

# SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES CONSIDERANDO FORMULAÇÃO TEÓRICA PARA A VELOCIDADE DE DEPOSIÇÃO NO SOLO

KARINE RUI<sup>1</sup>; CAMILA PINTO DA COSTA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Pelotas, Licenciatura em Matemática – [karinerui@gmail.com](mailto:karinerui@gmail.com)

<sup>2</sup>Universidade Federal de Pelotas, DME – [camiladacosta@gmail.com](mailto:camiladacosta@gmail.com)

## 1. INTRODUÇÃO

Neste trabalho, apresentamos a resolução da equação bidimensional estacionária considerando uma formulação teórica para a velocidade de deposição no solo, que simula a dispersão de poluentes na atmosfera. A solução é obtida através do método ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*) (MOREIRA et al., 2006) e do algoritmo de *Talbot* (ABATE; VALKÓ, 2004). O principal objetivo é testar e avaliar o modelo bidimensional estacionário para condições estáveis, considerando a velocidade de deposição no solo, utilizando diferentes parametrizações da turbulência e o perfil do vento. Os resultados são comparados com o experimento de Hanford (DORAN; HORST, 1985) utilizando uma expressão para velocidade de deposição conforme sugerido por Arya (ARYA, 1999) na qual foi estimado por Hanna em 1982.

## 2. METODOLOGIA

A equação de difusão-advecção bidimensional estacionária, que modela a dispersão de poluentes na atmosfera pode ser escrita da seguinte forma:

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

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 às condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = V_d C \quad \text{em } z = 0 \quad (1a)$$

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = h \quad (1b)$$

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

onde  $V_d$  é a velocidade de deposição no solo,  $h$  é a altura da CLP,  $H_s$  é a altura da fonte,  $Q$  é a taxa de emissão contínua da fonte e  $\delta$  é a função delta de Dirac.

A solução do problema (1) é obtida pelo método ADMM (MOREIRA et al., 2006) que discretiza a altura  $h$  da CLP em  $N$  subcamadas obtendo valores médios para o coeficiente de difusão e a velocidade do vento em cada subcamada. Depois os  $N$  problemas obtidos são resolvidos aplicando a Transformada de Laplace, resultando na equação:

$$\overline{C}_n(x, z) = \left[ A_n e^{\left[ \left( \frac{u_n S}{\sqrt{K_{zn}}} \right) z \right]} + B_n e^{-\left[ \left( \frac{u_n S}{\sqrt{K_{zn}}} \right) z \right]} + \frac{Q}{2\sqrt{u_n K_{zn} S}} \left( e^{-\left[ \left( \frac{u_n S}{\sqrt{K_{zn}}} \right) (z - H_s) \right]} - e^{\left[ \left( \frac{u_n S}{\sqrt{K_{zn}}} \right) (z - H_s) \right]} \right) H(z - H_s) \right] \quad (3)$$

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

Por fim, a concentração de poluentes é obtida invertendo numericamente a equação (3) pelo Algoritmo de *Talbot* (ABATE; VALKÓ, 2004), que segundo a literatura este método fornece resultados com a precisão desejada. Sendo assim, obtemos a concentração final:

$$\bar{C}_n(x, z) = \frac{r}{M} \left[ \frac{1}{2} \bar{C}(r, z) e^{rx} + \sum_{k=1}^{M-1} \operatorname{Re} \left[ e^{xS(\theta_k)} \bar{C}(S(\theta_k), z) (1 + i\bar{\omega}(\theta_k)) \right] \right], \quad (4)$$

onde  $S(\theta_k) = r\theta(\cot \theta + i)$ ,  $\bar{\omega}(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot \theta_k - 1)\cot \theta_k$ ,  $\theta_k = \frac{k\pi}{M}$ ,  $-\pi < \theta < +\pi$ ,  $i \in C$ ,

$M$  representa o número de termos do somatório e  $r$  é um parâmetro experimental. Os melhores resultados foram obtidos com  $M = 100$  e  $r = (2 \cdot M)/(101 \cdot x)$ .

Foram realizadas simulações com três fórmulas diferentes para o coeficiente de difusão: fórmula de Businger e Arya (SEINFELD; PANDIS, 1997) Eq.(5), fórmula de Degrazia (DEGRAZIA et al., 2000) Eq.(6) e a fórmula de STEVEN et al. (1982) conforme (ESSA et al., 2007) Eq. (7). E para o perfil da velocidade média do vento foram utilizadas duas fórmulas: fórmula de Similaridade (PANOFSKY; DUTTON, 1988) descrita pela Eq.(8) e a fórmula dada pela Eq.(9) ESSA et al. (ESSA et al., 2007). Todas válidas para condições estáveis:

$$K_z = \frac{ku_*z}{0.74 + 4.7(z/L)} \exp\left(-\frac{8|f|z}{u_*}\right) \quad (5) \quad K_z = \frac{0.3(1-z/h)u_*z}{1 + 3.7z/[L(1-z/h)^{5/4}]} \quad (6) \quad K_z = K_0 + ku_*z \left(1 + \frac{5.2z}{L}\right)^{-1} \quad (7)$$

$$u = \frac{u_*}{k} \left[ \ln \frac{z}{z_0} - \Psi_m \left( \frac{z}{L} \right) \right] \quad (8) \quad u = \frac{u_*}{k} \left[ \ln \left( \frac{z+z_0}{z_0} \right) + \frac{5.2z}{L} \right] \quad (9)$$

onde  $z$  é a altura,  $f$  é o parâmetro de Coriolis,  $k=0.4$  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 e  $\Psi_m(z/L) = -4.7z/L$  é a função de estabilidade (PANOFSKY; DUTTON, 1988).

Para avaliar o modelo foram utilizados os dados observados no experimento de Hanford, porém a velocidade de deposição utilizada foi a sugerida por ARYA (1999):  $V_d = 0.01u$ .

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

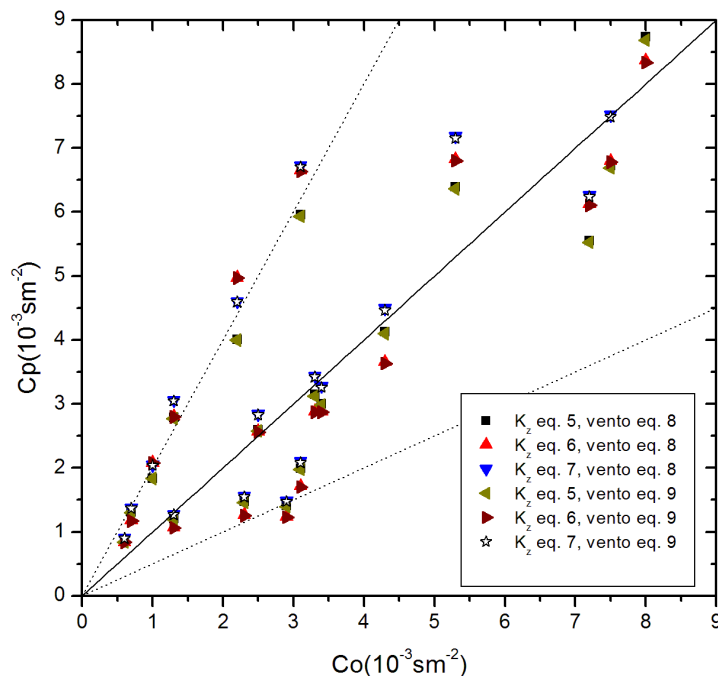
Na Tabela 1 apresentamos uma comparação estatística descrita por HANNA (1989) dos dados observados no experimento confrontado com os dados simulados no modelo para diferentes parametrizações da turbulência e perfil do vento conforme descrito acima. Analisando a Tabela 1 observamos que considerando as parametrizações apresentadas obtemos uma boa concordância entre as concentrações medidas e as concentrações geradas simulando satisfatoriamente as concentrações observadas.

**Tabela 1:** Índices Estatísticos dos resultados do modelo com diversas parametrizações.

$u$	$K_z$	Nmse	Cor	Fa2	Fb	Fs
Eq.(8)	Eq.(5)	0.12	0.87	0.89	-0.05	0.01
Eq.(8)	Eq.(6)	0.16	0.82	0.77	-0.06	-0.05
Eq.(8)	Eq.(7)	0.15	0.86	0.78	-0.15	-0.12
Eq.(9)	Eq.(5)	0.12	0.87	0.89	-0.05	0.01
Eq.(9)	Eq.(6)	0.16	0.82	0.72	-0.06	-0.05
Eq.(9)	Eq.(7)	0.15	0.86	0.78	-0.15	-0.12

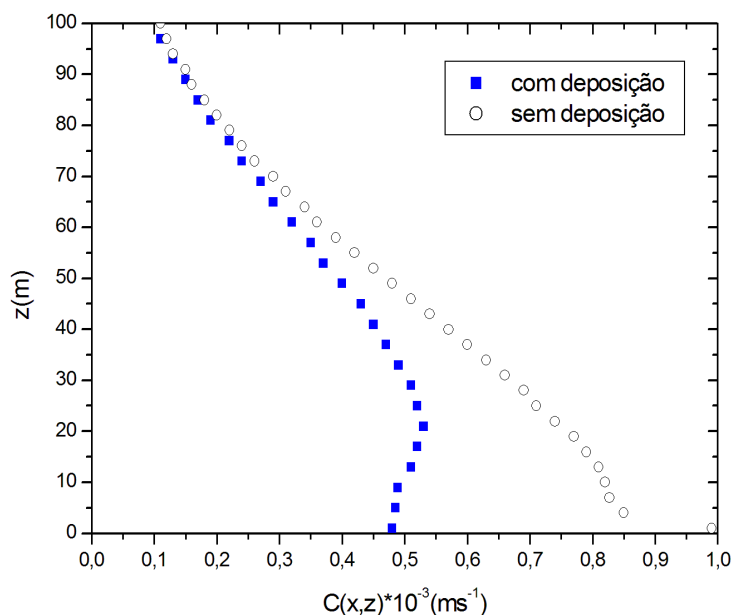
Os melhores resultados são obtidos quando consideramos no modelo a Eq.(5) para o coeficiente de difusão independente do perfil do vento aqui citados.

Na Figura 1 é apresentado o gráfico de espalhamento entre as concentrações observadas para ZnS no experimento de Hanford e as previstas pelo modelo.



**Figura 1:** Gráfico de espalhamento entre as concentrações observadas ( $C_o$ ) e previstas ( $C_p$ ) pelo modelo.

A Figura 2 mostra o perfil vertical de concentração com e sem deposição a 3200m da fonte. A diferença nas concentrações é devido à condição de contorno (1a). Observamos que quando um poluente tem velocidade de deposição ele perde substâncias implicando na redução da concentração, enquanto um poluente que não deposita é refletido de volta para a atmosfera.



**Figura 2:** Variação do perfil vertical de concentração com deposição teórica e sem deposição.

#### 4. CONCLUSÕES

Neste trabalho apresentamos a resolução da equação bidimensional estacionária, considerando a velocidade de deposição no solo, através do método ADMM (MOREIRA et al., 2006). Utilizamos um modelo de inversão que fornece resultados com precisão de até  $M$  dígitos significativos (ABATE; VALKÓ, 2004). Também foram testadas diferentes parametrizações para o perfil de velocidade do vento e do coeficiente de difusão no caso estável. Para a velocidade de deposição foi utilizada uma expressão encontrada na literatura (ARYA, 1999). Uma boa concordância entre as concentrações observadas e previstas pelo modelo foi obtida. Os melhores resultados foram obtidos quando consideramos no modelo a Eq.(5) para o coeficiente de difusão independente do perfil do vento empregado.

O fato de considerar a condição de contorno (1a), que leva em consideração a velocidade de deposição do poluente emitido pela fonte, faz com que a concentração tenha um decaimento mais rápido.

#### 5. AGRADECIMENTOS

As autoras agradecem ao Programa de Bolsas de Iniciação à Pesquisa (PBIP) da UFPel pelo suporte financeiro na realização deste trabalho.

#### 6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABATE, J. and VALKÓ, P. Multi-precision Laplace transform inversion. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 60, p. 979–993, 2004.
- ARYA, S.P. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. New York: Oxford University Press, 1999. 310p.
- DEGRAZIA, G.A., ANFOSSI, D., CARVALHO, J.C., MANGIA, C. TIRABASSI, T., CAMPOS VELHO, H. F. Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v. 34, p. 3575-3583, 2000.
- DORAN, J.C., HORST, T.W. An evaluation of Gaussian plume-depletion models with dual-tracer field measurements. **Atmospheric Environment**, v. 19, p. 939-951, 1985.
- ESSA, K.S.M., ETMAN, S.M., EMBABY, M. New analytical solution of the dispersion equation. **Atmospheric Research**, v. 84, n.4, p. 337-344, 2007.
- 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.
- 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, A.J. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1988.
- SEINFELD, J.H., PANDIS, S.N. **Atmospheric Chemistry and Physics**. New York: John Wiley & Sons, 1997.