

Simulação da dispersão de poluentes com reações químicas na atmosfera pela técnica da transformada integral

Aline Baraldi¹, Heloísa Campos¹, Régis S. de Quadros²,
Daniela Buske³

¹*Engenharia Química/UFRGS - Porto Alegre, RS, Brasil*

²*Center of Smart Interfaces, CSI/TU - Darmstadt, Alemanha*

³*UFPEL/ IFM/DME - Pelotas, RS- Brasil*

e-mail: danielabuske@gmail.com

Resumo

Neste trabalho é apresentada uma nova solução da equação de advecção-difusão-reação unidimensional transiente usando o método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). A ideia básica consiste em modelar as reações químicas considerando estas como um termo de fonte na equação de advecção-difusão. Cabe salientar que a solução apresentada é analítica.

1. Introdução

O estudo da dispersão atmosférica de contaminantes é muito complexo devido à grande quantidade de efeitos fenomenológicos envolvidos tais como: reações químicas, efeito radioativo devido à presença de radionuclídeos emitidos por instalações nucleares, efeitos meteorológicos, condensação/evaporação e deposição seca e úmida, ou ainda, devido à complexidade da topografia e uso do solo e as diversas escalas envolvidas no estudo da dispersão atmosférica de poluentes (Jacobson, 1999).

A emissão de certos gases na atmosfera resulta em reações químicas que ocasionam uma mudança do clima e conseqüentemente possíveis prejuízos à vida na terra. O uso de modelos matemáticos, que incluem informações sobre o transporte turbulento de poluentes, efeitos das condições meteorológicas, processos de remoção e reações químicas na atmosfera, tem se constituído numa ferramenta capaz de viabilizar a elaboração de um planejamento de controle ambiental eficaz, a fim de evitar os episódios de poluição, através da detecção antecipada dos efeitos das condições meteorológicas sobre a dispersão de poluentes na atmosfera.

Na última década surgiu na literatura uma solução analítica para a equação de advecção-difusão sem nenhuma restrição aos coeficientes de difusão e perfis de vento variáveis com a altura. Esta solução foi obti-

da utilizando o método GILTT (Wortman et al., 2005; Buske et al., 2007, Buske, 2008, Moreira et al., 2009). Para a solução de problemas diferenciais parciais, esta técnica de transformação integral 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. Este procedimento resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias, que, uma vez solucionado, é facilmente invertido para a obtenção do resultado da equação original. A solução do sistema EDO resultante da aplicação da GILTT é feita analiticamente via Transformada de Laplace e diagonalização.

2. O modelo

O objetivo do presente trabalho é estudar a modelagem da dispersão de poluentes incluindo reações químicas. Para tanto, será utilizada a equação de advecção-difusão unidimensional transiente, considerando as reações químicas como termo de fonte:

$$\frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \right) - k_r c(z,t) + J(t) \quad (1)$$

para $0 < z < h$ e $x > 0$, com condições de contorno de fluxo zero no solo ($z=0$) e no topo da Camada Limite Atmosférica (CLA) ($z=h$), e uma fonte de emissão contínua Q na altura de fonte H_s :

$$K_z \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0, h \quad (1a)$$

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

Onde $c(z,t)$ representa a concentração de poluente, h é a altura da CLA, K_z é o coeficiente de difusão variável com a altura, k_r é a taxa de decaimento de primeira ordem e J é a taxa de produção de ordem zero. Neste trabalho será considerado o caso em que K_r é uma constante e $J(t) = J_0 e^{-\alpha t}$ onde α é a taxa de decaimento

A solução do problema considerado é encontrada considerando-se a soma das soluções particular e homogênea, ou seja, $C(z,t) = C_h + C_p$, onde:

$$c(z,t) = \sum_{i=0}^N \bar{c}_i(t) \Psi_i(z) + \frac{J_0}{K_r - \alpha} e^{-\alpha t} \quad (2)$$

onde $\Psi_i(z)$ é a autofunção associada ao problema de Sturm-Liouville e $\bar{c}_n(t)$ resulta da solução do sistema de equações diferenciais ordinárias. A solução obtida é exata exceto pelo erro de truncamento (Buske, 2008, Moreira et al., 2009).

3. Resultados numéricos e conclusões

Para uma avaliação inicial do modelo os dados micrometeorológicos do experimento 8 de Copenhagen foram utilizados. O coeficiente de difusão utilizado é proveniente do espectro da turbulência (Degrazia et al., 1997):

$$\frac{K_z}{w_* h} = 0.22 \left(\frac{z}{h}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1/3} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right] \quad (3)$$

onde w_* é a escala de velocidade convectiva.

Apresenta-se na figura abaixo um gráfico adimensional da concentração de poluente versus o tempo. De forma ilustrativa consideramos a taxa de produção de ordem zero nula e a taxa de decaimento de ordem zero do elemento radioativo tritium (^3H).

Lembrando que este é um estudo preliminar, o nosso próximo passo será testar o modelo considerando outras expressões para os termos de reação química, bem como comparar os resultados com dados disponíveis na literatura.

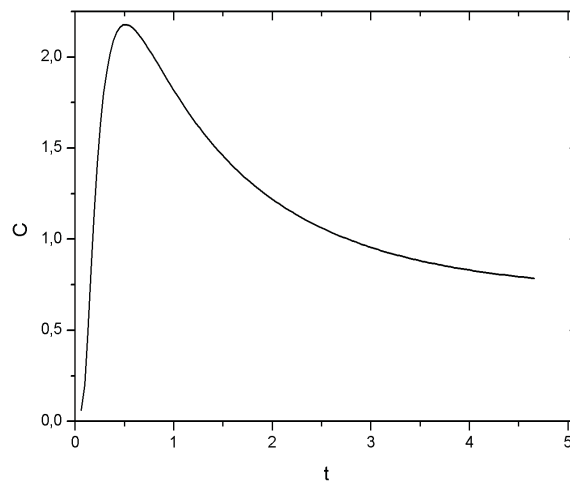


Figura 1. Gráfico adimensional da concentração de poluente versus tempo considerando o elemento radioativo tritium.

Referências bibliográficas

- Buske, D., Vilhena, M.T., Moreira, D.M. and Tirabassi, T., 2007. Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective Planetary Boundary Layer. **Atmospheric Environment** 41, 5496-5501.
- Buske, D., 2008. Solução GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana: Simulação da Dispersão de Poluentes na Atmosfera, Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.
- Degrazia, G.A., Campos Velho, H.F. and Carvalho, J.C., 1997. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contr. Atmospheric Physics**, 57-64.
- Jacobson, M.Z., *Fundamentals of Atmospheric Modeling*, Cambridge University Press, 1999.
- Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D. and Tirabassi, T., 2009. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research** 92, 1-17.