

08 a 11 de Outubro de 2018  
Instituto Federal Fluminense  
Búzios - RJ

## UMA SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO FRACIONÁRIA CONSIDERANDO A LEI DE FICK MODIFICADA

**A.S. Palmeira**<sup>1</sup> - andersonpalmeira@icloud.com

**P.H. Xavier**<sup>1</sup> - pahenfax@gmail.com

**D.M. Moreira**<sup>1</sup> - davidson.moreira@fieb.org.br

<sup>1</sup> Campus Integrado de Manufatura e Tecnologia SENAI CIMATEC, Piatã, Salvador, BA, Brasil

### **Resumo.**

*Neste trabalho apresenta-se uma solução analítica para equação de difusão-advecção bidimensional fracionária considerando-se o modelo evolutivo bi-fluxo. A solução é obtida com a combinação do método da decomposição por Laplace e perturbação por homotopia, obtendo-se uma solução genérica dependente da função de Mittag-Leffler, a qual é intrínseca as soluções de equações diferenciais fracionárias. Os resultados mostram uma rápida convergência e uma boa concordância com dados experimentais.*

**Palavras-chave:** Transformada de Laplace; equação de difusão-advecção; derivada fracionária; modelo evolutivo bi-fluxo.

## **1. INTRODUÇÃO**

Nos últimos anos, vários métodos têm sido propostos para obtenção da solução da equação da difusão-advecção, a qual é empregada para estimativas da concentração de poluentes em função do espaço e do tempo, levando-se em conta fatores como fonte emissora, condições meteorológicas, características do meio e velocidade em que o poluente é carregado, porém todos com suas limitações. Os processos que regem o transporte e difusão dos poluentes são numerosos e muito complexos, sendo que seria inviável descrevê-los sem auxílio de modelos matemáticos, os quais normalmente são descritos pela equação de difusão-advecção. Através deles é possível descrever, interpretar, administrar liberações acidentais, avaliar áreas de risco, identificar fontes poluidoras, corrigir e controlar as concentrações de poluentes na atmosfera (Moreira e Tirabassi, 2004).

Entretanto, normalmente as soluções analíticas da equação de difusão são em função da tradicional Lei de Fick. De um modo diferente, neste trabalho, adota-se a equação de difusão-advecção considerando-se uma nova aproximação na lei de Fick através do processo de difusão bi-fluxo (Bevilacqua et al., 2015). O processo bi-fluxo consiste no fluxo simultâneo de dois conjuntos de partículas espalhadas com duas velocidades distintas. O primeiro conjunto obedece à lei clássica de Fick, o chamado fluxo primário, enquanto o segundo, denominado de

fluxo secundário, segue uma nova lei, chamada de retenção. A equação resultante apresenta uma derivada de quarta ordem e fornece uma abordagem consistente por levar em consideração a energia rotacional que, de outro modo, não seria possível com a teoria clássica (Bevilacqua et al., 2015). A literatura apresenta muitas soluções analíticas para a equação de difusão-advecção na forma tradicional (Rounds, 1995; Demuth, 1978; Nieuwstadt e Haan, 1981; Tirabassi et al., 1987; Tirabassi, 1989; Tirabassi e Rizza, 1994), considerando também derivadas de ordem inteira.

Nesse trabalho, propõe-se a solução da equação de difusão-advecção bidimensional considerando-se o processo bi-fluxo (Bevilacqua et al., 2015), com uma derivada de ordem fracionária, utilizando-se o método da decomposição por Laplace e perturbação por homotopia (He, 2008a) (He, 2008b). A ideia essencial desse método é combinar a transformada de Laplace e o método de perturbação homotopia. Este método conduz a uma solução sem nenhuma discretização, evitando com isso os erros de aproximação dos métodos numéricos. O resultado dessa combinação mostra um procedimento elegante que fornece uma solução fechada, obtida através de uma série que converge rapidamente.

## 2. METODOLOGIA

A difusão por bi-fluxo consiste no fluxo simultâneo de dois conjuntos de partículas espalhando-se com duas velocidades distintas, sendo modelada através de uma equação diferencial linear de 2ª e 4ª ordem:

$$u \frac{\partial^\alpha c}{\partial x^\alpha}(x, z) = \beta k_1 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) - \beta(1 - \beta) k_2 \frac{\partial^4}{\partial z^4}(x, z) \quad (1)$$

para  $0 < z < h, x > 0$ , onde  $h$  é a altura da camada limite atmosférica (CLA),  $u$  é a velocidade longitudinal do vento médio e  $\alpha$  é um parâmetro de ordem fracionária ( $0 < \alpha < 1$ ).

Além disso,  $c$  é a concentração de poluentes,  $z$  é a variável espacial na direção vertical,  $x$  é a distância longitudinal da fonte,  $\beta$  representa um parâmetro de controle da retenção e difusão e, por simplicidade, considera-se os coeficientes de difusão  $k_1$  e  $k_2$  constantes. Para obter-se a solução da equação (1) é necessário especificar as condições de contorno:

$$k_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = h \quad (2)$$

$$k_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \quad (3)$$

Além disso, assume uma condição inicial com emissão de poluentes constante  $Q$  na altura da fonte:

$$uc(0, z) = Q\delta(z - H_s) \text{ em } t = 0 \quad (4)$$

onde  $\delta(z - H_s)$  é a função delta de Dirac e  $H_s$  é a altura da fonte. Para usar a metodologia proposta neste trabalho a função delta de Dirac deve ser aproximada pela expressão:

$$\delta(z - H_s) = \frac{1}{h} \left[ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (5)$$

onde  $\delta(z - H_s)$  é a função delta de Dirac e  $H_s$  é a altura da fonte. Para usar a metodologia proposta neste trabalho a função delta de Dirac deve ser aproximada pela expressão:

$$c(z, 0) = \frac{Q}{uh} \left[ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (6)$$

para a solução da equação (1), aplica-se a transformada de Laplace na variável  $x$ , usando a definição da derivada de Caputo, obtendo-se:

$$us^\alpha \hat{c}(s, z) - us^{\alpha-1} c(0, z) = L \left[ \beta k_1 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - L \left[ \beta(1 - \beta) k_2 \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \quad (7)$$

onde  $L$  representa a transformada de Laplace. Rearranjando-se a equação (7), obtém-se:

$$\hat{c}(z, s) = \frac{c(z, 0)}{s} + \frac{\beta k_1}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\beta(1 - \beta) k_2}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \quad (8)$$

aplicando-se a inversa da transformada de Laplace na Equação (8), resulta:

$$L^{-1} [\hat{c}(z, s)] = L^{-1} \left[ \frac{c(z, 0)}{s} + \frac{\beta k_1}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\beta(1 - \beta) k_2}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \right] \quad (9)$$

portanto,

$$c(x, z) = c_0 + L^{-1} \left[ \frac{\beta k_1}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\beta(1 - \beta) k_2}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^4 c}{\partial z^4}(x, z) \right] \right] \quad (10)$$

pelo método da homotopia, a solução geral pode ser escrita como:

$$c(x, z) = c_0 + c_1 + c_2 + c_3 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \quad (11)$$

onde:

$$c_0 = \frac{Q}{uh} \left[ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \right] \quad (12)$$

e os demais termos:

$$c_{i+1}(x, z) = L^{-1} \left[ \frac{\beta k_1}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^2 c_i}{\partial z^2}(x, z) \right] - \frac{\beta(1 - \beta) k_2}{us^\alpha} L \left[ \frac{\partial^4 c_i}{\partial z^4}(x, z) \right] \right] \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (13)$$

seguinto-se a metodologia, calculam-se as derivadas que serão utilizadas nos termos  $c_i$ . Por simplicidade, tomando-se em (13),  $A_1 = \beta k_1$  e  $A_2 = \beta(1 - \beta)k_2$ , resulta:

$$c_1 = \frac{2Qx^\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)uh} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) (A_1 + A_2 \lambda_n^2) \quad (14)$$

$$c_2 = \frac{2Qx^2\alpha}{\Gamma(2\alpha + 1)uh} \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^4 \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^2 \quad (15)$$

onde  $\Gamma$  é a função Gamma. Portanto, agrupando-se estes primeiros termos, tem-se:

$$c(x, z) = \frac{Q}{h} + \frac{2Q}{h} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) \left\{ 1 - \frac{x^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \lambda_n^2 (A_1 + A_2 \lambda_n^2) + \frac{1}{2} \frac{x^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \lambda_n^4 (A_1 + A_2 \lambda_n^2)^2 + \dots \right\} \quad (16)$$

portanto, a solução final é dada por:

$$c(x, z) = \frac{Q}{uh} + \frac{2Q}{uh} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n z) \cos(\lambda_n H_s) E_\alpha \left[ -x^\alpha \lambda_n^2 (A_1 + A_2 \lambda_n^2) \right] \quad (17)$$

segue que a equação (17) é mais geral, no sentido que, se  $k_2 = 0$  e ( $A_2 = 0$ ) e  $\alpha = 1$ , obtém-se a solução para difusão normal. Cabe ressaltar que  $E_\alpha$  é a função de Mittag-Leffler, a qual é intrínseca as soluções com derivadas fracionárias.

### 3. Parametrização da turbulência

Neste trabalho, utiliza-se um coeficiente de difusão turbulento dependente somente da variável  $z$  para condições instáveis (Degrazia et al., 1997):

$$K_z = 0.22w_* z_i \left( \frac{z}{z_i} \right)^{\frac{1}{3}} \left( 1 - \frac{z}{z_i} \right)^{\frac{1}{3}} \left[ 1 - e^{\left(-4\frac{z}{z_i}\right)} - 0.0003e^{\left(8\frac{z}{z_i}\right)} \right] \quad (18)$$

onde  $w^*$  é a velocidade convectiva. Para obtenção de um  $K$  ( $k_1$ ) constante é feita uma média desde o solo ( $z = 0$ ) até  $h$  (altura da CLA).

### 4. RESULTADOS

Para investigar o funcionamento da solução obtida contrapõem-se os dados obtidos pelo modelo com os dados obtidos nos experimentos de Copenhagen. Os experimentos de dispersão em Copenhagen, retratados nos artigos Gryning et al. (1987) e Gryning e Lyck (1984), consistiram na liberação do traçador SF<sub>6</sub> (hexafluoreto de enxofre). O traçador foi liberado sem

empuxo a partir de uma torre com altura de 115 m sendo coletado ao nível do solo. As unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância entre 2 a 6 km, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente. O comprimento de rugosidade foi de 0.6 m. Os parâmetros micrometeorológicos para este experimento estão tabulados no artigo de Degrazia et al. (2001).

Observe que neste experimento a concentração integrada lateralmente foi normalizada pela taxa de emissão ( $c/Q$ ). Na figura 1, mostra-se o gráfico de convergência para  $\alpha$  com valores 0.90, 0.95 e 1.00, apresentando rápida convergência.

Além disso, nas figuras 2, 3 e 4 mostram-se os gráficos de espalhamento considerando-se a Eq. (17), com o coeficiente de difusão constante dado pela Eq. (18), para vento médio medido a 10 m, considerando-se  $\alpha$  com valores 0.90, 0.95 e 1.00, respectivamente.

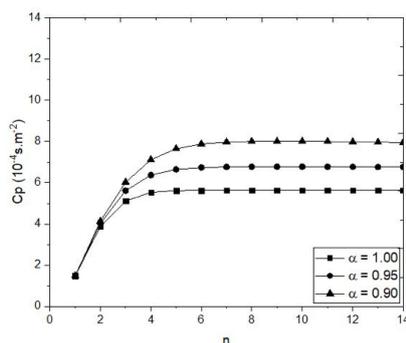


Figura 1- Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas ( $C_o$ ) e Preditas pelo modelo ( $C_p$ ). Considerando-se a Eq. (17), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (18) com velocidade medida 10 m. Para o experimento de Copenhagen.

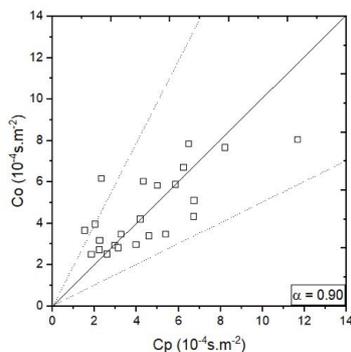


Figura 2- Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas ( $C_o$ ) e Preditas pelo modelo ( $C_p$ ). Considerando-se a Eq. (17), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (18) com velocidade medida 10 m. Para o experimento de Copenhagen.

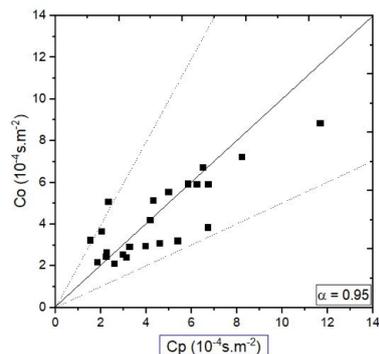


Figura 3- Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (Co) e Preditas pelo modelo (Cp). Considerando-se a Eq. (17), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (18) com velocidade medida 10 m. Para o experimento de Copenhagen.

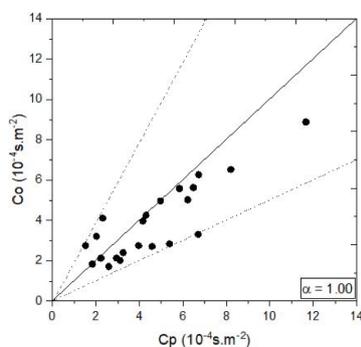


Figura 4- Gráfico de espalhamento das concentrações Observadas (Co) e Preditas pelo modelo (Cp). Considerando-se a Eq. (17), utilizando o coeficiente de difusão da Eq (18), com velocidade medida 10 m. Para o experimento de Copenhagen.

As figuras mostram que a concentração integrada lateralmente a partir do modelo com  $k_1$  constante, em condições moderadamente instáveis do experimento de Copenhagen, apresentam bons resultados. Entretanto, os melhores resultados foram para  $\alpha = 1.00$  e  $\alpha = 0.95$ , onde quase todos os pontos estão entre as linhas pontilhadas, as quais representam um fator de 2. É possível verificar a influência do parâmetro  $\alpha$ , de forma que para  $\alpha = 0.90$  os resultados começam a ficar piores.

## 5. CONCLUSÃO

Neste trabalho foi demonstrado que o método de decomposição por Laplace e perturbação por homotopia pode ser utilizado para resolver a equação de difusão-advecção fracionária com fechamento bi-fluxo.

Desta forma, obtém-se uma solução mais geral. Esta metodologia é simples e direta, apresentando uma rápida convergência na série. Ressalta-se que esta é a primeira vez na literatura que esta equação com fechamento bi-fluxo tem uma solução obtida com a utilização de derivadas fracionárias.

## Agradecimentos

Os autores agradecem o SENAI CIMATEC e a FAPESB pelo apoio financeiro.

## REFERÊNCIAS

- Moreira, D. e Tirabassi, T. (2004), “*Modelo matemático de dispersão de poluentes na Atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental*”, Ambiente Sociedade – Vol. 7, pp. 160-161, n. 2.
- Demuth, C. (1978), “*A contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources*”, Atmospheric Environment – v.12, p.1255 -1258.
- Krishnamurthy, E.V. e Sen, S.K. (2001), “*Numerical Algorithm Computations in Science and Engineering*”, East-West Press – Vol. 7, pp. 160-161, n. 2.
- Bevilacqua et al. (2015), “*An Evolutionary Model of Bi Flux Diffusion Processes*”, The Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering – pp. 987-992.
- Gryning, S.E. e Lyck, E. (1984), “*Atmospheric Dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations*”, Journal of Climate and Applied Meteorology – vol. 23(4) pp.651 – 660.
- Adomian, G. (2001), “*Solution of physical problems by decomposition*”, Computers Science and Engineering, East-West Press.
- He, J.H. (2008), “*New interpretation of homotopy perturbation. Addendum*”, International Journal of Modern Physics B , vol. 20, n. 2, pp. 205-209.
- He, J.H. (2008), “*Recent development of the homotopy perturbation method*”, Topological methods in Nonlinear Analysis, vol. 31, n. 2, pp. 205-209.
- Debnath, L. (1997), “*Nonlinear Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*”, Birkhauser.
- Nieuwstadt, F.T.M e Haan, B.J. (1981), “*An analytic solution of the one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to the inversion rise fumigation*”, Atmospheric Environment.v.15, p.845 - 851.
- Tirabassi, T. (1989), “*Analytical air pollution advection and diffusion models*”, Water, Air, and Soil Pollution, v.47, p. 19-24.
- Tirabassi, T. e Rizza, U. (1994), “*Applied dispersion modelling for ground-level concentrations from elevated sources*”, Atmospheric Environment, v.28, n.4, p. 611-615.
- Tirabassi, T., Tagliazucca, M. e Galliani, G. (1987), “*Easy to use air pollution model for turbulent shear flow*”, Environment Software, v.2, n.1, p. 37-44.
- Rounds, W. (1955), “*Solutions of the two-dimensional diffusion equations*”, Transactions American Geophysical, v. 36, p.395-405.
- Khan, Y. e Austion, F. (2010), “*Application of the Laplace decomposition method for nonlinear homogenous and non-homogenous advection equations*”, Zeitschrift fuer Naturforschung A, vol. 65, n. 2, pp. 1-5.