COMPARAÇÃO DE DIFERENTES MÉTODOS DE INVERSÃO NUMÉRICA PARA A TRANSFORMADA DE LAPLACE NA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

KARINE RUI[1]; CAMILA PINTO DA COSTA[2]

[1]Universidade Federal de Pelotas, PPGMMAT – karinerui@gmail.com
[2]Universidade Federal de Pelotas, IFM/DME – camiladacosta@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

A dispersão e transporte de poluentes na atmosfera pode ser modelada pela equação de advecção-difusão e uma das formas de resolução é através da aplicação da transformada de Laplace. O uso dessa transformada leva a soluções que por vezes uma inversão analítica é difícil de obter, nesses casos métodos de inversão numéricos são fundamentais para a construção da solução final da equação.

Neste trabalho, apresentamos a resolução da equação bidimensional estacionária considerando a deposição seca do poluente no solo, através do método ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*) (MOREIRA et al., 2006). São avaliados três métodos de inversão numérica da transformada de Laplace. O objetivo é avaliar o modelo para condições instáveis da atmosfera utilizando diferentes parametrizações para o perfil do vento e o coeficiente de difusão turbulento. Os resultados obtidos com os diferentes métodos de inversão são comparados com os dados experimentais.

2. METODOLOGIA

A equação de advecção-difusão bidimensional estacionária, que modela a dispersão de poluentes na atmosfera, considerando a velocidade de deposição seca do poluente como uma condição de fluxo não nulo na superfície, pode ser escrita da seguinte forma:

$$u\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) \tag{1}$$

com $0 < z < h$ e $x < 0$, onde $C(x,z)$ indica a concentração média, u a velocidade média do vento na direção horizontal e K_z é o coeficiente de difusão vertical, sujeita as seguintes condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = V_d C \qquad \text{em} \qquad z = 0 \tag{1a}$$

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \qquad \text{em} \qquad z = h \tag{1b}$$

e condição de fonte contínua:

$$uC(0,z) = Q\delta(z - H_s) \qquad \text{em} \qquad x = 0 \tag{1c}$$

onde V_d é a velocidade de deposição no solo, h é a altura da camada limite planetária (CLP), H_s é a altura da fonte, Q é a taxa de emissão contínua da fonte e δ é a função delta de Dirac.

O problema (1) é resolvido pela aplicação do método ADMM (MOREIRA et al., 2006) e a Transformada de Laplace. Esse método consiste em discretizar a altura h da CLP em *N* subcamadas obtendo valores médios para a velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical em cada subcamada. Os *N* problemas obtidos são resolvidos aplicando a Transformada de Laplace, resultando na equação:

$$\overline{C_n}(s,z)=\left[A_n e^{\left[\left(\sqrt{\frac{u_n S}{K_{z_n}}}\right).z\right]}+B_n e^{-\left[\left(\sqrt{\frac{u_n S}{K_{z_n}}}\right).z\right]}+\frac{Q}{2\sqrt{u_n K_{z_n} S}}\left(e^{-\left[\left(\sqrt{\frac{u_n S}{K_{z_n}}}\right)(z-H_s)\right]}-e^{\left[\left(\sqrt{\frac{u_n S}{K_{z_n}}}\right)(z-H_s)\right]}\right)H(z-H_s)\right] \tag{2}$$

onde $H(z-H_s)$ é a função de Heaviside.

Para obter a concentração final de poluentes a equação (2) é invertida numéricamente. Foram utilizados três métodos de inversão para a transformada de Laplace: Quadratura Gaussiana, Algoritmo de *Fixed-Talbot* e um método baseado na série de Fourier.

Pelo método da Quadratura Gaussiana (STROUD; SECREST, 1966) obtemos a concentração final dada como:

$$C_n(x,z)=\sum_{k=1}^{N_p}\frac{p_k}{x}w_k\left[A_n e^{R^*_{k,n}\cdot z}+B_n e^{-R^*_{k,n}\cdot z}+\frac{Q}{2K_{z_n}\cdot R^*_{k,n}}\left(e^{-R^*_{k,n}(z-H_s)}-e^{R^*_{k,n}(z-H_s)}\right)H(z-H_s)\right] \tag{3}$$

para $n=1:N$. As constantes w_k e p_k são, respectivamente, os pesos e as raízes da quadratura de Gauss, $R^*_{k,n}=\sqrt{\frac{u_n}{K_{z_n}}\frac{p_k}{x}}$ e $N_p=8$ o número de pontos da quadratura.

A concentração de poluentes pelo Algoritmo de *Fixed-Talbot* (ABATE; VALKÓ, 2004) é obtida por:

$$C_n(x,z)=\frac{r}{M}\left[\frac{1}{2}\overline{C_n}(r,z)e^{rx}+\sum_{k=1}^{M-1}\mathrm{Re}\left[e^{xS(\theta_k)}\,\overline{C_n}\left(S(\theta_k),z\right)\left(1+i\overline{\omega}(\theta_k)\right)\right]\right], \tag{4}$$

onde $S(\theta_k)=r\theta(\cot\theta+i)$, $\overline{\omega}(\theta_k)=\theta_k+(\theta_k\cot\theta_k-1)\cot\theta_k$, $\theta_k=\frac{k\pi}{M}$, $-\pi<\theta<+\pi$, $i\in C$, M representa o número de termos do somatório e r é um parâmetro experimental. Os melhores resultados foram obtidos com $M=100$ e $r=(2\cdot M)/(101\cdot x)$.

E por fim, utilizamos o método baseado na série de Fourier (CRUMP, 1976):

$$C_n(x,z)=\frac{\exp(\gamma x)}{T}\left[\frac{1}{2}\overline{C_n}(\gamma,z)+\sum_{k=1}^{M^*}\left\{\mathrm{Re}\left[\overline{C_n}\left(\gamma+\frac{ik\pi}{T},z\right)\cos\left(\frac{k\pi x}{T}\right)\right]-\mathrm{Im}\left[\overline{C_n}\left(\gamma+\frac{ik\pi}{T},z\right)\sin\left(\frac{k\pi x}{T}\right)\right]\right\}\right] \tag{5}$$

onde γ, T são parâmetros livres e $M^*=100$ foi o número de termos utilizado.

Para simular a concentração de poluentes é preciso escolher parâmetros adequados para o perfil do vento e o coeficiente de difusão. Neste trabalho para o coeficiente de difusão turbulento utilizamos duas fórmulas válidas para condições convectivas da atmosfera:

PLEIM; CHANG (1992): $K_z=kw_*z\left(1-\frac{z}{h}\right)$ (6)

DEGRAZIA et al. (1997): $\frac{K_z}{w_* h} = 0.22\left(\frac{z}{h}\right)^{1/3}\left(1-\frac{z}{h}\right)^{1/3}\left[1-\exp\left(-4\frac{z}{h}\right)-0.0003\exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right]$ (7)

Para a velocidade média do vento utilizamos a fórmula de similaridade: PANOFSKY; DUTTON (1984): $u = \frac{u_*}{k}\left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)-\Psi_m\left(\frac{z}{L}\right)\right]$ se $z \le z_b$ (8)

onde $z_b = \min[|L|, 0.1h]$, $k = 0.4$ é a constante de von Kármám, L é o comprimento de Monin-Obukov, u_* é a velocidade de fricção, z_0 é o comprimento de rugosidade e Ψ_m é a função de estabilidade:

$\Psi_m = \ln\left(\frac{1+A^2}{2}\right)+\ln\left(\frac{1+A}{2}\right)^2 - 2\tan^{-1}(x)+\frac{\pi}{2}$ com A definido por $A=\left(1-15\frac{z}{L}\right)^{1/4}$.

E o perfil de vento potência (PANOFSKY; DUTTON 1984): $\frac{\overline{u_z}}{\overline{u_1}} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^p$ (9)

onde $\overline{u_z}$ e $\overline{u_1}$ são as velocidades do vento médio nas alturas z e z_1 e p é um expoente que está relacionado com a intensidade da turbulência (IRWIN, 1979).

As simulações foram realizadas sem considerar a deposição seca do poluente no solo. Para validar o modelo foram utilizados os dados observados no experimento de Copenhagen (GRYNING; LYCK, 2002) e uma análise estatística, descrita por HANNA (1989), foi realizada nos resultados obtidos.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Tabela 1 apresentamos os índices estatísticos da comparação dos dados observados no experimento de Copenhagen confrontado com os dados simulados no modelo para o perfil de vento potência e de similaridade e os diferentes coeficientes de difusão vertical. As comparações foram realizadas para os diferentes métodos de inversão numérica para a transformada de Laplace.

Tabela 1: Índices Estatísticos do modelo com diversas parametrizações para diferentes métodos de inversão numérica.

u	K_z	Inversão	Nmse	Cor	Fa2	Fb	Fs
Eq.(8)	Eq.(6)	Gauss Eq. (3)	0.07	0.883	1.000	0.044	0.064
		Fixed-Talbot Eq. (4)	0.06	0.889	1.000	0.022	0.062
		Fourier Eq. (5)	0.06	0.890	1.000	0.000	0.034
Eq.(9)	Eq.(6)	Gauss Eq. (3)	0.06	0.892	1.000	-0.040	0.000
		Fixed-Talbot Eq. (4)	0.06	0.896	0.957	-0.082	-0.017
		Fourier Eq. (5)	0.06	0.898	0.957	-0.078	-0.027
Eq.(8)	Eq.(7)	Gauss Eq. (3)	0.06	0.899	1.000	0.013	0.083
		Fixed-Talbot Eq. (4)	0.05	0.901	1.000	-0.005	0.091
		Fourier Eq. (5)	0.05	0.901	1.000	-0.023	0.061
Eq.(9)	Eq.(7)	Gauss Eq. (3)	0.05	0.911	1.000	-0.065	0.027
		Fixed-Talbot Eq. (4)	0.05	0.912	1.000	-0.081	0.032
		Fourier Eq. (5)	0.05	0.912	1.000	-0.097	0.006

Através da análise da Tabela 1 observamos que os três métodos de inversão apresentaram a mesma eficácia para o modelo e não há diferenças significativas nos resultados entre eles. Apenas ao simular o modelo utilizando um perfil potência para a velocidade do vento dado pela Eq. (9) e o coeficiente de difusão derivado por PLEIM; CHANG (1992) dado pela Eq. (6), o método da Quadratura Gaussiana apresentou uma pequena melhora nos resultados quando comparados com os demais métodos de inversão.

4. CONCLUSÕES

Resolvemos a equação de advecção-difusão através do método ADMM (MOREIRA et al., 2006) e utilizamos os métodos de inversão numérica da Quadratura Gaussiana, Fixed-Talbot e o método baseado na série de Fourier para a transformada de Laplace. Os dados simulados mostraram uma boa concordância entre as concentrações medidas e as concentrações preditas pelo modelo simulando satisfatoriamente as concentrações observadas. Os três métodos de inversão testados apresentaram bons resultados.

AGRADECIMENTOS: Os autores agradecem ao apoio financeiro recebido pela FAPERGS na realização deste trabalho.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABATE, J.; VAlKÓ, P. Multi-precision Laplace transform inversion. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.60, p.979-993, 2004.

CRUMP, K.S. Numerical Inversion of Laplace Transforms Using a Fourier Series Approximation. **J. ACM**, v.23, n.1, p.89-96, 1976.

DEGRAZIA, G.A.; RIZZA, U.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T. Validation of a New Turbulent Parameterization for Dispersion Models in Convective Conditions. **Boundary-Layer Meteorology***,* Netherlands, v.85, p.243-254, 1997.

GRYNING, S.E.; LYCK, E. The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements. **Riso National Laboratory**, 2002.

HANNA, S.R. Confidence limits for air quality models, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1385-1395, 1989.

IRWIN, J. S. A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability**. Atmospheric Environment**, v.13, n.1, p.191-194, 1979.

MOREIRA, D.M.; VILHENA, M.T.; TIRABASSI, T.; COSTA, C.P.; and BODMANN, B. Simulation of Pollutant Dispersion in the Atmosphere by the Laplace Transform: The ADMM Approach, **Water, Air, & Soil Pollution**, v.177, p.411-439, 2006.

PANOFSKY, A.H.; DUTTON, J.A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1984.

PLEIM, J.E.; CHANG, J.S. A Non-local Closure Model for Vertical Mixing in the Convective Boundary Layer, **Atmospheric Environment**, v.26A, n.6, p.965-981, 1992.

STROUD, A. H.; SECREST, D. **Gaussian Quadrature Formulas**. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1966.