SOLUÇÃO ANALITICA PARA A ADVECÇÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO-DEPOSIÇÂO BIDIMENSIONAL TRANSIENTE VIA GILTT

SCHUCH, Daniel[1]
[1]*CPPMet, Bolsista Capes, UFPel; underschuch@gmail.com*

BUSKE, Daniela[2]
[2]*IFM/DME,Orientador, UFPel; daniela.buske@ufpel.edu.br*

CARVALHO, Jonas[1]
[1]*CPPMet, Co-orientador, UFPel; jonas.carvalho@ufpel.edu.br*

1 INTRODUÇÃO

Neste trabalho é apresentada uma solução analítica para a equação de advecção-difusão-reação-deposição transiente bidimensional para modelar a dispersão de poluentes químicos lançados na atmosfera. Este modelo é capaz de prever episódios agudos de poluição através da detecção antecipada dos efeitos das condições meteorológicas sobre a dispersão de poluentes na atmosfera, assim como da avaliação do impacto da adição de novas fontes poluidoras. Além disso, o modelo apresenta um baixo custo computacional e a vantagem da representação de forma explicita de processos de produção e remoção dos poluentes.

A solução da equação de advecção-difusão-reação-deposição proposta é obtida pela combinação das técnicas da transformada de Laplace e GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) (Moreira et al., 2009). Primeiramente a técnica da transformada de Laplace é aplicada na variável temporal transformando o problema transiente em estacionário. A técnica GILTT é então utilizada para resolver o problema estacionário. Esta combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão, é usada uma base trigonométrica determinada com o auxílio de um problema associado de Sturm-Liouville. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. A solução do sistema EDO resultante da aplicação da GILTT é feita analiticamente via transformada de Laplace e diagonalização. A derivação da solução do problema estacionário é analítica exceto pelo erro de truncamento. Finalmente, a solução do problema é obtida pela transformada inversa de Laplace utilizando o método da Quadratura Gaussiana.

2 METODOLOGIA (MATERIAL E MÉTODOS)

Neste trabalho é considerada a equação de advecção-difusão-reação-deposição bidimensional transiente,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(k_z \frac{\partial c}{\partial z}\right) - \eta C + J \qquad (1)$$

onde z é altura da Camada Limite Atmosférica, x é a direção do vento médio, K_z é o coeficiente de difusão turbulento dependente da altura z, η é a taxa de decaimento da reação de primeira ordem e J é uma taxa de produção de ordem zero. A Eq. (1) está às seguintes condições de contorno, de fonte e inicial:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \qquad \text{em } z=h \qquad (2a)$$

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = V_d C \qquad \text{em } z=0 \qquad (2b)$$

$$uC(0,z,t) = Q\delta(z - H_s) \qquad \text{em } x=0 \qquad (2c)$$

$$C(x,z,0) = 0 \qquad \text{em } t=0 \qquad (2d)$$

onde V_d é a velocidade de deposição, Q é a taxa de emissão do poluente, H_s é a altura da fonte e δ é a função delta de Dirac.

Aplicando a transformada de Laplace, onde $C(t,x,z) \xrightarrow{Laplace} c(r,x,z)$ e $J \xrightarrow{Laplace} j$, em (1) e utilizando a condição inicial (2b) temos:

$$u\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(k_z \frac{\partial c}{\partial z}\right) - (\eta + r)c + j \qquad (3)$$

A Eq. (3) é resolvida pela técnica GILTT (Moreira et al., 2009). Inicialmente, expandimos a concentração de poluentes em série da seguinte forma:

$$c(x,z,r) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(x,r)\Psi_n(z) \qquad \text{e} \qquad j = \sum_{n=0}^{\infty} j_n \Psi_n(z) \qquad (4)$$

onde $\psi_n = \cos(\lambda_n(z-h))$ são as autofunções do problema de Sturm–Liouville associado ao problema original (Özisik, 1980). Os autovalores são solução da equação transcendental $V_d/K_z = \lambda_n \tan(\lambda_n h)$.

De forma a encontrar a solução para a variável transformada $c_n(x,r)$ substitui-se (4) em (3). Ainda, aplicando o operador integral $\int_0^h (\quad)\psi_m dz$ no problema resultante podemos reescrever a equação, em notação matricial, da seguinte forma:

$$Y'(x,r) + F.Y(x,r) + E = 0 \qquad (5)$$

onde $F = A^{-1}B$, $E = A^{-1}H$, $a_{nm} = \{\int u\psi_n\psi_m dz\}$, $h_{nm} = \{j_n \int \psi_n\psi_m dz\}$ e $b_{nm} = \{-\int K'_z\psi'_n\psi_m dz + \lambda_n^2 \int K_z\psi_n\psi_m dz + (\eta + r)\int \psi_n\psi_m dz\}$.

Para a condição de fonte a solução é análoga, ou seja, aplicando o mesmo procedimento anterior obtemos:

$$Y(0,r) = \frac{Q}{r}\psi_m(H_s).A^{-1} \qquad (6)$$

O problema transformado (5) é resolvido analiticamente aplicando a transformada de Laplace na variável x, onde $Y(x,r) \xrightarrow{Laplace} \overline{Y(s,r)}$:

$$s\overline{Y(s,r)} + F.\overline{Y(s,r)} - \left(\frac{1}{s}\right)E = \overline{Y(0,r)} \quad (7)$$

Assumindo que a matriz F é não degenerada podemos escrever $F = X^{-1}DX$, onde D é a matriz diagonal dos autovalores, X é a matriz dos autovetores e X^{-1} a sua inversa. Substituindo em (7) e após algumas manipulações algébricas obtemos:

$$\overline{Y(s,r)} = X.(sI + D)^{-1}.X^{-1}.\left(\overline{Y(0,r)} + \left(\frac{1}{s}\right)E\right) \quad (8)$$

Aplicando a transformação inversa de Laplace obtemos a solução do problema estacionário:

$$Y(x,r) = X.G(x,r).X^{-1}Y(0,r) + X.P.X^{-1}.E \quad (9)$$

onde *G* e *P* são matrizes diagonais de elementos $e^{-d_n x}$ e $(1/d_n)(1 - e^{-d_n x})$.

Aplicando agora a transformada inversa de Laplace ao problema (9) teremos a solução do problema transiente totalmente determinada. Esta é obtida numericamente pelo método da quadratura Gaussiana:

$$C(x,z,t) = \sum_{k=1}^{M} \frac{P_k}{t} A_k \sum_{i=0}^{N} \bar{c}_i\left(x, \frac{P_k}{t}\right)\psi_i(z) \quad (10)$$

onde A_k e P_k são os pesos e raízes da quadratura (Stroud e Secrest, 1966).

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Como um exemplo de aplicação, apresentamos resultados preliminares de uma simulação de dispersão do SO_2 emitido pela Usina Termelétrica Presidente Médici de Candiota/RS. Esta usina é uma importante fonte de liberação de SO_2 na região. Os dados meteorológicos necessários para o modelo foram coletados durante um experimento de campo realizado a 5Km da usina, no inverno de 1999. A emissão dos poluentes é dada de forma continua, através de uma fonte elevada a 150 metros do nível do solo a uma taxa de 0.7Kg s^{-1}. Maiores detalhes sobre o experimento podem ser encontrados em Arbage et al. (2006).

Assume-se, adicionalmente, um perfil potência para o campo de vento e a parametrização de camada limite é a proposta por Degrazia et al. (1997). De modo a podermos comparar os resultados aqui obtidos com os disponíveis na literatura, foram escolhidos os dados meteorológicos dos dias 28 e 29 de agosto de 1999, a velocidade de deposição do poluente nula e que este é emitido sem empuxo. A taxa de produção utilizada foi a expressão exponencial $J(t) = J_0 e^{-\alpha t}$, onde □ é uma taxa de decaimento e J_0 é uma constante. As médias horárias da taxa de decaimento do SO_2 são respectivamente de 1,744 e 2,745 % por hora, entre as 09 e 10h, dos dias escolhidos. Neste horário, a altura da camada limite, para ambos os dias, é a mesma (300 m), as estabilidades atmosféricas praticamente iguais (z/L=-0,29 e z/L=-0,28), porém a velocidade do vento diferente, (3,81m/s para o dia 28 e 1,70m/s para o dia 29).

Assumindo que a concentração de poluentes possui uma distribuição gaussiana na direção y os resultados obtidos mostram que, a 1600m da fonte, a concentração máxima de poluentes é de 49 $\mu g/m^3$ para o dia 28 e 66 $\mu g/m^3$ para o dia 29. Resultados similares são encontrados na literatura (Arbage et al., 2006). A menor concentração no primeiro dia é explicada pela diferença nas velocidades do vento nos dias escolhidos, uma vez que no dia 28 temos um maior efeito advectivo.

4 CONCLUSÕES

O objetivo principal do nosso trabalho foi atingido, uma vez que uma nova solução para a equação de advecção-difusão-reação-deposição transiente bidimensional foi apresentada. A solução obtida foi utilizada para simular a dispersão do SO_2 emitido pela Usina Termelétrica Presidente Médici de Candiota/RS. Os resultados preliminares das simulações foram apresentados e mostraram boa concordância com os dados da literatura. O próximo passo é utilizar e testar expressões para o termo de decaimento e de produção, expressões estas que levem em conta os efeitos do empuxo, da radiação solar e da umidade relativa.

5 REFERÊNCIAS

ARBAGE, M. C.; DEGRAZIA, G. A.; MORAES O. L. Simulação euleriana da disperção local da pluma de poluente atmosférico de Candiota-RS. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.21, n.2, p. 153-160, 2006.

DEGRAZIA, G. A.; CAMPOS VELHO, H. F.; CARVALHO, J. C.. Nonlocal Exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contr. Atmospheric Physics**, p. 57-64, 1997.

MOREIRA, D.M.; VILHENA M.T.; BUSKE, D.; TIRABASSI T.. The State-of-art of the GILTT Method to Simulate Pollutant Dispersion in the Atmosphere. **Atmospheric Research**. v 92. p 1-17, 2009.

Özisik, M..**Heat Conduction**. New York: John Wiley & Sons, 1980.

STROUD, A. H.; SECREST, D. **Gaussian quadrature formulas**. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice Hall Inc. 1966.