numérico da dispersão vertical turbulenta. Porto Alegre, 93p.[Tese de Doutorado, PROMEC, UFRGS]
- Cotta, R. M., 1993. Integral Transforms in Computational Heat and Flow. CRC Press Inc., Boca Raton, Florida, USA.
- Cotta, R.M.; Mikhailov, M., 1997. Heat Conduction Lumped Analysis Integral Transforms, Symbolic Computation. John Wiley & Sons, Baffins Lane, Chinchester. England. 352p.
- Degrazia, G.A. & Moraes, O.L.L., 1992, A Model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. Bound.-Layer Meteor., Dordrecht. n. 58, p. 205-214.
- Moura, A B.D.; Vilhena, M.T.; Degrazia, G.A., 1995 Solução Analítica para a Dispersão Vertical Turbulenta em Uma Camada Limite Estável. 1995. Proceedings. COBEM 1995.
- Nieuwstadt, F.T.M., 1984, The Turbulent structure of stable nocturnal boundary layer., J. Atmos. Sci.: Boston. n.41, p. 2202-2216, 1984.
- Venkatran, A & Paine, R. A, 1985, A Model to Estimate Dispersion of Elevated Releases into a Shear-Dominated Boundary Layer. Atmospheric Environment, v.19, p.797.

### ANALYTICAL SOLUTION OF THE ONE DIMENSIONAL TRANSIENT POLLUTANT PROBLEM WITH VARIABLE EDDY DIFFUSIVITY COEFFICIENT

**Abstract.** The objective of this work consists of presenting an analytical solution, being used the Generalized Integral Transform Technique (GITT) and Laplace Transform, for the vertical dispersion of pollutants in a stable atmospheric boundary layer, with a diffusion coefficient derived from the local similarity and of the statistical diffusion theories. Numerical simulations are reported.

**Key-words:** GITT, Analytical Solution, Atmospheric Dispersion, Laplace Transform.