

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO MULTIDIMENSIONAL UTILIZANDO SIMETRIAS DE LIE: SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Jorge Rodolfo Zabadal

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,

Departamento de Engenharia Nuclear, Av. Osvaldo Aranha 99, 4º andar, 90046-900 Porto Alegre, RS, Brazil

E-mail: jorge.zabadal@ufrgs.br

Cristiana Andrade Poffal

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC)

Rua Sarmento Leite 425, 90046-900 Porto Alegre, RS, Brazil

Email: poffal@cpovo.net

Resumo. Vários métodos analíticos e numéricos são utilizados na solução de problemas de difusão e de difusão-advecção. Neste trabalho apresenta-se uma solução analítica para a equação advectivo-difusiva multidimensional em coordenadas cartesianas obtida através da aplicação de regras, baseadas em simetrias de Lie, para manipulação da exponencial dos operadores diferenciais presente na solução formal. A aplicação dessas regras tem se mostrado eficiente na solução de problemas em mecânica quântica, mecânica dos fluidos e na simulação da dispersão de poluentes em meio aquático. Diversas vantagens da aplicação dessas regras podem ser citadas, entre as quais estão o aumento a velocidade de processamento, permitindo a obtenção de soluções analíticas em tempo real; a redução da quantidade de memória requerida na realização das tarefas necessárias para obtenção da solução exata e a não-necessidade de discretização do domínio a ser considerado. O método foi utilizado para simular a dispersão de contaminantes na atmosfera.

Palavras chave: equação de difusão, dispersão de poluentes, simetrias de Lie

1. Introdução

Nas últimas décadas, o interesse no estudo de dispersão de contaminantes tem aumentado consideravelmente em consequência dos problemas ambientais causados pelo desenvolvimento industrial e tecnológico.

Vários métodos analíticos, numéricos e híbridos são utilizados na solução de problemas de difusão e de difusão-advecção (Zwillinger, 1997).

Ainda não é conhecida uma solução exata e abrangente para o caso mais geral da equação advectivo-difusiva multidimensional em coordenadas cartesianas:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + S \quad (1)$$

onde c é a concentração de contaminante, t é o tempo decorrido desde a emissão do contaminante, K_x , K_y e K_z correspondem aos coeficientes de difusão longitudinal, lateral e vertical, respectivamente, u , v e w são as componentes do vento médio nas direções x , y e z , respectivamente, S é o termo de fonte.

Em 1980, Nieuwstadt apresentou uma solução para o problema unidimensional transiente com velocidade u constante e coeficiente de dispersão K_z como função da altura e da velocidade de fricção u_* , utilizando polinômios de Legendre. Koch, 1989, chegou a uma solução analítica para o problema bidimensional para uma fonte ao nível do solo onde o vento e as difusividades seguiam perfis de potência, incluindo efeitos de absorção do contaminante pelo solo. Moura et al, em 1995, propôs uma solução analítica para a dispersão vertical turbulenta de contaminantes passivos em uma camada limite estável com aplicação da transformada de Laplace, utilizando o coeficiente de dispersão como função da altura da camada limite estável proposto por Degrazia e Moraes em 1992. Pires, em 1996, obteve uma solução similar a de Moura (1995) em uma camada limite convectiva. Utilizando o mesmo método, Moreira, em 1996, propôs uma solução para o problema de dispersão bidimensional estacionário em uma camada limite convectiva. Chrysikopoulos et al, em 1992, obteve a primeira solução tridimensional que se tem conhecimento. Essa solução para condições atmosféricas neutras ou estáveis foi desenvolvida para uma fonte área contínua ao nível do solo, para velocidade do vento e difusividades do tipo funções de potência da altura. Em 1999, Moura obteve soluções analíticas para a equação estacionária bidimensional e tridimensional através do uso da transformada integral generalizada. Essas soluções são válidas para situações em que o contaminante está sujeito à turbulência homogênea e quando os valores médios das componentes da velocidade do vento são uniformes. Moreira, em 2000, apresentou um modelo analítico de dispersão baseado na discretização da camada limite planetária em subcamadas, onde a equação advectivo-difusiva é resolvida através da aplicação da transformada de Laplace considerando um valor médio para o coeficiente de difusão vertical e para a velocidade do vento.

Neste trabalho, apresenta-se um método analítico para determinação de solução para a equação advectivo-difusiva em coordenadas cartesianas que consiste na aplicação de regras baseadas em simetrias de Lie para a manipulação da exponencial dos operadores diferenciais presente na solução formal (Dattoli et al, 1998). Como o intuito de mostrar a eficiência do método, simula-se um cenário unidimensional de dispersão de poluentes em uma camada limite estável utilizando o coeficiente de dispersão como função da altura da camada limite estável proposto por Degrazia e Moraes em 1992.

A utilização de regras para a manipulação de exponenciais de operadores diferenciais tem o intuito de viabilizar a obtenção de soluções exatas em microcomputadores de pequeno porte, reduzindo a quantidade de memória requerida na realização das tarefas necessárias para obtenção da solução analítica, aumentando a velocidade de processamento, permitindo, dessa forma, a determinação da solução em tempo real. A aplicação dessas regras tem se mostrado eficiente na solução de problemas em mecânica quântica, mecânica dos fluidos, e na simulação de dispersão de poluentes em meio aquático. (Zabadal et al, 2001)

O trabalho proposto está dividido em quatro seções. Na seção 2, apresentam-se as regras de manipulação da exponencial de operadores diferenciais de primeira e segunda ordem baseadas em simetrias de Lie. Na seção 3, mostra-se o processo de obtenção da solução analítica geral da equação advectivo-difusiva tridimensional em coordenadas cartesianas através da aplicação das regras apresentadas na seção 2. Finalmente, na seção 4, mostram-se os resultados numéricos obtidos e resumam-se as conclusões decorrentes do emprego desse método.

2. Regras de manipulação de exponencial de operadores diferenciais

Nesta seção desenvolvem-se as regras para manipulação de exponenciais de operadores diferenciais baseadas em simetrias de Lie que foram aplicadas na solução da equação diferencial que descreve o problema abordado nesse trabalho.

2.1. Regra para a exponencial de um operador diferencial de primeira ordem

Considera-se uma equação diferencial de primeira ordem do tipo:

$$\frac{dF}{dt} = AF \quad (2)$$

cuja solução formal é dada por:

$$F(t) = e^{\int_0^t A ds} F_0, \quad (3)$$

onde F_0 denota a condição inicial (Zill, 2001).

Se A for um operador diferencial, isto é, por exemplo, se $A = -u \frac{\partial}{\partial x}$, tem-se:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -u \frac{\partial F}{\partial x}, \quad (4)$$

então, a partir da solução formal dada pela Eq. (3), obtém-se:

$$F(x, t) = \left[e^{-\int_0^t u \frac{\partial}{\partial x} ds} \right] F_0(x). \quad (5)$$

Se u for considerado constante, a Eq. (5) pode ser reescrita como:

$$F(x, t) = \left[e^{-ut \frac{\partial}{\partial x}} \right] F_0(x). \quad (6)$$

Aplica-se o operador $e^{-ut \frac{\partial}{\partial x}}$ sobre a função $F_0(x)$ utilizando a série de Taylor para a função exponencial, isto é:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^k}{k!}. \quad (7)$$

Assim, obtém-se

$$e^{-ut \frac{\partial}{\partial x}} = I - ut \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2!} \left(ut \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{3!} \left(ut \frac{\partial}{\partial x} \right)^3 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(ut \frac{\partial}{\partial x} \right)^k. \quad (8)$$

Ou seja,

$$e^{-ut \frac{\partial}{\partial x}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(ut \frac{\partial}{\partial x} \right)^k. \quad (9)$$

Aplicando Eq. (9) em Eq. (6), tem-se

$$F(x, t) = \left[e^{-ut \frac{\partial}{\partial x}} \right] F_0(x) = F_0(x) - ut \frac{\partial}{\partial x} F_0(x) + \frac{1}{2!} \left(ut \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 F_0(x) - \frac{1}{3!} \left(ut \frac{\partial}{\partial x} \right)^3 F_0(x) + \dots. \quad (10)$$

que pode ser reescrita como

$$F(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \left(ut \frac{\partial}{\partial x} \right)^k F_0(x). \quad (11)$$

Isto é,

$$F(x, t) = F_0(x) - ut \frac{\partial F_0}{\partial x} \Big|_x + \frac{(ut)^2}{2!} \frac{\partial^2 F_0}{\partial x^2} \Big|_x - \frac{(ut)^3}{3!} \frac{\partial^3 F_0}{\partial x^3} \Big|_x + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} (ut)^k \frac{\partial^k F_0}{\partial x^k} \Big|_x. \quad (12)$$

Sabe-se que

$$F_0(x + \Delta x) = F_0(x) + \Delta x \frac{\partial F_0}{\partial x} \Big|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 F_0}{\partial x^2} \Big|_x + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 F_0}{\partial x^3} \Big|_x + \dots + \frac{(\Delta x)^k}{k!} \frac{\partial^k F_0}{\partial x^k} \Big|_x, \quad (13)$$

se $\Delta x = -ut$ em Eq. (13), a comparação de Eq. (12) e Eq. (13) leva a

$$F(x, t) = F_0(x - ut). \quad (14)$$

Assim, obtém-se a regra para a exponencial de um operador diferencial de primeira ordem com coeficientes constantes (Dattoli et al, 1998):

$$\left[e^{c \frac{\partial}{\partial x}} \right] F(x) = F(x + c). \quad (15)$$

2.2. Regra para a exponencial de um operador diferencial de segunda ordem

Considera-se uma equação diferencial de segunda ordem do tipo:

$$\frac{\partial F}{\partial t} = k \frac{\partial^2 F}{\partial x^2}, \quad (16)$$

cujas solução formal é dada por

$$F(x,t) = \left[e^{k \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \right] F(x,0). \quad (17)$$

Nesse caso, na prática, não é possível utilizar a série de Taylor para calcular $F(x,t)$ e obter uma propriedade análoga à deduzida para o operador diferencial de primeira ordem.

Para o desenvolvimento da regra para a manipulação da exponencial de um operador diferencial de segunda ordem, considera-se o seguinte problema difusivo em meio infinito:

$$\begin{cases} \frac{\partial F}{\partial t} = k \frac{\partial^2 F}{\partial x^2}, -\infty < x < \infty, t > 0 \\ F(x,0) = f_0(x) \end{cases}. \quad (18)$$

Aplica-se a transformada de Fourier na Eq. (18) na variável x e se obtém um novo problema (Reichl, 1980):

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{F}(\omega,t)}{\partial t} = -k\omega^2 \bar{F}(\omega,t) \\ \bar{F}(\omega,0) = \bar{f}(\omega) \end{cases}, \quad (19)$$

onde $\bar{F}(\omega,t)$ corresponde à transformada de Fourier da função $F(x,t)$, ou seja, $\bar{F}(\omega,t) = \mathfrak{F}\{F(x,t)\}$; as transformadas de Fourier de $\frac{\partial^2}{\partial x^2} F(x,t)$ e $f_0(x)$ são dadas por $\mathfrak{F}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2} F(x,t)\right\} = -\omega^2 \bar{F}(\omega,t)$ e $\mathfrak{F}\{f_0(x)\} = \bar{f}(\omega)$, respectivamente.

Resolvendo o problema descrito pela Eq. (19), tem-se

$$\bar{F}(\omega,t) = e^{-k\omega^2 t} \bar{f}(\omega). \quad (20)$$

A transformada inversa de Fourier leva a

$$F(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} e^{-k\omega^2 t} \bar{f}(\omega) d\omega. \quad (21)$$

Como $\mathfrak{F}^{-1}\left\{e^{-k\omega^2 t}\right\} = \frac{1}{\sqrt{2kt}} e^{-\frac{x^2}{4kt}}$, pode-se utilizar o teorema da convolução e escrever

$$F(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{\sqrt{2kt}} e^{-\frac{x^2}{4kt}} * f_0(x) \right], \quad (22)$$

onde o símbolo $*$ representa o operador de convolução.

Então, chega-se a:

$$F(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{4kt}} f_0(x-u) du, \quad (23)$$

onde $f_0(x)$ representa a condição inicial do problema. Essa é a solução para o problema descrito pela Eq. (18).

Finalmente, escreve-se a regra para a exponencial de um operador diferencial de segunda ordem com coeficientes constantes:

$$\left[e^{k \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \right] f_0(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{u^2}{4kt}} f_0(x-u) du. \quad (24)$$

2.3. Regra para a exponencial de operadores diferenciais de primeira e segunda ordem com coeficientes variáveis

As regras apresentadas nas subseções anteriores não podem ser aplicadas quando os coeficientes dos operadores diferenciais presentes na exponencial são variáveis. Em virtude disso, utilizam-se simetrias de Lie na equação original de modo a obter uma nova equação diferencial com coeficientes constantes que permite a aplicação das regras apresentadas. As simetrias de Lie consistem em mudanças de variáveis que ao serem aplicadas a uma equação diferencial preservam sua forma de modo que as soluções da equação obtida são também soluções da equação original.

Para obtenção de regras para o caso de coeficientes variáveis, considere o seguinte problema:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial f}{\partial z} \right), \quad (25)$$

$$f_0(z) = Q\delta(z - h_f). \quad (26)$$

A Eq. (25) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial f}{\partial z} + K_z \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}. \quad (27)$$

Para que as regras possam ser aplicadas, realiza-se uma mudança de variáveis sobre a Eq. (27) com o objetivo de obter uma nova equação diferencial parcial onde coeficientes dos operadores diferenciais são constantes, isto é, escreve-se

$$\frac{\partial f(h, g, t)}{\partial t} = \frac{\partial f(h, g, t)}{\partial g} + \frac{\partial^2 f(h, g, t)}{\partial h^2} \quad (28)$$

cuja solução formal é:

$$f(h, g, t) = \left[e^{t \frac{\partial}{\partial g} + \frac{\partial^2}{\partial h^2}} \right] f(h, g, 0) \quad (29)$$

onde as variáveis h e g , obtidas através da regra da cadeia, são representadas por

$$h = \int \frac{1}{\sqrt{K_z}} dz \quad (30)$$

e

$$g = 2 \int \left(\frac{1}{\frac{dK_z}{dz}} \right) dz. \quad (31)$$

A obtenção da Eq. (28) em termos de g e h é mostrada na subseção 2.4.

Aplicando a regra de manipulação para a exponencial de um operador diferencial de segunda ordem, dado pela Eq. (24), na variável h da Eq. (29), tem-se

$$f(h, g, t) = \left[e^{t \frac{\partial}{\partial g}} \right] \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\phi^2}{4t}} f(h - \phi, 0) d\phi \quad (32)$$

A condição inicial dada pela Eq. (26) pode ser escrita em termos de h , ou seja,

$$f_0(h) = f_0(z(h)) = Q\delta(z(h) - h_f), \quad (33)$$

onde $z(h)$ corresponde à inversa de $h(z)$.

Assim, a Eq. (32) pode ser reescrita como

$$f(h, g, t) = \left[e^{t \frac{\partial}{\partial g}} \right] \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\phi^2}{4t}} \delta(z(h-\phi) - h_f) d\phi \quad (34)$$

e a integral na Eq. (34) é dada por: (Azambuja, 1964)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\phi^2}{4t}} \delta(z(h-\phi) - h_f) d\phi = \frac{e^{-\frac{\phi_1^2(h)}{4t}}}{|p'(\phi_1(h))|} + \frac{e^{-\frac{\phi_2^2(h)}{4t}}}{|p'(\phi_2(h))|}, \quad (35)$$

onde $p(\phi) = z(h-\phi) - h_f$ e $\phi_1(h)$ e $\phi_2(h)$ corresponde aos zeros de $p(\phi)$.

Portanto, a Eq. (34) é expressa como

$$f(h, g, t) = \left[e^{t \frac{\partial}{\partial g}} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \left(\frac{e^{-\frac{\phi_1^2(h)}{4t}}}{|p'(\phi_1)|} + \frac{e^{-\frac{\phi_2^2(h)}{4t}}}{|p'(\phi_2)|} \right) \right], \quad (36)$$

uma vez que h pode ser escrito indiretamente em termos de g , obtém-se

$$f(h, g, t) = \left[e^{t \frac{\partial}{\partial g}} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \left(\frac{e^{-\frac{\phi_1^2(h(z(g)))}}{4t}}}{|p'(\phi_1(h(z(g))))|} + \frac{e^{-\frac{\phi_2^2(h(z(g)))}}{4t}}}{|p'(\phi_2(h(z(g))))|} \right) \right]. \quad (37)$$

Aplicando a regra para a exponencial do operador diferencial de primeira ordem dada pela Eq. (15) na variável g , obtém-se

$$f(h, g, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \left[\frac{e^{-\frac{\phi_1^2(h(z(g-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_1(h(z(g-t))))|} + \frac{e^{-\frac{\phi_2^2(h(z(g-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_2(h(z(g-t))))|} \right] \quad (38)$$

Como g pode ser reescrito em função de z , a solução da Eq. (25) pode ser expressa em termos das variáveis z e t , isto é:

$$f(z, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \left[\frac{e^{-\frac{\phi_1^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_1(h(z(g(z)-t))))|} + \frac{e^{-\frac{\phi_2^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_2(h(z(g(z)-t))))|} \right] \quad (39)$$

portanto:

$$f(z, t) = \left[e^{\frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial c}{\partial z} + K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}} \right] f(z, 0) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \left[\frac{e^{-\frac{\phi_1^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_1(h(z(g(z)-t))))|} + \frac{e^{-\frac{\phi_2^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_2(h(z(g(z)-t))))|} \right] \quad (40)$$

2.4. Obtenção dos coeficientes h e g

Nesta subseção é mostrado o processo de obtenção da equação diferencial parcial com coeficientes constantes Eq.(28) e das funções h e g representadas pela Eq. (30) e pela Eq. (31), respectivamente.

Primeiramente, escreve-se

$$K_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial^2}{\partial h^2} + \frac{\partial}{\partial g}, \quad (41)$$

utilizando a regra da cadeia, tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial h} = \frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)} \frac{\partial}{\partial z} \quad (42)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial g} = \frac{1}{\left(\frac{\partial g}{\partial z} \right)} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (43)$$

Derivando Eq. (42), obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{\partial}{\partial h} \right) = \frac{\partial}{\partial h} \left[\frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)} \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (44)$$

isto é,

$$\frac{\partial^2}{\partial h^2} = - \frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^3} \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (45)$$

Substituindo Eq. (43) e Eq. (45) em Eq. (41), chega-se a

$$K_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left\{ \frac{1}{\left(\frac{\partial g}{\partial z} \right)} - \frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^3} \frac{\partial^2 h}{\partial z^2} \right\} \frac{\partial}{\partial z}, \quad (46)$$

onde os coeficientes dos operadores diferenciais de primeira e segunda ordem podem ser igualados em ambos lados da Eq. (46) de modo que:

$$K_z = \frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^2} \quad (47)$$

e

$$\frac{\partial K_z}{\partial z} = \frac{1}{\left(\frac{\partial g}{\partial z} \right)} - \frac{1}{\left(\frac{\partial h}{\partial z} \right)^3} \frac{\partial^2 h}{\partial z^2}. \quad (48)$$

Portanto,

$$h = \int \frac{1}{\sqrt{K_z}} dz \quad (49)$$

e

$$g = 2 \int \frac{1}{\left(\frac{dK_z}{dz}\right)} dz. \quad (50)$$

3. Solução da equação advectivo-difusiva tridimensional em coordenadas cartesianas

O problema de dispersão de contaminantes na atmosfera pode ser descrito matematicamente pela equação de dispersão em regime transiente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) \quad (51)$$

sujeita à condição inicial

$$c(x, y, z, 0) = c_0(x, y, z) = Q r(x, y) \delta(z - h_f), \quad (52)$$

onde c é a concentração de contaminante, t é o tempo decorrido desde a emissão do contaminante, K_x , K_y e K_z correspondem aos coeficientes de difusão longitudinal, lateral e vertical, respectivamente, u , v e w são os valores médios das componentes da velocidade do vento nas direções x , y e z , respectivamente, Q é a intensidade da fonte área, h_f é a altura da fonte área.

Os coeficientes K_x e K_y bem como a componente da velocidade do vento na direção x , suposta preponderante, são considerados constantes. Dessa forma, a Eq. (51) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + K_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}. \quad (53)$$

A solução formal da Eq. (53) é

$$c(x, y, z, t) = \left[e^{-tu \frac{\partial}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z}\right) \frac{\partial}{\partial z}} \right] c(x, y, z, 0), \quad (54)$$

ou, na forma fatorada:

$$c(x, y, z, t) = \left[e^{-tu \frac{\partial}{\partial x}} \right] \left[e^{K_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \right] \left[e^{K_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}} \right] \left[e^{K_z \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z}\right) \frac{\partial}{\partial z}} \right] c(x, y, z, 0). \quad (55)$$

Para obter a solução da Eq. (53), aplicam-se as regras para manipulação da exponencial dos operadores diferenciais apresentadas na seção anterior. Primeiramente, aplica-se a regra dada pela Eq. (40) sobre a variável z na Eq. (55):

$$c(x, y, z, t) = \left[e^{-tu \frac{\partial}{\partial x}} \right] \left[e^{K_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \right] \left[e^{K_y \frac{\partial^2}{\partial y^2}} \right] \left[\frac{Q r(x, y)}{\sqrt{4\pi t}} \left(\frac{e^{\frac{\phi_1^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_1(h(z(g(z)-t))))|} + \frac{e^{\frac{\phi_2^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_2(h(z(g(z)-t))))|} \right) \right]. \quad (56)$$

Aplicando a regra para a manipulação da exponencial de um operador diferencial de segunda ordem com coeficientes constantes dada pela Eq. (24) sobre a variável y na Eq. (56):

$$c(x, y, z, t) = \left[e^{-tu \frac{\partial}{\partial x}} \right] \left[e^{K_x \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Q e^{-\frac{\beta^2}{4tK_y}} r(x, y - \beta)}{\sqrt{4\pi t}} \left(\frac{e^{\frac{\phi_1^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_1(h(z(g(z)-t))))|} + \frac{e^{\frac{\phi_2^2(h(z(g(z)-t)))}}{4t}}}{|p'(\phi_2(h(z(g(z)-t))))|} \right) d\beta. \quad (57)$$

Considerando

$$A(z) = \frac{e^{-\frac{\phi_1^2(h(z(g(z)-t)))}{4t}}}{|p'(\phi_1(h(z(g(z)-t)))|} + \frac{e^{-\frac{\phi_2^2(h(z(g(z)-t)))}{4t}}}{|p'(\phi_2(h(z(g(z)-t)))|}, \quad (58)$$

e aplicando a regra para a manipulação da exponencial de um operador diferencial de segunda ordem com coeficientes constantes dada pela Eq. (24) sobre a variável x em Eq. (57), tem-se

$$c(x, y, z, t) = \left[e^{-ut \frac{\partial}{\partial x}} \right] \frac{A(z)}{\sqrt{4\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Q e^{-\frac{\gamma^2}{4tK_x}} e^{-\frac{\beta^2}{4tK_y}} r(x-\gamma, y-\beta) d\beta d\gamma. \quad (59)$$

Aplicando a regra de manipulação para a exponencial do operador diferencial de primeira ordem dada pela Eq. (15) sobre a variável x na Eq. (59), obtém-se

$$c(x, y, z, t) = \frac{A(z)}{\sqrt{4\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Q e^{-\frac{\gamma^2}{4tK_x}} e^{-\frac{\beta^2}{4tK_y}} r(x-\gamma-ut, y-\beta) d\beta d\gamma, \quad (60)$$

que corresponde à solução da Eq. (53) sujeita à condição inicial descrita pela Eq. (52), onde

$$r(x, y) = \delta(x-x_f) \delta(y-y_f) \quad (61)$$

e x_f e y_f são as coordenadas de localização da fonte.

A solução representada pela Eq. (60) pode ser utilizada para simulação de dispersão de contaminantes para diferentes modelos do coeficiente de dispersão. Observando que a solução da concentração de contaminante dada pela Eq. (60) são funções gaussianas nas direções x e y , neste trabalho, testamos a regra de manipulação da exponencial do operador diferencial de segunda ordem para a componente z usando o coeficiente de difusão K_z proposto por Degrazia (1992), o que permite uma comparação com os resultados obtidos por Moura (1995). Para atingir esse objetivo, resolve-se o seguinte problema:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right), \quad (62)$$

$$c_0(z) = Q \delta(z-h_f), \quad (63)$$

onde

$$K_z = \frac{0,33 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\alpha_1/2} \left(\frac{z}{h}\right)}{1 + 3,7 \left(\frac{z}{h}\right) \left(\frac{h}{\Lambda}\right)} u_* h \quad (64)$$

e h_f corresponde à altura da fonte, $Q = 400 \text{ g/m}^2$ é a intensidade da fonte área, $h = 400 \text{ m}$ representa a altura da camada limite, $\alpha_1 = 2$ extraído a partir das medidas de Minnesota, $u_* = 0,31 \text{ m/s}$ é a tensão superficial extraída do experimento de Minnesota, $\frac{\Lambda}{L} = \left(1 - \left(\frac{z}{h}\right)\right)^{3/2 \alpha_1 - \alpha_2}$, Λ é o comprimento de Monin-Obukov local, $L = 116 \text{ m}$ é o comprimento de Monin-Obukov obtido a partir do experimento de Minnesota, z é a altura acima dos solo, $\alpha_2 = 3$. (Moura, 1995)

4. Resultados numéricos e conclusões

Neste trabalho, analisou-se um caso de transporte turbulento em uma camada limite estável noturna. A Figura 1 exibe a evolução temporal da concentração de um contaminante em um ponto a 80m de altura lançado por uma fonte área localizada a 12,5m de altura.

Os resultados obtidos apresentam boa coincidência com os resultados publicados por Moura (1995). O desvio quadrático médio é de aproximadamente 6%. A figura 1 mostra a comparação dos resultados obtidos pelo método discutido nesse artigo com aqueles encontrados por Moura (1995).

A solução apresentada é analítica e facilmente implementada em software de computação simbólica em microcomputadores de pequeno porte. Além disso, apresenta vantagem em relação a outras soluções analíticas que utilizam transformada de Laplace (Moura, 1995; Moreira, 2000), pois não há a necessidade de discretizar o domínio na direção z para estimar valores médios do coeficiente de dispersão em cada subdomínio (Moura, 1995; Moreira, 2000).

O método proposto requer um baixo tempo de processamento (20s – Pentium IV, 1.7GHz, utilizando Maple V) para a obtenção da solução analítica, isto é, a solução é obtida em tempo real e reduz a quantidade de memória requerida para a execução das rotinas envolvidas na tarefa de determinação da solução exata.

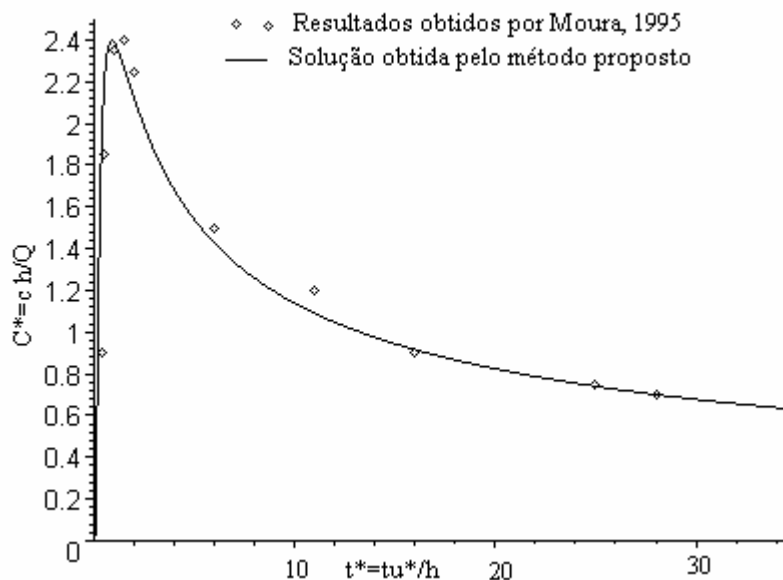


Figura 1. Evolução temporal da concentração para $z=80m$ com fonte área a $12,5m$ do solo

5. Referências

- Azambuja, H., 1964, “A função Delta: propriedades e aplicações”, tese apresentada no concurso para livre docência da disciplina de Física I da escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil.
- Chrysikopoulos, C., Hildemann, L., Roberts, P., 1992, “A 3-dimensional Steady-state Atmospheric Dispersion Deposition Model for Emissions from a Ground Area Source”, *Atmospheric Environment – Part A*, vol.26A (5), pp. 747-757.
- Dattoli, G., Giannesi, L., Quatromini, M., Torre, A., 1998, “Exponential Operators, Operational Rules and Evolution Problems”, *Il nuovo cimento*, vol. 113B, No. 6.
- Degrazia, G., Moraes, O, 1992, “A Model for Eddy Diffusivity in a Stable Boundary Layer”, *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 58, pp. 205-214.
- Koch, W., 1989, “A Solution of the Two-dimensional Atmospheric Diffusion Equation with Height-dependent Diffusion Coefficients Including Ground Level Absorption”, *Atmospheric Environment*, vol.23 (8), pp. 1729-1732.
- Moreira, D., 1996, “Comparação entre um Modelo Gaussiano Atualizado e a Equação de Difusão no Cálculo da Concentração Superficial de Poluentes na Camada Limite Convectiva: o caso de fontes pontuais contínuas elevadas”, dissertação de mestrado, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Brazil.
- Moreira, D., 2000, “Modelo Euleriano Semi-analítico de Difusão Turbulenta de Contaminante”, tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil.
- Moura, A., 1995, “Solução Analítica para Dispersão Vertical Turbulenta em uma Camada Limite Estável”, dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil.
- Moura, A., 1999, “Modelos Multidimensionais Analíticos de Dispersão de Contaminantes na Atmosfera: coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte”, tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil.
- Nieuwstadt, F., 1980, “An Analytic Solution of the Time-dependent, One Dimensional Diffusion Equation in the Atmospheric Boundary Layer”, *Atmospheric Environment*, vol.14, pp. 1361-1364.
- Pires, C., 1996, “Um Estudo Analítico de Dispersão de Contaminantes Abandonados por Fontes Áreas em uma Camada Limite Convectiva”, dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil.
- Reichl, L., 1980, “A Modern Course in Statistical Physics”, Edward Arnold, London.

- Zabadal, J., Vilhena, M., Segatto, C., 2001, "The Total Photon Cross -section Formulation for a Wide Range of Energy", *Il nuovo cimento*, vol. 116B, No. 2.
- Zill, D., Cullen, M., 2001, "Equações Diferenciais", Makron Books, São Paulo, Brazil.
- Zwillinger, D., 1997, "Handbook of Differential Equations", Academic Press, San Diego.

**SOLUTION OF THE MULTIDIMENSIONAL DIFFUSION EQUATION USING LIE SYMMETRIES:
SIMULATION OF POLLUTANT DISPERSION IN THE ATMOSPHERE**

Jorge Rodolfo Zabadal

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,

Departamento de Engenharia Nuclear, Av. Osvaldo Aranha 99, 4º andar, 90046-900 Porto Alegre, RS, Brazil.

E-mail: jorge.zabadal@ufrgs.br

Cristiana Andrade Poffal

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC)

Rua Sarmiento Leite 425, 90046-900 Porto Alegre, RS, Brazil.

E-mail: poffal@cpovo.net

Abstract

Several analytical and numerical methods are being used to solve diffusion and diffusion advection problems. In this work, we develop an analytical solution to the multidimensional diffusion advection equation applying rules based on the Lie symmetries in the exponential of the differential operators that appear in the formal solution. These rules yield good results when applied to obtain solutions for problems in fluid mechanics and in quantum mechanics. There are many advantages of applying these rules: they increase the processing velocity, reduce the amount of memory required to perform the tasks in order to obtain the solution and they dispense the discretization of the domain in some cases. We simulate the contaminant dispersion considering that the horizontal component of the velocity field is dominant and constant, ignoring the other components. We compare the obtained results with the available data in literature.

Keywords: diffusion advection equation, pollutant dispersion, Lie symmetries