Trabalho apresentado no CNMAC, Gramado - RS, 2016.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

# Modelagem da Dispersão de Poluentes na Atmosfera Considerando uma Fonte Móvel

Everson J. G. da Silva<sup>1</sup>, Marco T. Vilhena<sup>2</sup> PPG em Engenharia Mecânica, PROMEC, UFRGS, Porto Alegre, RS Daniela Buske<sup>3</sup>, Régis Sperotto de Quadros<sup>4</sup> PPG em Modelagem Matemática, PPGMMAT, UFPel, Pelotas, RS Tiziano Tirabassi<sup>5</sup> ISAC-CNR, Bolonha, Itália

**Resumo**. O presente trabalho refere-se ao problema de dispersão de poluentes na atmosfera com a emissão realizada através de uma fonte móvel. Para representar este fenômeno, apresenta-se um novo modelo matemático que utiliza a equação da advecção-difusão. Resolvese esta equação através do método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) e utiliza-se o experimento de OLAD (*Over-Land Atmospheric Dispersion*) para simulação. Os resultados obtidos ressaltam a capacidade do modelo em representar o comportamento da dispersão presente no experimento.

Palavras-chave. Dispersão de poluentes, Fonte móvel, GILTT, OLAD.

## 1 Introdução

È notório que a emissão de poluentes na atmosfera é motivo de preocupação mundial devido às suas diversas consequências, entre elas: problemas relacionados à saúde, o impacto ambiental que atinge a flora e a fauna, a redução da camada de ozônio e o efeito estufa. Com essa motivação, pesquisadores de diversas áreas procuram estudar e compreender as causas, consequências e/ou comportamento destes poluentes.

Tendo em vista os altos custos das pesquisas experimentais, os modelos matemáticos tornam-se uma maneira eficaz para o entendimento do fenômeno, o qual controla o transporte, a dispersão e a transformação físico-químico da imersão de poluentes na atmosfera. Sendo assim, o presente trabalho apresenta uma solução analítica para um novo modelo, que descreve a dispersão de poluentes na atmosfera gerada por uma fonte móvel. Este, por sua vez, é solucionado através do método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*), bem como, o modelo é validado com a comparação entre os resultados obtidos e os resultados apresentados no experimento de OLAD.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>eversonjg@gmail.com

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>vilhena@pq.cnpq.br

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>danielabuske@pq.cnpq.br

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>regis.quadros@ufpel.edu.br

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>t.tirabassi@isac.cnr.it

# 2 Descrição do Problema

O modelo matemático proposto neste trabalho descreve o fenômeno de dispersão presente no experimento de OLAD, realizado de 8-25 de setembro de 1997 em Dugway (U.S. Army Dugway Proving Ground), no West Desert Test Center, que está localizado no centro-oeste do estado de Utah, aproximadamente 1300 m acima do nível do mar [1]. O teste foi realizado com a liberação de quantidades conhecidas de  $SF_6$  ao longo de uma linha perpendicular a direção prevalecente do vento. As liberações foram realizadas por sistemas de disseminação montados em um Caminhão e um avião. O sistema de disseminação montado no caminhão produziu a liberação de 1,5 Kg/min de vazão, sobre uma distância de 10 Km (fonte em linha de 10 Km), na rodovia Bravo, Figura 1, a 3m do nível do solo. A pluma em linha de poluentes foi carregada (advecção) na direção dos analisadores (LC101-LC115) de concentração. As amostras de concentração foram obtidas usando-se três linhas de amostragem paralelas às fontes em linha, variando de 2 a 20 Km.



(a) Mapa do campo de experimento [1].



(b) Trajeto da liberação do traçador e posição das bolsas de amostragem [7].

Figura 1: Campo de experimento de OLAD.

## 3 Modelo Matemático

A equação de advecção-difusão é utilizada, com muita frequência, em estudos da dispersão de poluentes na atmosfera, ela é obtida através da equação de conservação de massa (equação da continuidade) combinada com o fechamento de primeira ordem (teoria K). Assim, de acordo com [2], possui a seguinte forma:

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{c}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \overline{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} \right) + S, \quad (1)$$

onde  $\overline{c}$  representa a concentração média de poluentes;  $\overline{u}$ ,  $\overline{v}$ , e  $\overline{w}$  são as componentes do vento médio nas direções x, y e z, respectivamente;  $k_x$ ,  $k_y$  e  $k_z$  são os coeficientes de difusão turbulenta longitudinal, lateral e vertical e S representa a fonte.

Neste problema, a direção do vento é predominantemente orientada na direção da coordenada x. Com isso, desconsideram-se as componentes  $\overline{v} \in \overline{w}$  da equação (1). Sendo assim, é possível simplificá-la e reescrevê-la como:

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \overline{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} \right).$$
(2)

Considera-se o fluxo de concentração nulo no topo da camada limite planetária (CLP)  $z_i$  e nas distâncias  $L_x$  e  $L_y$  longe da fonte. Sendo assim, as condições de contorno são definidas por:  $k_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = k_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = k_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$  para x = 0 e  $x = L_x$ , y = 0 e  $y = L_y$ , z = 0 e  $z = z_i$ , respectivamente.

Leva-se em conta, que inicialmente não há presença de poluentes na atmosfera. Com isso, a condição inicial é dada por:  $\overline{c}(x, y, z, 0) = 0$ 

A representação da fonte em linha, do problema, é dada por uma discretização com finitas fontes pontuais, indicada por:

$$\overline{uc}(0, y, z, t) = q\delta(y - y_0)\delta(z - H_s)\delta(t - t0),$$

onde q representa a taxa de emissão e  $\delta$  é a função delta de Dirac.

### 3.1 Solução pelo Método GILTT

Para a resolução da equação (2) utiliza-se o método da GILTT [3]. Neste método, inicialmente, aplica-se a transformada de Laplace no tempo. Com isso, obtém-se a seguinte equação.

$$s\overline{c}(x,y,z,s) + \overline{u}(z)\frac{\partial\overline{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k_x\frac{\partial\overline{c}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k_y\frac{\partial\overline{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k_z\frac{\partial\overline{c}}{\partial z}\right).$$
(3)

Em seguida, expande-se a concentração de poluentes em termos das autofunções  $\zeta_n(y)$  do problema associado de Sturm-Liouville [11], de tal forma que

$$\overline{c}(x, y, z, s) = \sum_{n=0}^{N} \frac{c_n(x, z, s)\zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}},$$

e aplica-se o operador integral  $1/N_m^{\frac{1}{2}} \int_0^{L_y} (\cdot) \zeta_m(y) dy$ . Logo,

$$s\sum_{n=0}^{N}c_{n}\int_{0}^{L_{y}}\frac{\zeta_{n}(y)\zeta_{m}(y)}{N_{n}^{\frac{1}{2}}N_{m}^{\frac{1}{2}}}dy + \overline{u}\sum_{n=0}^{N}\frac{\partial c_{n}}{\partial x}\int_{0}^{L_{y}}\frac{\zeta_{n}(y)\zeta_{m}(y)}{N_{n}^{\frac{1}{2}}N_{1_{m}}^{\frac{1}{2}}}dy = \sum_{n=0}^{N}\frac{\partial}{\partial x}\left(k_{x}\frac{\partial c_{n}}{\partial x}\right)\int_{0}^{L_{y}}\frac{\zeta_{n}(y)\zeta_{m}(y)}{N_{n}^{\frac{1}{2}}N_{m}^{\frac{1}{2}}}dy + \\ -\lambda_{n}^{2}k_{y}\sum_{n=0}^{N}c_{n}\int_{0}^{L_{y}}\frac{\zeta_{n}(y)\zeta_{m}(y)}{N_{n}^{\frac{1}{2}}N_{m}^{\frac{1}{2}}}dy + \sum_{n=0}^{N}\frac{\partial}{\partial z}\left(k_{z}\frac{\partial c_{n}}{\partial z}\right)\int_{0}^{L_{y}}\frac{\zeta_{n}(y)\zeta_{m}(y)}{N_{n}^{\frac{1}{2}}N_{m}^{\frac{1}{2}}}dy,$$

$$\tag{4}$$

onde define-se:

$$\alpha_{n,m} = \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}N_m^{\frac{1}{2}}} dy = \begin{cases} 0, \ m \neq n\\ 1, \ m = n \end{cases}$$

De uma forma simplificada, escreve-se a equação (4) como

$$s\alpha_{n,m}c_n + \overline{u}\alpha_{n,m}\frac{\partial c_n}{\partial x} = \alpha_{n,m}\frac{\partial}{\partial x}\left(k_x\frac{\partial c_n}{\partial x}\right) - \lambda_n^2 k_y\alpha_{n,m}c_n + \alpha_{n,m}\frac{\partial}{\partial z}\left(k_z\frac{\partial c_n}{\partial z}\right).$$
 (5)

Neste momento, repete-se o método GILTT na equação (5). Utiliza-se a expansão  $c_n(x, z, s) = \sum_{i=0}^{I} \overline{c}_i(x, s)\xi_i(z)$ , onde  $\xi_i(z)$  são as autofunções do problema associado, e posteriormente aplica-se o operador integral  $\int_0^{z_i} (\cdot)\xi_{l_j}(z)dz$ . Em seguida, escreve-se a equação resultante na forma matricial

$$AY''(x,s) + BY'(x,s) + EY(x,s) = 0,$$
(6)

onde

$$A = \alpha_{n,m} \int_0^{z_i} k_x \xi_i(z) \xi_j(z) dz,$$
  

$$B = \alpha_{n,m} \left[ \int_0^{z_i} \frac{\partial k_x}{\partial x} \xi_i(z) \xi_j(z) dz - \int_0^{z_i} \overline{u} \xi_i(z) \xi_j(z) dz \right],$$
  

$$E = \alpha_{n,m} \left[ -\int_0^{z_i} s \xi_i(z) \xi_j(z) dz - \lambda_n^2 k_y \int_0^{z_i} \xi_i(z) \xi_j(z) dz + \int_0^{z_i} k_z' \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} \xi_j(z) dz - \mu_i^2 \int_0^{z_i} k_z \xi_i(z) \xi_j(z) dz \right],$$

Resolve-se a equação (6) através da redução de ordem, aplicação da transformada de Laplace e diagonalização. Assim, obtém-se  $Y(x,s) = \overline{c}_i(x,s)$ . Logo, determina-se  $c_n(x, z, s)$  e, consequentemente, encontra-se  $\overline{c}(x, y, z, s)$ . Para obter  $\overline{c}(x, y, z, t)$  é necessário realizar a transformada inversa de Laplace, esta inversão é feita numericamente. Dessa forma, determina-se a solução final da equação de advecção-difusão (3).

## 4 Resultados e Discussões

#### 4.1 Parametrização

Em problemas de difusão, a escolha de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para modelar a dispersão de poluentes. A partir de um ponto de vista físico, uma parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no sentido que os modelos matemáticos recebem uma relação aproximada, a qual substitui um termo desconhecido. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os

parâmetros são calculados e relacionados ao entendimento da CLP [9]. Sendo assim, em seguida, definem-se as parametrizações utilizadas no modelo.

Coeficiente de difusão vertical [5]

$$K_z = \frac{0.3(1 - z/z_i)u_*z}{1 + 3.7(z/\Lambda)},$$
$$\Lambda = L(1 - z/z_i)^{5/4},$$

onde  $u_*$  é a velocidade de fricção, z é a distância na vertical e  $z_i$  é a altura da camada limite.

Coeficiente de difusão longitudinal e lateral [4]:

$$\frac{K_{\alpha}}{u_* z_i} = \frac{2\sqrt{\pi} 0.64a_{\nu}^2 (1 - \frac{z}{z_i})^{\alpha_1} (\frac{z}{z_i}) X' [2\sqrt{\pi} 0.64a_{\nu}^2 (\frac{z}{z_i}) + 8a_{\nu} (f_m)_{\nu} (1 - \frac{z}{z_i})^{\alpha_1/2} X']}{[2\sqrt{\pi} 0.64 (\frac{z}{z_i}) + 16a_{\nu} (f_m)_{\nu} (1 - \frac{z}{z_i})^{\alpha_1/2} X']^2},$$

onde  $(f_m)_{\nu} = (f_m)_{n,\nu}(1 + 3.7(z/\Lambda))$  é a frequência do pico espectral,  $(f_m)_{n,\nu} = 0.33$  é frequência do pico espectral na estratificação neutra.  $\Lambda = L(1 - z/z_i)^{(1.5\alpha_1 - \alpha_2)}$  ( $\alpha_1 = 1.5$ ;  $\alpha_2 = 1$ ) é o comprimento de Monin-Obukhov local e  $a_{\nu} = (2.7C_{\nu})^{1/2}/(f_m)_{n,\nu}^{1/3}$ , onde  $C_{\nu} = 0.4$ ,  $u_*$  é a velocidade de fricção e  $X' = xu_*/\overline{u}z_i$  é a distância adimensional.

O perfil de vento utilizado neste trabalho é definido pela lei de potência [12].

#### 4.2 Resultados

Para a simulação do modelo, utilizou-se o experimento ocorrido no dia 12/09/1997 (OLAD 5), o qual teve a liberação do traçador  $SF_6$  das 06h 58 min às 07h 08min através do sistema de dissiminação acoplado a um caminhão. As bolsas de amostragem foram dispostas em linhas paralelas a fonte, nas distâncias de 2, 5 e 10 Km, sobre as rodovias Foxtrot, Juliet e Papa, espaçadas de 100 em 100 metros e produziram amostras médias de concentrações de 15 minutos.

Os dados de entrada do modelo (velocidade do vento medida em 10 m (u), velocidade de fricção  $(u_*)$ , comprimento de Monin-Obukhov (L) e altura da camada limite  $(z_i)$ ) são definidos de acordo com a condição de estabilidade da CLP no período em que a dispersão foi analisada. Os cálculos destes parâmetros encontram-se em [6], esses foram realizados com o uso de dados fornecidos em [1]. Na Figura 2 encontram-se os resultados das concentrações, obtidos pelo modelo, de cada fonte pontual (10 fontes) utilizada para representar a fonte em linha. Estes dados são referentes à bolsa de amostragem LC115. A concentrações di das terador é dada pelo somatório das concentrações de cada fonte. O comportamento apresentado no gráfico dá-se pelo fato do caminhão deslocar-se no sentido da fonte 1 à fonte 10 e as bolsas de amostragem estarem presente entre as fontes 2 e 6. Isso justifica o pico de concentraçõe presente no gráfico.

Os resultados apresentados na Tabela 1 são referentes as amostras coletadas às 7h45min pelas 15 bolsas de amostragem (definidas por LC) localizadas na rodovia Foxtrot à 2 Km da linha de emissão.

 $\mathbf{6}$ 



Figura 2: Concentração do poluente para cada uma das 10 fontes pontuais. Resultados do analisador LC115 às 7h45min.

Tabela 1: Concentrações observadas no experimento (CO) e concentrações preditas pelo modelo (CP).

Amostrador	CO [pptv]	CP [pptv]	Amostrador	CO [pptv]	CP [pptv]
LC101	470.1	5533.69	LC109	7565.4	7010.36
LC102	5.24	5744.58	LC110	8498.44	8473.20
LC103	76.04	5719.13	LC111	7878.68	7505.47
LC104	7951.42	7841.28	LC112	7329.51	7487.19
LC105	6433.66	6809.26	LC113	8294.43	8345.55
LC106	5697.37	6648.48	LC114	10190.91	11396.06
LC107	5930.83	6603.05	LC115	9198.1	10658.07
LC108	5974.47	6631.44			

# 5 Conclusões

O modelo apresentado, neste trabalho, traz uma eficaz abordagem para o problema de dispersão de poluentes na atmosfera através de uma fonte móvel, visto que a representação da fonte em linha por finitas fontes pontuais torna mais viável a resolução de forma analítica da equação de advecção-difusão, utilizada para descrever o fenômeno presente. Os resultados numéricos mostram a capacidade do modelo em representar o comportamento da dispersão presente no experimento, mesmo com a diferença presente nos três primeiros amostradores. Este fato não compromete a validade do modelo, visto que as concentrações observadas são atípicas, causadas por uma imprecisão dos aparelhos de medição ou por uma perturbação pontual não detectada pelo modelo. Estes casos serão analisados em trabalhos futuros.

## Referências

- C. A. Biltoft, S. D. Turley, T. B. Watson, G. H. Crescenti and R. G. Carter, Over-Land Atmospheric Dispersion (OLAD) Test Summary and Analysis., *Customer Report*, U.S. Army Dugway Proving Ground, USA, 1999.
- [2] A. K. Blackadar, Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences. Springer-Verlag, 1997.
- [3] D. Buske, M. T. Vilhena, T. Tirabassi, B. Bodmann, Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. *Journal of En*vir. Protec., 4:1-10, 2012.
- [4] G. A. Degrazia, M. T. Vilhena, O. L. L. Moraes, An Algebraic Expression for the Eddy Diffusivities in the Stable Boundary Layer: A Description of Near-Source Diffusion Il Nuevo Cimento 19C:399-403, 1996.
- [5] G. A. Degrazia, D. Anfossi, J. C. Carvalho, C. Mangia, T. Tirabassi, H. F. C. Velho, Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability coditions. *Atmospheric Environment*, 34:3575-3583, 2000.
- [6] F. C. Degrazia, Evolução da camada limite planetária para dispersão de poluentes pelo método da GILTT, Dissertação de Mestrado, UFRGS, 2005.
- [7] GOOGLE. Google Earth. Version versão 7.1.5.1557. 2015.USA. U.S. Army Dugway Proving Ground. Disponível em: <https://www.google.com/earth/download/ge/agree.html>. Acesso em: 21/03/2016.
- [8] J. S. Irwin, A Theoretical Variation of the Wind Profile Power-Low Exponent as a Function of Surface Rough- ness and Stability. *Atmospheric Environment*, 13:191-194, 1979.
- [9] C. Mangia, D. M. Moreira, I. Schipa, G. A. Degrazia, T. Tirabassi, U. Rizza, Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. *Atmospheric Environment*, 36:67-76, 2002.
- [10] D. M. Moreira, M. T. Vilhena, D. Buske, T. Tirabassi, The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. *Atmospheric Research*, 92:1-17, 2009.
- [11] M. N. Ozisik, Heat Conduction. John Wiley & Sons, INC, 1993.
- [12] H. A. Panofsky, J. A. Dutton, Atmospheric Turbulence. John Wiley and Sons, 1988.

7