

ADMM e MHM APLICADOS NA MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

PIERRE TEIXEIRA DA SILVA¹; LESLIE DARIEN PÉREZ FERNÁNDEZ²; JULIÁN BRAVO CASTILLERO³ ; CAMILA PINTO DA COSTA⁴

¹*Universidade Federal de Pelotas – pierre_pts@hotmail.com*

²*Universidade Federal de Pelotas – leslie.fernandez@ufpel.edu.br*

³*Universidade de Havana, Cuba – jbravo@matcom.uh.cu*

⁴*Universidade Federal de Pelotas – camiladacosta@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

Abordaremos dois métodos semianalíticos para a resolução da equação de advecção-difusão bidimensional, a qual se trata de um modelo matemático que descreve os níveis de concentração de poluentes existentes na atmosfera considerando uma Camada Limite Planetária (CLP) heterogênea. Os métodos abordados neste trabalho foram o Advection Diffusion Multilayer Method (ADMM-COSTA et al., 2006) e o Método de Homogeneização Matemática (MHM-BAKHLOV; PANASENKO, 1989).

2. METODOLOGIA

A concentração de poluentes pode ser estimada através da equação de advecção-difusão bidimensional, equação (1), sujeita as condições de contorno dadas pelas equações (2.a) e (2.b):

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

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0, h \quad (2.a) \qquad c(0, z) = \frac{Q}{u} \delta(z - H_s) \quad (2.b)$$

onde h é a altura da CLP, c é a concentração média, $u = u(z)$ é a velocidade média do vento na direção horizontal, $K_z = K_z(z)$ é o coeficiente de difusão vertical, H_s é a altura da fonte, Q é a taxa de emissão contínua da fonte e δ é a função Delta de Dirac.

Aplicação do ADMM: esse método discretiza a CLP em N subcamadas obtendo valores médios de K_z e u para cada subcamada, dados por:

$$K_{z_n} = \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} K_z(z) dz \quad (3)$$

$$u_n = \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} u(z) dz \quad (4)$$

para $n = 1, 2, \dots, N$. Assim a equação (1) é substituída por um sistema de N equações diferenciais parciais (EDPs) com coeficientes constantes em cada subcamada, sendo reescrita pela equação (5) sujeita às condições de contorno (6.a) e (6.b). A resolução do sistema é feita supondo contato perfeito entre as subcamadas e considerando as condições de continuidade para a concentração e fluxo nas interfaces, dadas por (7.a) e (7.b).

$$u_n \frac{\partial c_n}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{z_n} \frac{\partial c_n}{\partial z} \right) \quad (5)$$

$$K_{z_n} \frac{\partial c_n}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0, h \quad (6.a) \qquad c_n(0, z) = \frac{Q}{u_n} \delta(z - H_s) \quad (6.b)$$

$$c_n = c_{n+1} \quad (7.a) \qquad K_{z_n} \frac{\partial c_n}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \frac{\partial c_{n+1}}{\partial z} \quad (7.b)$$

para $z = z_n$ e $n = 1, 2, \dots, (N - 1)$, onde, n indica a enésima subcamada.

Para resolver o problema (5), aplicamos a Transformada de Laplace em x e resolvemos a equação diferencial resultante, cuja solução é dada pela equação (8). Para determinar as constantes A_n e B_n aplicamos as condições de contorno (6.a) e (6.b) e as $(2N - 2)$ condições de interface (7.a) e (7.b) obtendo um sistema linear de dimensão $2N$ que é resolvido por eliminação de Gauss.

$$\bar{c}_n(s, z) = A_n e^{R_n z} + B_n e^{-R_n z} + \frac{Q}{2R_n K_{z_n}} [e^{-R_n(z-H_s)} - e^{R_n(z-H_s)}] H(z - H_s) \quad (8)$$

onde $H(z - H_s)$ é a função de Heaviside e $R_n = \sqrt{\frac{u_n s}{K_{z_n}}}$.

Obtemos a concentração final de poluentes aplicando a transformada inversa de Laplace na equação (8) que é calculada numericamente pelo Algoritmo de Fixed Talbot proposto por ABATE; VALKÒ, (2004).

Abordagem ADMM-MHM: O MHM descreve, em um meio homogêneo equivalente, o comportamento de um modelo que ocorre inicialmente em um meio micro-heterogêneo. Tal comportamento é dado pelos coeficientes efetivos calculados a partir da discretização feita pelo ADMM, equações (9) e (10), por isso adotaremos a nomenclatura ADMM-MHM por ser uma combinação dos dois métodos.

$$\hat{K}_z = \left\langle K_z(z)^{-1} \right\rangle^{-1} = \frac{1}{\frac{\Delta z}{h} \sum_{n=1}^N \frac{1}{K_{z_n}}} \quad (9) \qquad \hat{u} = \left\langle u(z) \right\rangle = \frac{\Delta z}{h} \sum_{n=1}^N u_n \quad (10)$$

onde Δz é a altura de cada subcamada, h a altura da CLP e K_{z_n} e u_n calculados pelo ADMM. Dessa maneira, o problema inicial para a ED de coeficientes variáveis, equação (1) é aproximado por uma única ED com coeficientes constantes dado pela equação (11) e sujeita às condições de contorno dadas pelas equações (12) e (13):

$$\hat{u} \frac{\partial c_0}{\partial x} = \hat{K}_z \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \text{ para } x > 0 \text{ e } 0 < z < h \quad (11)$$

$$\hat{K}_z \frac{\partial c_0}{\partial z} = 0, \text{ em } z = 0 \text{ e } z = h \quad (12) \qquad c_0(0, z) = \frac{Q}{\hat{u}} \delta(z - H_s), \text{ em } x = 0. \quad (13)$$

Aplicamos a Transformada de Laplace em x e resolvemos a EDO resultante. Aplicando as condições de contorno determinamos as constantes de integração, obtendo assim a solução dada pela equação (15).

$$\bar{c}_0(s, z) = \frac{Q}{\hat{R} \hat{K}_z} \frac{\cosh(\hat{R}z)}{\sinh(\hat{R}z)} \cosh(\hat{R}(h - H_s)) + \frac{Q}{\hat{R} \hat{K}_z} \sinh(\hat{R}(h - H_s)) H(z - H_s) \quad (15)$$

onde $\hat{R} = \sqrt{\frac{\hat{u}_s}{\hat{K}_z}}$.

Aplicando a transformada inversa de Laplace na equação (15) obtemos a concentração final de poluentes. A transformada inversa é calculada numericamente pelo Algoritmo de Fixed Talbot.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Afim de fazermos uma análise de resultados, escolhemos algumas parametrizações para o coeficiente de difusão:

- PLEIM; CHANG (1992): $K_z = 0,4\omega_*z\left(1 - \frac{z}{h}\right)$ (15)

- DEGRAZIA et al. (1997): $K_z = \left(0,22h w_*^3 \sqrt[3]{\frac{z}{h}}\right) \left(\sqrt[3]{1 - \frac{z}{h}}\right) \left(1 - e^{-\frac{4z}{h}} - 0,0003e^{\frac{8z}{h}}\right)$ (16)

- ULKE(2000): $K_z = 0,4u_*z\left(1 - \frac{z}{h}\right)\left(\sqrt[4]{1 - \frac{22z}{L}}\right)$ (17)

Como parametrização para a velocidade média do vento utilizamos:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \frac{z}{z_0} - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad (18)$$

onde $\Psi_m(z/L) = -4.7z/L$ é a função de estabilidade, z é a altura, $k = 0.4$ é a constante de Von Kármán, L é o comprimento de Monin-Obukov, u_* é a velocidade de fricção, z_0 é o comprimento de rugosidade (PANOFSKY; DUTTON, 1988).

A comparação entre os resultados dos dois métodos aplicados é feita através de índices estatísticos (HANNA, 1989) apresentados na Tabela 1. Podemos observar que os dois métodos matemáticos apresentaram a mesma eficácia para o modelo e não há diferenças significativas nos resultados entre eles, pois os índices estatísticos estão próximos dos seus valores ideais.

Tabela 1: Índices Estatísticos

K_z	Método	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Eq.(15)	ADMM	0,06	0,889	1,000	0,022	0,062
	ADMM-MHM	0,12	0,851	0,957	0,173	0,141
Eq.(16)	ADMM	0,05	0,901	1,000	0,005	0,091
	ADMM-MHM	0,11	0,856	0,957	0,134	0,149
Eq.(17)	ADMM	0,06	0,892	0,957	-0,096	0,046
	ADMM-MHM	0,10	0,850	0,957	0,097	0,136
Valor ideal:		0	1	1	0	0

Na Figura 1, apresentamos os gráficos que expressam as concentrações de poluentes em função da distância da fonte no nível do solo para cada coeficiente de difusão utilizado.

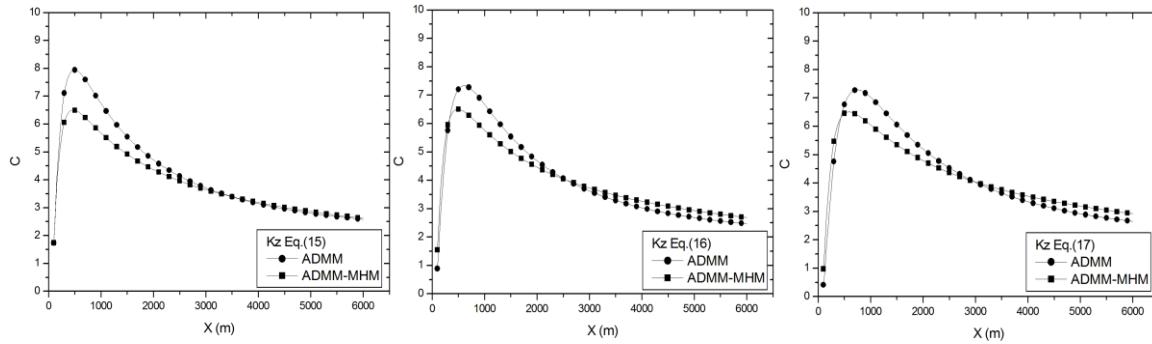


Figura 1: Concentração de poluente predita pelos métodos em função da distância da fonte no nível do solo para os coeficientes das equações (15), (16) e (17).

4. CONCLUSÕES

De acordo com a análise feita, podemos perceber que os dois métodos apresentam bons resultados, pois seus índices estatísticos se aproximam do valor ideal. Além disso, as curvas para cada K_z apresentam o mesmo comportamento em ambos os métodos. Porém, levando em consideração o tempo computacional gasto para simular o problema, concluímos que a abordagem ADMM-MHM é mais eficiente que a aplicação direta do ADMM. Pois o ADMM transforma o problema original que é uma ED de coeficientes variáveis em um sistema de N ED's de coeficientes constantes. Além disso, precisamos resolver um sistema de ordem $2N$ para encontrar as constantes de integração, o que acaba gerando um grande esforço computacional. Por outro lado, a abordagem ADMM-MHM supera isso, pois substitui o problema original por uma única ED com coeficientes constantes, os quais são calculados aplicando as condições de contorno, tornando o método mais rápido e com precisão na estimativa da solução do problema original, assim obtendo grande eficiência computacional.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABATE, J.; VALKÓ, P.P. Multi-precision Laplace transform inversion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v. 60, p. 979–993, 2004.
- BAKHVALOV, N. S.; PANASENKO, G. P. **Homogenisation: averaging processes in periodic media**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1989.
- COSTA, C. P.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, v. 40, p. 5659–5669, 2006.
- DEGRAZIA, G.; RIZZA, U.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T. Validation of a New Turbulent Parameterization for Dispersion Models in Convective Conditions. *Boundary-Layer Meteorology*, v.85, p.243–254, 1997.
- PANOFSKY, A.H., DUTTON, A.J. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1988.
- PLEIM, J.E.; CHANG, J.S. A Non-local Closure Model for Vertical Mixing in the Convective Boundary Layer, *Atmospheric Environment*, v.26A, p.965-981, 1992.
- ULKE, A.G., New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment*, v.34, p.1029-1042, 2000.