

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**SOLUÇÃO GILTT BIDIMENSIONAL EM GEOMETRIA CARTESIANA:
SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA**

por

Daniela Buske

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Março de 2008

**SOLUÇÃO GILTT BIDIMENSIONAL EM GEOMETRIA CARTESIANA:
SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA**

por

Daniela Buske

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Túllio Mena Barreto de Vilhena (UFRGS)

Co-Orientadores: Prof. Dr. Tiziano Tirabassi (CNR / ISAC - Itália)

Prof. Dr. Davidson Martins Moreira (UNIPAMPA)

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Peter Brimblecombe (University of East Anglia / Norwich - Inglaterra)

Prof. Dr. Umberto Rizza (Istitute ISAC of CNR / Lecce - Itália)

Prof. Dr. Gilberto Fernando Fisch (CTA - IAE / São José dos Campos - Brasil)

Prof. Dr. Francis França (PROMEC - UFRGS / Porto Alegre - Brasil)

Prof. Dr. Flávio José Lorini

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 17 de Março de 2008

Aos meus pais e ao meu esposo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço

A Deus que possibilitou que eu estivesse aqui para realizar este trabalho;

A minha família, especialmente aos meus pais, Hilário e Mara, pelo incentivo e apoio, não somente durante a realização desta dissertação, mas no decorrer de toda a minha vida;

Ao meu esposo Régis pela compreensão, companheirismo e principalmente por todo o apoio que prestou durante a execução deste trabalho;

Aos professores Marco Túllio M. B. de Vilhena, Davidson Martins Moreira e Tiziano Tirabassi pelo conhecimento transmitido e pela valiosa orientação prestada;

Ao CNPQ e a CAPES pelo suporte financeiro;

Ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes;

E a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

SOLUÇÃO GILTT BIDIMENSIONAL EM GEOMETRIA CARTESIANA: SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Na presente tese é apresentada uma nova solução analítica para a equação de advecção-difusão bidimensional transiente para simular a dispersão de poluentes na atmosfera. Para tanto, a equação de advecção-difusão é resolvida pela combinação da transformada de Laplace e da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). O fechamento da turbulência para os casos Fickiano e não-Fickiano é considerado. É investigado o problema de modelagem da dispersão de poluentes em condições de ventos fortes e fracos considerando, para o caso de ventos fracos, a difusão longitudinal na equação de advecção-difusão. Além disso, foi incluída no modelo a velocidade vertical e avaliada sua influência considerando-se o campo de velocidades constante e também geradas via LES (*Large Eddy Simulation*), para poder simular uma camada limite turbulenta mais realística. Os resultados obtidos por essa metodologia são validados com resultados experimentais disponíveis na literatura.

Palavras Chave: GILTT, solução analítica, equação de advecção-difusão, condições de vento fraco, simulação da dispersão de poluentes na atmosfera.

ABSTRACT

GILTT TWO-DIMENSIONAL SOLUTION IN CARTESIAN GEOMETRY: SIMULATION OF THE POLLUTANT DISPERSION IN THE ATMOSPHERE

In the present thesis it is presented a new analytical solution for the transient two-dimensional advection-diffusion equation to simulate the pollutant dispersion in atmosphere. For that, the advection-diffusion equation is solved combining the Laplace transform and the GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) techniques. The turbulence closure for Fickian and non-Fickian cases is considered. It is investigated the problem of modeling the pollutant dispersion in strong and weak winds considering, for the case of low wind conditions, the longitudinal diffusion in the advection-diffusion equation. Moreover, it was considered in the model the vertical velocity and its influence was evaluated considering velocities field constant and also generated by means of LES (Large Eddy Simulation), to simulate a more realistic turbulent boundary layer. The results attained by this methodology are validated with experimental results available in literature.

Keywords: GILTT, analytical solution, advection-diffusion equation, low wind conditions, simulation of pollutant dispersion in atmosphere.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
3	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO BIDIMENSIONAL PELO MÉTODO GILTT	13
3.1	O modelo físico-matemático	14
3.1.1	O problema de fechamento da turbulência	15
3.1.2	A equação de advecção-difusão bidimensional	18
3.2	Solução da equação de advecção-difusão bidimensional	20
3.2.1	Aplicação da transformada de Laplace na variável temporal	21
3.2.2	Solução via GILTT do problema estacionário	22
3.2.3	Inversão numérica da transformada de Laplace: <i>Quadratura Gaussiana</i>	32
3.2.4	Inversão numérica da transformada de Laplace: <i>algoritmo Fixed-Talbot</i>	32
3.2.5	Casos particulares	33
4	DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO	37
4.1	Dados Experimentais	37
4.1.1	Experimento de Copenhagen (Dinamarca)	37
4.1.2	Experimento de Kinkaid (Illinois, USA)	39
4.1.3	Experimento de Prairie-Grass (O'Neill, Nebraska)	40
4.1.4	Experimento de Hanford (Washington, USA)	43
4.1.5	Experimento IIT Delhi (Índia)	44
4.1.6	Experimento de INEL (USA)	45
4.1.7	Experimento de Lilleström (Noruega)	46
4.2	Coefficiente de Difusão	47

4.3	Expressões para o parâmetro de dispersão lateral	50
4.4	Perfil do Vento	51
4.5	Índices Estatísticos	52
5	RESULTADOS	54
5.1	Resultados para os modelos com fechamento Fickiano da turbulência	54
5.1.1	Problema estacionário	54
5.1.2	Problema transiente	62
5.1.3	Considerando a deposição de poluentes	71
5.2	Campo de velocidades constante e geradas pelo LES	74
5.3	Resultados para os modelos com fechamento não-Fickiano da turbulência	78
5.4	Resultados considerando-se condições de vento fraco nos modelos com fecha- mento Fickiano e não-Fickiano	86
6	CONCLUSÃO	92
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	94
	APÊNDICES	113
I	An Unsteady Analytical Solution of Advection-Diffusion Equation for Low Wind Conditions	113
II	Analytical Solution of the Transient Two-Dimensional Advection-Diffusion Equation Considering Nonlocal Closure of the Turbulence Diffusion	125
III	The GILTT Solution of the Advection-Diffusion Equation for an Inhomo- geneous and Nonstationary PBL	136
IV	An Analytical Air Pollution Model for Warm Sources	146
V	An Analytical Solution of the Advection-Diffusion Equation Considering Non-Local Turbulence Closure	155
VI	Simulation of Pollutant Dispersion for Low Wind Conditions in Stable and Convective Planetary Boundary Layer	168

VII A New Analytical Approach to Simulate the Pollutant Dispersion in the PBL.....	175
VIII Near Source Atmospheric Pollutant Dispersion Using the New GILTT Method	185
IX Plume Descriptors From an Analytical Solution of the Advection-Diffusion Equation.....	192
X An Unsteady Two-Dimensional Analytical Solution for Modeling Air Pollution Dispersion and Turbulent Dry Deposition.....	198

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

$ADMM$	<i>Advection Diffusion Multilayer Method</i>
A_k	peso da Quadratura de Gauss
B_1, B_2, B_3	matrizes de coeficientes do problema transformado de segunda ordem
c	concentração média de um contaminante passivo (g/m^2)
\bar{c}	concentração de um contaminante passivo (g/m^3)
\bar{C}	variável dependente após aplicação da transformada de Laplace no tempo
\bar{c}_n	variável dependente da expansão em série do problema estacionário
C^*	concentração adimensional de um contaminante passivo
C_o	concentrações observadas experimentalmente
C_p	concentrações preditas pelo modelo
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
Cor	coeficiente de correlação
d	deslocamento do plano zero (m)
D	matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem
\bar{d}	viés (<i>bias</i>) médio
EDO	equação diferencial ordinária
F	matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $F = B_1^{-1}B_2$
$FA2$	fator de dois
FB	fração de inclinação
FS	desvio fracional padrão
f_c	parâmetro de Coriolis: $f_c = 1.46 * 10^{-4}$
$(f_m)_i$	freqüência normalizada do pico espectral
$(f_m)_i$	freqüência do pico espectral (s)
G	matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $G = B_1^{-1}B_3$

g	aceleração da gravidade (m/s^2)
$G(x, r)$	matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem após inversão de Laplace analítica em x
<i>GITT</i>	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>
<i>GILTT</i>	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
<i>GIADMT</i>	<i>Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique</i>
h	altura da camada limite convectiva (m)
h_e	altura efetiva da fonte (m)
H	matriz bloco do problema transformado de primeira ordem
H_s	altura da fonte (m)
I	índice de concordância
k	constante de Von-Kármán
K_α	coeficiente de difusão onde α indica as direções x , y e z (m^2/s)
K_x	coeficiente de difusão na direção x (m^2/s)
K_y	coeficiente de difusão na direção y (m^2/s)
K_z	coeficiente de difusão na direção z (m^2/s)
L	comprimento de Monin-Obukov (m)
L_*	distância longe da fonte no eixo x (m)
<i>LES</i>	<i>Large Eddy Simulation</i>
M^*	número de termos no somatório do algoritmo FT
M	número de pontos da Quadratura de Gauss
<i>MAE</i>	erro absoluto médio
N	número de autovalores no somatório da fórmula da inversa da GILTT
n'	freqüência adimensional
<i>NMSE</i>	erro quadrático médio normalizado
P_k	pesos da Quadratura de Gauss
Q	intensidade da fonte (g/s)
Q_*	fluxo de calor na superfície (Km/s)
S	termo fonte
S_k	assimetria (<i>skewness</i>)
SS	variância

t	variável temporal (s)
T_a	temperatura ambiente (K)
T_i	temperatura da pluma na saída da chaminé (K)
T_{l_w}	escala de tempo Lagrangeana vertical (s)
U	velocidade instantânea do vento na direção x (m/s)
\bar{u}	componente do vento médio orientado na direção x (m/s)
u'	componente turbulenta do vento na direção x (m/s)
u_*	velocidade de fricção (m/s)
$\overline{u'c'}$	fluxo turbulento do contaminante nas direções longitudinal (g/sm^2)
$\overline{v'c'}$	fluxo turbulento do contaminante nas direções lateral (g/sm^2)
$\overline{w'c'}$	fluxo turbulento do contaminante nas direções vertical (g/sm^2)
V	velocidade instantânea do vento na direção y (m/s)
\bar{v}	componente do vento médio orientado na direção y (m/s)
v'	componente turbulenta do vento na direção y (m/s)
V_g	velocidade de deposição do poluente (m/s)
V_i	velocidade vertical da pluma na saída da chaminé (m/s)
W	velocidade instantânea do vento na direção z (m/s)
\bar{w}	componente do vento médio orientado na direção z (m/s)
w'	componente turbulenta do vento na direção z (m/s)
w_*	escala de velocidade convectiva (m/s)
x	distância longitudinal da fonte (m)
y	distância lateral da fonte (m)
X	matriz dos autovetores do problema transformado de primeira ordem
X^*	distância adimensional da fonte
$Y(x, r)$	vetor de incógnitas do problema transformado de segunda ordem
$Z(x, r)$	vetor de incógnitas do problema transformado de primeira ordem
z	altura acima da superfície (m)
Z^*	altura adimensional
z_0	comprimento de rugosidade (m)
z_r	altura de referência (m)

2. Caracteres Gregos

α	indica as direções x , y e z
β	termos adicionais no contragradiente
δ	função delta de Dirac
δh	ascensão da pluma (m)
γ	termo de contragradiente
λ_n	autovalor do problema de Sturm-Liouville
$(\lambda_m)_i$	comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical turbulento (m)
ψ	taxa de dissipação molecular da velocidade turbulenta
Ψ	função estabilidade
σ_y	parâmetro de dispersão lateral
σ_o	desvio padrão observado
σ_p	desvio padrão predito
σ_u	desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal (m/s)
σ_v	desvio padrão da componente da velocidade turbulenta lateral (m/s)
σ_w	desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical (m/s)
σ_θ	desvio padrão da direção horizontal do vento (<i>graus</i>)
τ	tempo de relaxação (s)
ξ	vetor representado por $X^{-1}Z(0, r)$
ζ_n	autofunção do problema de Sturm-Liouville

ÍNDICE DE FIGURAS

3.1	Esquema ilustrativo do efeito local (à esquerda) e efeito não-local (à direita) na dispersão do poluente. O caráter local indica que apenas partículas vizinhas se relacionam, enquanto que no não-local quaisquer partículas podem se relacionar entre si. Fonte: página 226 de [Stull, 1988].	18
3.2	Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes	19
4.1	Experimento de Copenhagen.	38
4.2	Perfil dos coeficientes de difusão em função da altura adimensional (z/h) para os casos instáveis (K_z/w_*h) e estáveis (K_z/u_*h).	50
5.1	Convergência numérica da concentração de poluentes ($c(x,0)/Q$) utilizando a equação (3.54), experimento 8 de Copenhagen, coeficiente de difusão da equação (4.1) e o perfil de vento potência.	55
5.2	Gráfico de espalhamento dos dados observados experimentalmente de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p), utilizando a equação (3.54), perfil de vento similaridade e: (a) experimento de Copenhagen e coeficiente de difusão (4.1); (b) experimento de Prairie-Grass e coeficiente de difusão (4.1); (c) experimento de Hanford e coeficiente de difusão (4.2).	59
5.3	Gráfico da concentração adimensional ao nível do solo ($C^* = c\bar{u}h/Q$) em função da posição adimensional $X^* = xw_*/\bar{u}h$ para o experimento 8 de Copenhagen, utilizando a equação (3.54), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.	61

5.4	Isolinhas da concentração ($C^* = c\bar{u}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$) predita para diferentes alturas de fonte para o caso do cenário meteorológico do experimento 1 de Prairie-Grass, utilizando a equação (3.54), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento similaridade.	62
5.5	Perfil vertical da concentração $C^* = c\bar{u}h/Q$ para três distâncias adimensionais ($X^*=0,25$; $0,5$; $0,75$) e altura da fonte adimensional: a) $H_s/h = 0,25$, b) $H_s/h = 0,1$, c) $H_s/h = 0,05$. Experimento 1 de Prairie-Grass, utilizando a equação (3.54), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento similaridade.	63
5.6	Concentração adimensional integrada lateralmente como uma função da distância adimensional da fonte para diferentes tempos e pontos de quadratura: a) $M = 2$; b) $M = 4$; c) $M = 8$ ($C^* = c\bar{u}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$ e $H_s = 0,25h$). Foram utilizados o problema (3.50), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.	66
5.7	Concentração adimensional integrada lateralmente $C^* = c\bar{u}h/Q$ como uma função da distância adimensional da fonte $X^* = xw_*/\bar{u}h$ para diferentes tempos e precisão $M^* = 5$ e $H_s = 0,25h$). Foram utilizados o problema (3.50), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.	67
5.8	Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e a do modelo (C_p), normalizada pela taxa de emissão ($c(x,0,t)/Q$) para os pontos de quadratura $M = 2$ utilizando a equação (3.50), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.	68
5.9	Gráfico de espalhamento dos dados observados experimentalmente de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p), utilizando a equação de advecção-difusão-deposição, perfil de vento potência e coeficiente de difusão (4.2).	74
5.10	Isolinhas de concentração adimensional preditas pelo modelo ($C^* = c\bar{u}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) para diferentes velocidades verticais do vento e condições estacionárias: a) $\bar{w}=-0,5$; b) $\bar{w}=0$; c) $\bar{w}=0,5$	75
5.11	Isolinhas de concentração adimensional preditas pelo modelo ($C^* = c\bar{u}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) com velocidades do vento geradas pelo LES	78

5.12	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observados experimentalmente de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p) utilizando a equação (3.52).	80
5.13	Gráfico de espalhamento para o experimento de Prairie-Grass dos dados observados experimentalmente de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p) utilizando-se a equação (3.52).	81
5.14	Gráfico da concentração superficial adimensional ($C^* = \bar{c}u\bar{h}/Q$) em função da distância adimensional ($X^* = xw_*/\bar{u}h$) para quatro alturas de fonte diferentes utilizando-se a equação (3.52).	83
5.15	Gráfico da concentração em função da distância da fonte com $S_k = -1, 0; 0, 0$ e $1, 0$ para o experimento 8 de Copenhagen.	84
5.16	Gráfico da concentração em função da distância da fonte com $S_k = 0, 0$ e $1, 0$ para o experimento 7 de Prairie-Grass.	85
5.17	Diagrama de espalhamento das concentrações observada ao nível do solo (C_o) e preditas pelo modelo (C_p) usando a solução (3.53) para: a) experimento de INEL; b) experimento de INEL para $u < 1m/s$	87
5.18	Diagrama de espalhamento das concentrações observada ao nível do solo (C_o) e preditas pelo modelo (C_p) usando a solução (3.53) para o experimento IIT Delhi.	89
5.19	Gráfico de espalhamento para o experimento de IIT Delhi dos dados observados experimentalmente (C_o) em comparação com os resultados preditos pelo modelo (C_p) utilizando a equação (3.51).	90

ÍNDICE DE TABELAS

4.1	Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen [Gryning et al., 1987].	38
4.2	Velocidade de fricção u_* em (m/s) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 <i>min</i>	39
4.3	Comprimento de Monin-Obukhov L em (m) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 <i>min</i> . . .	40
4.4	Parâmetros meteorológicos para o experimento de Kinkaid [Hanna e Paine, 1989] - Parte 1. T_a é a temperatura ambiente, T_i é a temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma na saída da chaminé. .	41
4.5	Parâmetros meteorológicos para o experimento de Kinkaid [Hanna e Paine, 1989] - Parte 2. T_a é a temperatura ambiente, T_i é a temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma na saída da chaminé. .	42
4.6	Parâmetros meteorológicos do experimento de Prairie-Grass [Barad, 1958], [Nieuwstadt, 1980].	43
4.7	Parâmetros meteorológicos do experimento de Hanford [Doran e Horst, 1985], [Doran et al., 1984].	44
4.8	Parâmetros meteorológicos do experimento IIT Delhi [Sharan et al., 2002]. . .	45
4.9	Parâmetros meteorológicos do experimento de INEL [Sagendorf e Dickson, 1974].	46
4.10	Parâmetros meteorológicos do experimento de Lilleström [Siversten e Böhler, 1985].	47
5.1	Comportamento da concentração de poluente ($c(x,0)/Q$) para o experimento 8 de Copenhagen, utilizando a equação (3.54), coeficiente de difusão da equação (4.1) e o perfil de vento potência.	56

5.2	Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen, utilizando a equação (3.54), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $c(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.	58
5.3	Avaliação estatística do modelo (3.54) utilizando o experimento de Copenhagen, coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.	60
5.4	Avaliação estatística do modelo (3.54) utilizando os experimentos de Copenhagen, Prairie-Grass e Hanford e perfil de vento similaridade.	60
5.5	Avaliação estatística do modelo (3.50) utilizando o experimento de Copenhagen. Considerou-se a solução do problema procedendo-se a inversão de Laplace pelo método da quadratura de Gauss (equação(3.45)) e pelo método FT (equação(3.47)).	65
5.6	Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen, utilizando a equação (3.50), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $c(x, 0, t)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente. QG significa inversão da transformada de Laplace pelo método da Quadratura Gaussiana e FT pelo algoritmo Fixed-Talbot.	69
5.7	Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen, para os três períodos de 20 minutos da segunda hora de medição do poluente utilizando-se a equação (3.50), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $c(x, 0, t)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.	70
5.8	Dados meteorológicos e do poluente para os seis experimentos de Hanford. Dados do poluente são normalizados pela taxa de emissão Q . Índice d refere-se ao material que deposita e índice nd refere-se ao material que não deposita.	72
5.9	Avaliação estatística do modelo com deposição de poluentes comparado com os modelos de [Chamberlain, 1953], [Ermak, 1977], [Horst, 1983] e [Rao, 1981].	73
5.10	Parâmetros externos para as simulações com LES.	77

5.11	Parâmetros meteorológicos das simulações do LES.	77
5.12	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Copenhagen. .	79
5.13	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Prairie-Grass.	80
5.14	Avaliação estatística do modelo (3.53) utilizando o experimento de INEL.	87
5.15	Avaliação estatística do modelo (3.53) utilizando o experimento de INEL con- siderando apenas $u < 1m/s$	88
5.16	Avaliação estatística do modelo (3.53) utilizando o experimento de IIT Delhi.	88
5.17	Avaliação estatística do modelo (3.48) utilizando os experimentos de INEL e IIT Delhi.	90
5.18	Avaliação estatística do modelo (3.51) utilizando o experimento de IIT Delhi considerando $S_k = 0,6$ e $S_k = 1,0$	91

1. INTRODUÇÃO

A preocupação em preservar a qualidade do ar vem crescendo consideravelmente nas últimas décadas. A emissão excessiva de poluentes na atmosfera tem aumentado com o desenvolvimento industrial e tecnológico provocando sérios danos ambientais e fazendo com que o ar não fique dentro dos padrões adequados.

A poluição atmosférica é ocasionada por efeitos naturais (por exemplo, emissão de SO_2 por um vulcão) ou antropogênicos (por exemplo, emissões industriais e automotivas). Enquanto os níveis de poluição natural podem ser considerados constantes no tempo (embora no passado grandes erupções vulcânicas tenham modificado o clima por um certo período), os níveis de poluição ocasionada pelo homem estão em contínuo aumento. Enquanto que sobre poluição natural não existe, em geral, nenhum controle, a poluição antropogênica pode ser controlada. São muitos os problemas que a poluição do ar, produzida por atividades antropogênicas, ocasiona para o equilíbrio ecológico. Os gases e poeiras abandonados na atmosfera provocam efeitos negativos nas proximidades das fontes (deteriorando a qualidade do ar em regiões urbanas, agrícolas e industriais), a média ou longa distância (chuva ácida, transporte transfronteiriço) e em escala global (buraco na camada de ozônio). Se as fontes poluidoras são numerosas ou de longo tempo de emissão ou, ainda se os poluentes são suficientemente tóxicos, os prejuízos ocasionados ao equilíbrio ecológico serão certamente consideráveis. Devido aos problemas ocasionados pela poluição do ar, é necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes para prever as possíveis conseqüências do impacto ambiental sobre os diversos ecossistemas.

Tradicionalmente os movimentos atmosféricos e os fenômenos relacionados têm sido classificados de acordo com suas dimensões horizontais em três categorias: macroescala, mesoescala e microescala. Os movimentos de macroescala tem uma escala de comprimento horizontal da ordem de 1000 *km* ou maior (mas limitado pela circunferência da Terra) e escala de tempo de um dia ou mais. Na vertical, os movimentos de macroescala podem

se estender por toda a troposfera*. No outro extremo, os movimentos de microescala tem um comprimento horizontal de 5 *km* ou menos e escala de tempo da ordem de uma hora ou menos. A escala vertical é limitada pela profundidade da Camada Limite Planetária (CLP)[†], Camada de Mistura, nuvens convectivas, ou qualquer outro sistema com o qual eles possam estar associados. A micrometeorologia é o estudo de tais fenômenos de pequena escala e, é a área de interesse neste trabalho.

A micrometeorologia sempre confiou muito em experimentos de campo para aprender mais sobre a camada limite [Stull, 1988]. Na década de 1950 foram realizadas as primeiras medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e variáveis meteorológicas na tentativa de encontrar relações empíricas entre a difusão atmosférica e os fatores meteorológicos. O experimento mais importante foi o de Prairie Grass realizado nos Estados Unidos [Barad, 1958]. Outro experimento de repercussão internacional ocorreu na década de 1980 em Copenhagem [Gryning, 1981]. Estes experimentos determinaram o campo de concentração na superfície terrestre a uma distância de 50 a 6000 metros a partir da fonte (Prairie-Grass de 50 a 800 *m* e Copenhagem até 6000 *m*). Muitos outros experimentos foram realizados em várias partes do mundo e alguns deles podem ser encontrados em [Bowne e Londergan, 1981], [Gryning e Lyck, 1984], [Doran e Horst, 1985] e [Siversten e Böhler, 1985]. O grande problema é que as observações de campo são muitas vezes dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos envolvidos.

Os modelos matemáticos são um instrumento particularmente útil no entendimento dos fenômenos que controlam o transporte, a dispersão e a transformação físico-química dos poluentes imersos na atmosfera. Estes modelos, que permitem uma validação do nível observado de poluentes e a causa efeito das emissões, podem ser utilizados para evitar eventos críticos de poluição, discriminar os efeitos de várias fontes e de vários poluentes, estimar o impacto de novas fontes, e, da mesma forma, validar o estado da qualidade do ar em um determinado lugar. Para determinar a concentração de poluentes na atmosfera existem dois modelos matemáticos para simular numericamente esses fenômenos: Euleriano e Lagrangiano. A principal diferença entre os dois modelos é que o sistema de referência Eu-

*A troposfera é a região da atmosfera que vai desde a superfície até cerca de 11 *km* de altura. Está dividida em duas partes: uma camada adjacente à superfície, chamada de Camada Limite Planetária (CLP), e a camada acima desta, que é denominada Atmosfera Livre [Stull, 1988].

[†]Também chamada de Camada Limite Atmosférica [Stull, 1988].

leriano é fixo em relação à Terra, enquanto o Lagrangiano segue a velocidade instantânea do fluido [Anfossi, 2005]. Neste trabalho utiliza-se o modelo Euleriano.

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera, emprega-se, normalmente, a equação de advecção-difusão, que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade de movimento, sendo que os modelos Eulerianos de dispersão têm como característica a solução desta. Sob certas condições, pode-se obter expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma [Pasquill e Smith, 1983].

Na literatura encontram-se disponíveis inúmeros trabalhos que concentram-se no estudo da dinâmica da CLP, em que são considerados diversos modelos para fechamento das equações dos fluxos turbulentos tais como: modelos de primeira ordem ou teoria K, segunda ordem ou superior.

A maneira mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de advecção-difusão é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) que, em analogia com a difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. O fechamento da turbulência tradicional não leva em conta o caráter não-local da turbulência da Camada Limite Convectiva (CLC)[‡]. Ao considerar o fechamento da turbulência não-Fickiano pode ser levada em conta a assimetria no processo da dispersão de poluentes atmosféricos. Assim, diferentemente do modo tradicional, pode ser utilizada uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio fazendo com que apareça um termo adicional na equação que é associado ao termo de contragradiente [Wyngaard e Weil, 1991] [van Dop e Verver, 2001] .

Atualmente muitos estudos são realizados para resolver a equação de advecção-difusão e, na sua grande maioria, estão voltados à condição de vento forte e moderado. Uma das situações críticas para a dispersão de poluentes e que ocorre frequentemente é a condição de vento fraco ($< 2m/s$). Nessas condições os poluentes não são capazes de dispersarem-se para longe da fonte e então as áreas próximas são as mais afetadas. A estrutura da

[‡]É a camada que começa a se formar depois do nascer do sol, dura o dia todo e cessa antes do pôr do sol [Stull, 1988].

CLP não é adequadamente determinada nas condições de ventos fracos devido aos limitados dados observados existentes [Sharan et al., 2003]. A complexidade da camada limite cresce com a diminuição dos ventos e aumenta o grau de instabilidade atmosférica. Além disso, instrumentos de medidas convencionais não funcionam adequadamente abaixo de algumas velocidades críticas, e as tradicionais técnicas de modelagem são inadequadas para trabalhar em condições de ventos fracos [Zannetti, 1990]. Aproximações clássicas baseadas em modelos convencionais como pluma Gaussiana com algumas hipóteses trabalham razoavelmente bem durante a maioria dos regimes meteorológicos, exceto para ventos fracos e em condições variáveis no tempo. Isso ocorre devido:

- à difusão na direção do vento, que é negligenciada em relação a advecção;
- à concentração, que é inversamente proporcional à velocidade do vento;
- à falta de estimativas apropriadas dos parâmetros de dispersão em condições de ventos fracos.

Na presente tese é apresentada uma nova solução analítica para a equação de advecção-difusão bidimensional transiente para simular a dispersão de poluentes na atmosfera. Para tanto, a equação de advecção-difusão é resolvida pela combinação da transformada de Laplace e da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) [Buske, 2004], [Moreira et al., 2005c], [Wortmann et al., 2005].

Neste trabalho o fechamento da turbulência para os casos Fickiano e não-Fickiano é considerado. É investigado o problema de modelagem da dispersão de poluentes em condições de ventos fortes e fracos considerando-se, para o caso de ventos fracos, a difusão longitudinal na equação de advecção-difusão. Além disso, foi incluída no modelo, a velocidade vertical e avaliada sua influência considerando-se o campo de velocidades constante e geradas via LES (*Large Eddy Simulation*) para simular uma camada limite turbulenta mais realística. Os resultados obtidos por essa metodologia são validados com resultados experimentais disponíveis na literatura.

Esta tese encontra-se estruturada em seis capítulos e dez apêndices. No Capítulo 2, apresenta-se uma revisão bibliográfica motivando a realização deste trabalho. Descreve-se no Capítulo 3 o modelo matemático de poluição atmosférica e o método de solução da equação de advecção-difusão bidimensional transiente. Já no Capítulo 4, são descritos os

experimentos e as parametrizações da turbulência utilizadas para gerar os resultados deste trabalho. Os resultados numéricos e estatísticos obtidos com o modelo são apresentados no Capítulo 5. Encontram-se no Capítulo 6 a conclusão e as perspectivas de trabalhos futuros. Nos Apêndices I a X encontram-se os principais resultados desta tese que foram publicados em congressos e revistas nacionais e internacionais.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Uma grande variedade de soluções numéricas da equação de advecção-difusão pode ser encontrada na literatura ([Nieuwstadt e Van Ulden, 1978], [Lamb, 1978], [Carvalho, 1996]). Embora as soluções numéricas estejam muito avançadas, a busca de soluções analíticas para problemas de dispersão ainda é uma das principais direções de pesquisa nesta área, pois estas levam em conta explicitamente todos os parâmetros de um problema, de modo que suas influências podem ser confiavelmente investigadas e facilmente obter-se o comportamento assintótico da solução, que é as vezes é difícil gerar via cálculos numéricos.

Para motivar a realização deste trabalho, apresenta-se neste capítulo uma revisão bibliográfica sobre as soluções analíticas da equação de advecção-difusão aplicadas à dispersão de poluentes encontradas na literatura.

Existem algumas soluções específicas, as conhecidas soluções Gaussianas. Os modelos baseados neste tipo de solução (chamados modelos Gaussianos) usam parâmetros de dispersão empíricos de modo a forçar a solução Gaussiana a representar o campo de concentração. Entretanto, existem modelos baseados nas soluções analíticas não-Gaussianas.

[Roberts, 1923] apresentou uma solução bidimensional, para fontes ao nível do solo, nos casos em que a velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical K_z (m^2/s) seguem leis de potência como uma função da altura. Isto é:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \quad ; \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (2.1)$$

sendo z_1 a altura na qual u_1 e K_1 são avaliados, m e n variam entre 0 e 1.

Em 1955 uma solução bidimensional válida para fontes elevadas, mas somente com perfis lineares de K_z , foi obtida por [Rounds, 1955]. A equação bidimensional de transporte e difusão, sendo u e K_z funções de potência da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt (1- expoente de K_z) foi resolvida por [Smith, 1957b]. [Smith, 1957a] também apresentou uma solução para o caso de u constante, mas com o

seguinte K_z :

$$K_z = K_0 z^\alpha (h - z)^\beta \quad (2.2)$$

em que K_0 é uma constante, α e β valem 0 ou 1 de acordo com a altura da camada limite h .

Em [Scriven e Fisher, 1975], é apresentada a solução com u constante e K_z como

$$K_z \equiv z \text{ para } 0 \leq z \leq z_t \text{ e } K_z = K_z(z_t) \text{ para } z_t \leq z \leq h \quad (2.3)$$

na qual z_t (m) é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada superficial). Esta solução permite (como condições de contorno) um fluxo líquido de material para o solo:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = V_g C \quad (2.4)$$

em que V_g é a velocidade de deposição (m/s). A solução de Scriven e Fisher tem sido amplamente usada no Reino Unido para o transporte de longa escala de poluentes. Em [Fisher, 1975] a deposição de enxofre sobre o Reino Unido, Suécia e o resto da Europa foi comparado e verificou-se que a contribuição Britânica na deposição sobre a parte rural da Suécia foi aproximadamente metade da contribuição da Suécia.

Em 1975, Yeh e Huang e Beryland publicaram soluções bidimensionais para fontes elevadas com u e K_z seguindo perfis de potência, mas para uma atmosfera sem contorno superior ($K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$). Estas soluções foram obtidas em termos de funções de Green. Já em 1978, Demuth apresentou uma solução, dada em termos de funções de Bessel, para uma camada verticalmente limitada ($K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z = h$). A solução de Berlyand tem sido usada na Rússia. Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de [Yeh e Huang, 1975], [Berlyand, 1975] e [Demuth, 1978] têm sido adotados: KAPPAG [Tirabassi et al., 1986], KAPPAG-LT [Tirabassi et al., 1989], CISP [Tirabassi e Rizza, 1992] e MAOC [Tirabassi e Rizza, 1993].

Com a aplicação da teoria da similaridade de *Monin-Obukhov* à difusão, [Van Ulden, 1978] derivou uma solução para a difusão vertical a partir de fontes contínuas próximas ao solo, supondo que u e K_z seguem os perfis de similaridade. Seus resultados são similares aos de Roberts, mas ele obteve um modelo para fontes não superficiais, mas aplicável para fontes dentro da camada superficial. Um modelo que utiliza esta solução é o SPM [Tirabassi

e Rizza, 1995].

Nieuwstadt apresentou uma solução para um problema unidimensional dependente do tempo, utilizando os polinômios de Legendre. Esta solução [Nieuwstadt, 1980] foi um caso particular da solução de [Smith, 1957a]. Um ano depois, [Nieuwstadt e Haan, 1981] estenderam esta solução, utilizando os polinômios de Jacobi, para o caso de crescimento da altura da camada limite.

Em 1996 foram desenvolvidos por Sharan et al. [Sharan et al., 1996a] [Sharan et al., 1996b] modelos matemáticos para a dispersão tridimensional atmosférica. Foram utilizados coeficientes de difusão constantes e parametrizações em termos da distância da fonte respectivamente. As soluções são apresentadas em termos de funções de Bessel e combinações lineares da função de Green.

[Lin e Hildeman, 1997] estenderam as soluções de Demuth para o caso de deposição seca no solo. Estas soluções foram apresentadas em termos de funções modificadas de Bessel. Recentemente [Brown et al., 1997] derivaram, a partir da solução de Yeh e Huang, equações para liberações de fontes pontuais para os primeiros quatro momentos da distribuição de concentração vertical e, para a magnitude e localização da concentração máxima no solo.

Sharan e Yadav usaram um modelo de difusão incluindo a difusão longitudinal e coeficientes de difusão variáveis para descrever o processo de dispersão em condições de ventos fracos. Estes coeficientes de difusão foram considerados como uma função linear da distância da fonte. O modelo de [Cirillo e Poli, 1992] forneceu resultados idênticos comparados com os de [Sharan e Yadav, 1998] para o experimento de INEL (*Idaho National Engineering Laboratory*). [Sagendorf e Dickson, 1974] usaram um modelo Gaussiano e dividiram cada período de computação em intervalos de tempo de dois minutos, somando os resultados para determinar a concentração total. Mais recentemente, [Sharan e Modani, 2007] melhoraram o modelo de [Sharan et al., 1996a] usando uma condição de contorno finito no limite superior.

Podemos observar que diversos métodos são aplicados para encontrar soluções analíticas da equação de advecção-difusão. Neste trabalho, são de interesse particular as soluções analíticas obtidas através da aplicação da técnica da transformada de Laplace e da técnica da transformada integral generalizada. O teorema de Cauchy-Kowalewsky garante a existência e unicidade de uma solução analítica para a equação de advecção-difusão [Courant e Hilbert, 1989]. Sabemos que as soluções analíticas podem ser expressas ou na forma integral, como

é o caso da solução obtida aplicando a transformada de Laplace, ou com uma formulação em série, como na técnica da transformada integral generalizada. Estas soluções são equivalentes [Moreira et al., 2008] e assim, a seguir, daremos enfoque aos modelos que utilizam essas técnicas para obter a solução analítica da equação de advecção-difusão.

[Moura et al., 1995] propuseram uma solução analítica da equação de advecção-difusão unidimensional dependente do tempo, para a dispersão de contaminantes passivos em uma Camada Limite Estável (CLE). Para a obtenção dos resultados, foi aplicada a transformada de Laplace e usou-se um coeficiente de difusão constante dado por [Degrazia e Moraes, 1992]. Após, [Pires, 1996] apresentou uma solução similar para uma CLC, utilizando o coeficiente difusivo de [Degrazia et al., 1995]. [Moreira, 1996] foi além, propondo a solução para o caso bidimensional estacionário usando o mesmo artifício dos trabalhos anteriores também na CLC. A técnica utilizada recebe o nome de ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*). A idéia básica do método ADMM é baseada na discretização da CLP em N subcamadas, em que em cada subcamada a equação de advecção-difusão é resolvida pela técnica da transformada de Laplace considerando-se valores médios para o coeficiente de difusão e perfil de vento. Assim, o problema com coeficiente variável foi substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes (coeficientes médios), acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminante nas interfaces. A solução semi-analítica é dada em forma integral.

O método ADMM foi utilizado em 2003 por [Ferreira Neto, 2003] para estimar o campo de concentração de poluentes na CLC e resolver a equação de advecção-difusão bidimensional transiente. Resultados deste trabalho também são apresentados em [Moreira et al., 2005b]. Em 2004, [Buligon, 2004] e [Costa, 2004], [Costa et al., 2004] estenderam o método ADMM resolvendo, respectivamente, a equação unidimensional transiente e bidimensional estacionária considerando o fechamento não-Fickiano da turbulência. Resultados destes trabalhos também foram apresentados em [Moreira et al., 2004] e [Buligon et al., 2006]. [Moreira et al., 2005a] apresentaram uma nova solução para o método ADMM considerando condições de vento fraco. Os experimentos de INEL e ITT Delhi foram utilizados. A mesma solução foi aplicada para simular a dispersão de tritium do experimento de Angra dos Reis [Moreira et al., 2005d]. No ano de 2006 foi apresentada uma revisão completa sobre a técnica ADMM [Moreira et al., 2006b].

A técnica da transformada integral generalizada (GITT) é um método híbrido (analítico-numérico) [Cotta, 1993], [Cotta e Mikhaylov, 1997] derivado da transformação integral clássica [Mikhaylov e Özisik, 1984] para problemas lineares de difusão. A GITT vem sendo utilizada com grande êxito na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e advecção-difusão [Cheroto et al., 1999], [Liu et al., 2000], [Magno et al., 2002], [Pereira et al., 2002], [Alves et al., 2002], [Heinen, 2005], [Cotta e Barros, 2007].

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 auxiliar. 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 (EDO), que, uma vez solucionado, é facilmente invertido para a obtenção do resultado da equação original. A solução do sistema EDO (também chamado de problema transformado) resultante da aplicação da GITT é feita numericamente com o auxílio de sub-rotinas numéricas.

A GITT tem como única aproximação o truncamento do somatório infinito da chamada fórmula da inversa da GITT, que fornece o resultado da equação governante do problema original. Esse procedimento permite o controle automático do erro a partir da ordem de truncamento do referido somatório.

A principal diferença em resolver a equação de advecção-difusão utilizando a GITT em relação à solução obtida pelo método ADMM [Moreira et al., 2006b] reside no fato de que com a técnica da GITT não há necessidade de discretização do domínio.

É vasta a literatura a respeito da GITT e a sua aplicação em problemas de poluição atmosférica vem crescendo muito nos últimos anos: Em 1999, [Moura, 1999] resolveu analiticamente a equação de advecção-difusão estacionária bidimensional e tridimensional, numa geometria cartesiana, em que o coeficiente de difusão utilizado era constante e válido na CLC. Em 2000, Cataldi et al. desenvolveram um modelo matemático que obtém a solução da equação de difusão atmosférica para uma fonte pontual instantânea, e Ribeiro et al. simularam computacionalmente a dispersão de poluentes com uma fonte contínua e em condições de neutralidade atmosférica. Os estudos de [Cataldi et al., 2000] e [Ribeiro et al., 2000] concentraram-se na região da camada limite superficial.

Em 2000, Wortmann et al. desenvolveram uma solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável. Neste trabalho, o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) resultante da aplicação da GITT (problema transformado) foi resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Tal procedimento recebeu o nome de GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*)* e foi uma novidade em relação ao uso típico da GITT (na GITT a solução do problema transformado é numérica [Cotta, 1993], [Cotta e Mikhaylov, 1997]). Podemos resumir a obtenção da solução do problema via GILTT da seguinte forma: procede-se à transformação integral normalmente até a obtenção do sistema EDO. Aplica-se a transformada de Laplace neste sistema, o que resulta em um sistema algébrico. A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após a diagonalização, esta matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico. Esta inversão é analítica e sem custo computacional por ser de uma matriz diagonalizada. A transformada de Laplace também é. Assim, a solução analítica do problema transformado é finalmente encontrada.

Em 2002, [Ribeiro et al., 2002] avaliaram o transporte de poluentes em toda a região da camada limite atmosférica utilizando a GITT. [Velloso et al., 2003] utilizaram a GITT num modelo que permite simular mecanismos de transporte na atmosfera, incluindo os processos de deposição de poluentes. Em 2003, [Storch e Pimentel, 2003] simularam a dispersão de poluentes através da equação difusiva-advectiva. Para a obtenção dos resultados numéricos, foi considerado o transporte turbulento apenas na direção vertical. [Velloso et al., 2004] apresentaram uma simulação do transporte de poluentes na atmosfera considerando um modelo bidimensional transiente incluindo o efeito da deposição de poluentes.

Ainda no ano de 2003, [Buske et al., 2003] apresentaram a derivação matemática de um problema bidimensional difusivo-advectivo estacionário, que modela a dispersão de poluentes na CLP utilizando a idéia apresentada por [Wortmann et al., 2000]. O método GILTT foi utilizado. Os resultados deste problema são apresentados em [Buske, 2004] e [Wortmann et al., 2005] e comparados com os modelos ADMM ([Vilhena et al., 1998]) e

*A GITT com solução analítica do problema transformado, via transformada de Laplace e diagonalização, recebeu o nome GILTT em 2004 durante o desenvolvimento do trabalho de mestrado da aluna Daniela Buske. Seus autores foram os professores Dr. Marco Túlio M. B. de Vilhena e Dr. Sérgio Wortmann.

KAPPA-G ([Tirabassi et al., 1986]). Utilizou-se um coeficiente difusivo variável com a altura dado em [Degrazia et al., 1997]. Em [Moreira et al., 2005c] utilizou-se o mesmo modelo para um coeficiente difusivo dependente da distância da fonte dado em [Degrazia et al., 2001]. Em [Buske et al., 2005b] o modelo foi testado para condições estáveis, utilizando-se o experimento de Hanford. Ainda no ano de 2005, [Storch e Pimentel, 2005] simularam a dispersão de poluentes na atmosfera usando o método da contagem de sinal (*Sign-Count*) para resolver o problema transformado da GITT. [Buske et al., 2005a] compararam os métodos ADMM e GILTT utilizando os experimentos de Cabauw e Minnessota na equação de advecção-difusão unidimensional transiente.

Ainda em 2005, a técnica GITT foi utilizada juntamente com o método ADMM por [Costa et al., 2005] para resolver a equação de advecção-difusão tridimensional nascendo assim o método GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*). Resultados deste modelo também são apresentados em [Costa et al., 2006]. A idéia básica da solução do problema consiste na transformação do problema tridimensional num problema bidimensional pela aplicação da técnica GITT na variável y . O problema bidimensional é então resolvido pelo método ADMM [Moreira et al., 2006b]. O experimento de Copenhagen foi utilizado. O termo de difusão longitudinal não foi considerado.

Também, no ano de 2006, [Buske et al., 2006d] faz um estudo do modelo GILTT utilizando várias parametrizações da turbulência. No ano de 2007 o método GIADMT foi utilizado para o fechamento não-Fickiano da turbulência em [Costa et al., 2007]. [Pereira, 2007] resolveu um problema a *puff* bidimensional transiente utilizando os métodos ADMM e GILTT e realizando um estudo comparativo entre os resultados obtidos com ambas as técnicas. Esta foi a primeira vez que os modelos ADMM e GILTT foram aplicados a uma fonte pontual.

Como se pode ver, são muitos os intuitos de se chegar a uma solução mais abrangente da equação de advecção-difusão. Espera-se, com o presente trabalho, uma evolução na obtenção de soluções analíticas desta equação, principalmente devido ao acréscimo do termo de difusão longitudinal e do fechamento não-Fickiano da turbulência, não considerados nos trabalhos anteriores que utilizaram a técnica GILTT.

3. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO BIDIMENSIONAL PELO MÉTODO GILTT

Toda substância emitida na atmosfera se dispersa através da difusão turbulenta causada pela variação de temperatura e do vento na camada limite. Esta variação é provocada pelo aquecimento e/ou resfriamento da superfície da terra, fazendo com que o transporte das partículas seja dominado na horizontal pelo vento médio (advecção) e na vertical pela turbulência. Como consequência, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera é, geralmente, descrito pela equação de advecção-difusão.

A estimativa da concentração de poluentes atmosféricos é determinada pela elaboração de modelos de dispersão. Um modelo de dispersão é uma expressão matemática que representa os efeitos da atmosfera sobre os poluentes atmosféricos. De acordo com os problemas ocasionados pela poluição do ar é necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes para prever as possíveis consequências do impacto da poluição sobre os diversos ecossistemas.

Neste capítulo, apresentam-se a formulação matemática de um modelo para a dispersão de poluentes e a sua solução. O equacionamento matemático é dado pela equação de advecção-difusão e segue o desenvolvimento realizado nos trabalhos de [Buske, 2004], [Moreira et al., 2005c], [Wortmann et al., 2005], [Moreira et al., 2006a], [Buske et al., 2006a], [Buske et al., 2006c], [Buske et al., 2007a], [Buske et al., 2007b], [Buske et al., 2007c], [Buske et al., 2007d] e [Buske et al., 2007e].

3.1 O modelo físico-matemático

O equacionamento da difusão atmosférica pode ser obtido pela aplicação da equação de conservação de massa (equação da continuidade). Considerando uma espécie genérica C que se conserve na atmosfera temos que:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} + S = 0. \quad (3.1)$$

Aqui S é o termo fonte e U , V e W representam as componentes das velocidades instantâneas do vento (m/s) nas direções x , y e z respectivamente.

Fluxos turbulentos são altamente irregulares, quase randômicos e imprevisíveis de detalhes. A turbulência é manifestada de forma irregular, randômica como as flutuações na velocidade, temperatura e concentrações escalares em torno dos seus valores principais. Em modelos matemáticos de difusão e turbulência, todas as variáveis de interesse são geralmente expressadas como somas de suas médias de *ensemble* (denotado aqui por uma barra superior) e flutuações (denotadas pela linha) com o objetivo de se definir equações para a evolução média das variáveis [Arya, 2003]:

$$U = \bar{u} + u'; \quad V = \bar{v} + v'; \quad W = \bar{w} + w'; \quad C = \bar{c} + c'. \quad (3.2)$$

Este processo é também conhecido como decomposição de Reynolds [Stull, 1988].

Substituindo a equação (3.2) na equação (3.1) e utilizando as regras da decomposição de Reynolds [Arya, 2003], a equação de advecção-difusão transiente que descreve concentrações a partir de uma fonte contínua pode ser escrita como [Stull, 1988]:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = -\frac{\overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\overline{w'c'}}{\partial z} + S, \quad (3.3)$$

na qual \bar{c} denota a concentração média do contaminante passivo (g/m^3) e \bar{u} , \bar{v} e \bar{w} são as componentes cartesianas do vento médio (m/s) orientado nas direções x ($-\infty < x < \infty$), y ($-\infty < y < \infty$) e z ($0 < z < h$). Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$, $\overline{w'c'}$ representam, respectivamente, o fluxo turbulento do contaminante (g/sm^2) nas direções longitudinal, lateral e vertical, S é o termo fonte. O termo de difusão molecular pode ser negligenciada porque a turbulência domina os processos de transporte e dispersão.

Porém a equação (3.3) apresenta quatro variáveis desconhecidas (os fluxos turbu-

lentos e a concentração \bar{c}) e, dessa forma, não pode ser resolvida diretamente levando-nos ao chamado problema de fechamento da turbulência [Stull, 1988].

3.1.1 O problema de fechamento da turbulência

Uma das maneiras mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de advecção-difusão (3.3) é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K^*) que, em analogia com a lei de Fick da difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média [Seinfeld e Pandis, 1997]. Assim,

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}, \quad (3.4)$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}, \quad (3.5)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (3.6)$$

em que K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta (m^2/s) nas direções x , y e z respectivamente. No fechamento de primeira ordem, toda a informação da complexidade da turbulência está contida nesses coeficientes de difusão.

As equações (3.4), (3.5) e (3.6), combinadas com a equação da continuidade de massa (3.3), nos levam à equação de advecção-difusão. Assim, para um sistema de coordenadas Cartesianas, em que a direção x coincide com a direção do vento médio, a equação de advecção-difusão pode ser escrita como [Blackadar, 1997]:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + S, \quad (3.7)$$

na qual K_x , K_y , K_z são os coeficientes de difusão turbulenta longitudinal, lateral e vertical,

*A ideia básica do fechamento de primeira ordem, ou teoria K como é geralmente chamada, tem sido geralmente creditada a Schmidt (1925) (*Der Massenaustausch in freier Luft und verwandte Erscheinungen. Henri Grand, Hamburg*) e Prandtl (1925) (*Über die ausgebildete Turbulenz. Zeitschr. Für angew. Math. u. Mech., 5, 136*), mas de acordo com Prandtl os principais conceitos retornam a Boussinesq (1897) (*Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides. Gauthier-Villars, Paris*).

respectivamente.

Do lado esquerdo da equação (3.7), o primeiro termo é o termo dependente do tempo contabilizando situações não-estacionárias, e os três termos restantes descrevem o transporte devido à advecção. Já no lado direito, os três primeiros termos representam a difusão turbulenta. A equação de advecção-difusão (3.7) forma a base da maioria dos modelos de dispersão de poluentes na atmosfera e permite coordenadas temporal e espacial para a difusão anisotrópica e para a variação dos coeficientes de difusão como uma função da concentração. A justificativa da equação (3.7) para concentrações médias é dada em [Seinfeld e Pandis, 1997] e [Arya, 1999].

A simplicidade da teoria K de difusão turbulenta conduziu ao uso difundido desta teoria como base matemática para simular a dispersão de poluentes (poluição em campo aberto, urbano, fotoquímico, etc). A teoria K funciona bem quando a difusão do material dispersado é muito maior que o tamanho dos turbilhões envolvidos no processo difusivo, ou seja, para grandes tempos de viagem [Mangia et al., 2002]. Mas o fechamento K tem seus próprios limites [Arya, 1999]. Em contraste com a difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente da escala. Isto significa que a taxa de difusão de uma pluma de material geralmente depende das dimensões da pluma e da intensidade da turbulência. Conforme a pluma cresce, turbilhões maiores são incorporados no processo de expansão, de modo que uma fração progressivamente maior da energia cinética turbulenta está disponível para a expansão da pluma [Arya, 1999].

Outro problema é que a hipótese de transporte por gradiente é inconsistente com as características da difusão turbulenta na parte superior da camada de mistura, em casos convectivos em que ocorrem fluxos de material contragradiente [Deardoff e Willis, 1975].

Há algumas décadas, já se percebeu que na parte superior da CLC o fluxo de temperatura potencial é ao contrário do gradiente de perfil de temperatura potencial do meio [Ertel, 1942] [Priestly e Swinbank, 1947] [Deardoff, 1966]. O gradiente de temperatura potencial do meio e o fluxo trocam de sinal em diferentes níveis introduzindo uma certa região na CLC. Isto entra em contraste com o fechamento da turbulência tradicional de primeira ordem, pois ele não leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência da CLC. Para descrever e caracterizar a difusão nesta região, [Ertel, 1942], [Deardoff, 1966] e [Deardoff, 1972] propuseram modificar a aplicação usual do fluxo-gradiente na aproximação da teoria

K de forma que:

$$\overline{w'c'} = -K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right), \quad (3.8)$$

na qual γ representa o termo de contragradiente.

Muitos esquemas e parametrizações para o termo de contragradiente têm sido desenvolvidos ([Wyngaard e Brost, 1984], [Fiedler e Moeng, 1985], [Holtslag e Moeng, 1991], [Wyngaard e Weil, 1991], [Holtslag e Boville, 1993], [Hamba, 1993], [Robson e Mayocchi, 1994], [Zilitinkevich et al., 1999], [de Roode et al., 2004]). Neste trabalho utilizamos as parametrizações propostas por [van Dop e Verver, 2001] que são baseadas no trabalho de [Wyngaard e Weil, 1991]. O problema de fechamento da turbulência na equação de advecção-difusão foi modificado considerando-se uma equação genérica para a difusão turbulenta de forma que o fluxo vertical turbulento de concentração mais a sua derivada é proporcional ao gradiente médio.

A equação genérica para a difusão turbulenta sugerida por [van Dop e Verver, 2001], independente do tempo, é escrita como

$$\left(1 + \left(\frac{S_k \sigma_w T_{lw}}{2} \right) \frac{\partial}{\partial z} \right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (3.9)$$

em que S_k é a assimetria (*skewness*), σ_w é o desvio padrão da velocidade turbulenta vertical (m/s) e T_{lw} é a escala de tempo Lagrangeana (s). Estes parâmetros são conhecidos e as expressões utilizadas nesta tese podem ser encontradas no capítulo 4.

Já a equação genérica para a difusão turbulenta sugerida por [van Dop e Verver, 2001], dependente do tempo, é escrita como

$$\left(1 + \left(\frac{S_k \sigma_w T_{lw}}{2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial t} \right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (3.10)$$

na qual τ é o tempo de relaxação (s).

Desta forma o problema de fechamento da turbulência é solucionado sem obedecer à lei de Fick, sendo chamado de fechamento não-Fickiano. Este fechamento nos permite investigar o efeito dos turbilhões mais energéticos em diferentes alturas e o efeito do transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes considerando de um modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta. Agora, a turbulência não é mais

modelada apenas no coeficiente de difusão K_α .

O segundo termo do lado esquerdo das equações (3.9) e (3.10) leva em conta o caráter não-local da dispersão. O caráter local indica que apenas partículas de ar vizinhas se relacionam, enquanto que no não-local quaisquer partículas podem se relacionar entre si. A Figura (3.1.1) mostra um diagrama destes processos. O fato de o caráter não-local da dispersão ser considerado faz com que os modelos não-Fickianos também sejam chamados de modelos com fechamento não-local.

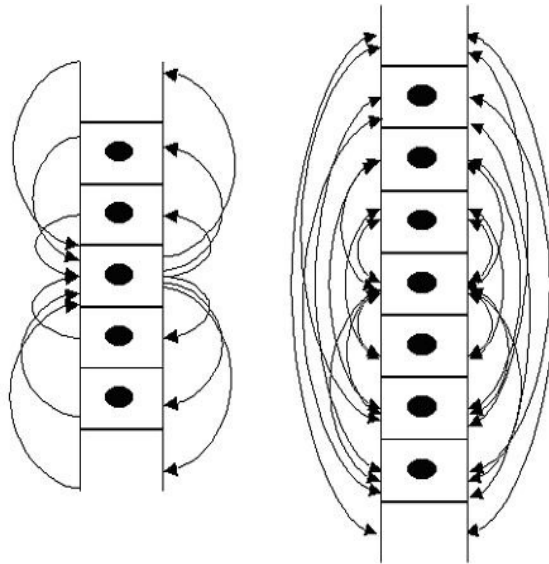


Figura 3.1 – Esquema ilustrativo do efeito local (à esquerda) e efeito não-local (à direita) na dispersão do poluente. O caráter local indica que apenas partículas vizinhas se relacionam, enquanto que no não-local quaisquer partículas podem se relacionar entre si. Fonte: página 226 de [Stull, 1988].

3.1.2 A equação de advecção-difusão bidimensional

Consideremos um experimento de dispersão de poluentes na atmosfera, no qual uma fonte aérea libera um traçador químico. Este é abandonado sem empuxo, a partir de uma torre com altura H_s , que emite poluentes com intensidade Q a uma taxa constante conforme a Figura (3.2).

Combinando-se as equações (3.4), (3.5) e (3.10) com a equação (3.3) e integrando-se lateralmente (em y) a equação resultante, tem-se:

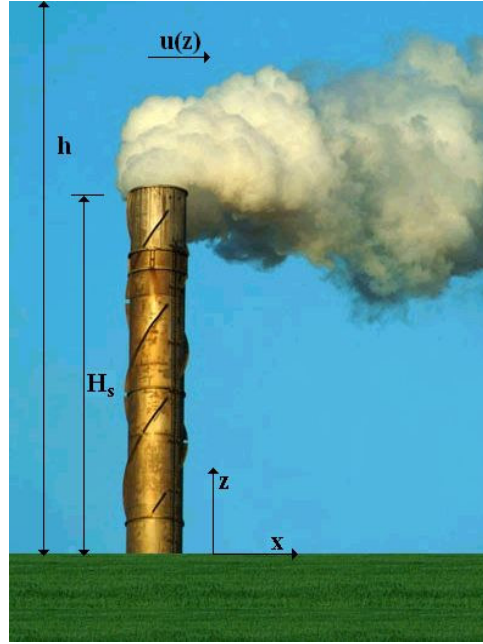


Figura 3.2 – Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) + \\
 + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) + \\
 - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) - \tau \frac{\partial^2 c(x, z, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\tau \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) + \\
 - \frac{\partial}{\partial t} \left(\tau \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) \right) + \\
 + \frac{\partial}{\partial t} \left(\tau \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) \right), \tag{3.11}
 \end{aligned}$$

na qual $\beta = 0,5 S_k \sigma_w T_{l_w}$. A equação (3.11) está sujeita às condições de contorno

$$K_z \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0, \quad z = h, \tag{3.11a}$$

à condição de fonte

$$\bar{u}c(0, z, t) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0, \quad (3.11b)$$

à condição inicial

$$c(x, z, 0) = 0 \quad \text{em} \quad t = 0, \quad (3.11c)$$

e ainda para longe da fonte temos que

$$\frac{\partial c(L_*, z, t)}{\partial x} = 0 \quad \text{em} \quad x = L_*, \quad (3.11d)$$

em que L_* é longe da fonte (m) e $c(x, z, t)$ denota a concentração média integrada lateralmente e é representado por

$$c(x, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{c}(x, y, z, t) dy,$$

Q é a intensidade da fonte (g/s), h é a altura da CLP (m), H_s a altura da fonte (m) e δ representa a função delta de Dirac. Neste trabalho consideramos que os termos u , w , K_x e K_z são funções da altura z , podendo também serem variáveis com a distância x .

3.2 Solução da equação de advecção-difusão bidimensional

A equação de advecção-difusão bidimensional (3.11) é resolvida aplicando a transformada de Laplace na variável temporal e a solução do problema estacionário resultante pelo método GILTT. Os passos principais do método GILTT compreendem: construção de um problema auxiliar de Sturm-Liouville associado ao problema estacionário, determinação da técnica da transformada integral em uma série truncada usando como base as autofunções do problema de Sturm-Liouville resolvido, substituição desta expansão no problema original. Tomando momentos, obtemos a equação transformada da GILTT, que consiste de uma equação diferencial ordinária matricial que é resolvida analiticamente pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização. Finalmente, a concentração dependente do tempo é obtida invertendo-se numericamente a solução do problema estacionário.

3.2.1 Aplicação da transformada de Laplace na variável temporal

De forma a resolver o problema (3.11), usando-se a vantagem de conhecermos a solução do problema estacionário com advecção na direção x pelo método GILTT [Wortmann et al., 2005], aplicamos a técnica da transformada de Laplace na equação (3.11), na variável t . Este procedimento nos leva ao problema estacionário:

$$\begin{aligned}
r \bar{C}(x, z, r) - c(x, z, 0) + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right) + \\
+ \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (\beta r \bar{C}(x, z, r)) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{u} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right) + \\
- \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{w} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} \right) - \tau r^2 \bar{C}(x, z, r) - \tau \bar{u} r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + \\
- \tau \bar{w} r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right) \right) + \\
\tau r \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right), \tag{3.12}
\end{aligned}$$

no qual \bar{C} denota a transformada de Laplace na variável t ($\bar{C}(x, z, r) = \mathfrak{L}\{c(x, z, t); t \rightarrow r\}$) e r é complexo.

Lembrando-se que $c(x, z, 0) = 0$, a equação (3.12) é reescrita como:

$$\begin{aligned}
r \bar{C}(x, z, r) + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right) + \\
+ \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (\beta r \bar{C}(x, z, r)) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{u} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right) + \\
- \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{w} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} \right) - \tau r^2 \bar{C}(x, z, r) - \tau \bar{u} r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + \\
- \tau \bar{w} r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right) \right) + \\
\tau r \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right). \tag{3.13}
\end{aligned}$$

3.2.2 Solução via GILTT do problema estacionário

De forma a simplificar a escolha do chamado problema auxiliar (problema de Sturm-Liouville), cuja escolha é feita como procedimento de praxe no uso da GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) [Cotta e Mikhaylov, 1997], [Cotta, 1993], a equação (3.13) é reescrita fazendo-se uso da regra da derivada do produto. Assim,

$$\begin{aligned}
\bar{u} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} &= K_x \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial x^2} + K'_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + \\
&+ K_z \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial z^2} + K'_z \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} - \beta r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} - (\beta r)' \bar{C}(x, z, r) + \\
&- \beta \bar{u} \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial z \partial x} - (\beta \bar{u})' \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} - \beta \bar{w} \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial z^2} - (\beta \bar{w})' \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} + \\
&- \tau r^2 \bar{C}(x, z, r) - \tau \bar{u} r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} - \tau \bar{w} r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} + \beta K_x \frac{\partial^3 \bar{C}(x, z, r)}{\partial z \partial x^2} + \\
&+ (\beta K_x)' \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial x^2} + \beta K'_x \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial z \partial x} + (\beta K'_x)' \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + \\
&+ \tau r K_x \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial x^2} + \tau r K'_x \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} - r \bar{C}(x, z, r).
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Dividindo-se a equação anterior por K_z , o termo Laplaciano em z ($\frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, r)}{\partial z^2}$) é utilizado para determinar o seguinte problema de Sturm-Liouville:

$$\zeta_n''(z) + \lambda_n^2 \zeta_n(z) = 0 \quad em \quad 0 < z < h, \tag{3.15}$$

cujas respectivas condições de contorno são as mesmas do problema original, ou seja,

$$\zeta_n'(z) = 0 \quad em \quad z = 0 \text{ e } z = h. \tag{3.15a}$$

A solução do problema auxiliar (equação (3.15)) é analítica, encontrando-se tabulada no livro de Özisik [Özisik, 1974], e é escrita como

$$\zeta_n(z) = \cos(\lambda_n z), \tag{3.16}$$

em que $\lambda_n = n\pi/h$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) são as raízes positivas da expressão $\sin(\lambda_n h) = 0$.

Análogo ao sistema de equações lineares, os valores de λ_n para os quais o sistema de Sturm-Liouville tem uma solução não-trivial são chamados de autovalores, e as soluções correspondentes $\zeta_n(z)$ são as suas autofunções. O conjunto de todos os autovalores de um sistema de Sturm-Liouville é chamado espectro do sistema.

A base de autofunções do problema de Sturm-Liouville é usada para expandir a variável $\bar{C}(x, z, r)$ na forma

$$\bar{C}(x, z, r) = \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z), \quad (3.17)$$

sendo essa equação conhecida como fórmula da inversa da GITT, sendo que, $\zeta_n(z)$ é conhecido da solução do problema de Sturm-Liouville, e a variável dependente do nosso problema $\bar{c}_n(x, r)$ ainda precisa ser encontrada.

Substituindo (3.17) em (3.14) tem-se:

$$\begin{aligned}
& \bar{u} \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta_n(z) + \bar{w} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta'_n(z) = K_x \sum_{n=0}^N \bar{c}''_n(x, r) \zeta_n(z) + \\
& + K'_x \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta_n(z) + K_z \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta''_n(z) + K'_z \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta'_n(z) + \\
& - \beta r \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta'_n(z) - (\beta r)' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z) - \beta \bar{u} \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta_n(z) + \\
& - (\beta \bar{u})' \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta_n(z) - \beta \bar{w} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta''_n(z) - (\beta \bar{w})' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta'_n(z) + \\
& - \tau r^2 \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z) - \tau \bar{u} r \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta_n(z) - \tau \bar{w} r \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta'_n(z) + \\
& + \beta K_x \sum_{n=0}^N \bar{c}''_n(x, r) \zeta'_n(z) + (\beta K_x)' \sum_{n=0}^N \bar{c}''_n(x, r) \zeta_n(z) + \beta K'_x \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta'_n(z) + \\
& + (\beta K'_x)' \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta_n(z) + \tau r K_x \sum_{n=0}^N \bar{c}''_n(x, r) \zeta_n(z) + \tau r K'_x \sum_{n=0}^N \bar{c}'_n(x, r) \zeta_n(z) + \\
& - r \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z),
\end{aligned} \tag{3.18}$$

na qual linha e duas linhas são usadas para indicar derivadas de primeira e segunda ordem, respectivamente.

Da equação (3.15) podemos concluir que $\zeta_n''(z) = -\lambda_n^2 \zeta_n(z)$, então:

$$\begin{aligned}
& \bar{u} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n(z) + \bar{w} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n'(z) = K_x \sum_{n=0}^N \bar{c}_n''(x, r) \zeta_n(z) + \\
& + K_x' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n(z) - K_z \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \lambda_n^2 \zeta_n(z) + K_z' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n'(z) + \\
& - \beta r \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n'(z) - (\beta r)' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z) - \beta \bar{u} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n'(z) + \\
& - (\beta \bar{u})' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n(z) + \beta \bar{w} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \lambda_n^2 \zeta_n(z) - (\beta \bar{w})' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n'(z) + \\
& - \tau r^2 \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z) - \tau \bar{u} r \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n(z) - \tau \bar{w} r \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n'(z) + \\
& + \beta K_x \sum_{n=0}^N \bar{c}_n''(x, r) \zeta_n'(z) + (\beta K_x)' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n''(x, r) \zeta_n(z) + \beta K_x' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n'(z) + \\
& + (\beta K_x')' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n(z) + \tau r K_x \sum_{n=0}^N \bar{c}_n''(x, r) \zeta_n(z) + \tau r K_x' \sum_{n=0}^N \bar{c}_n'(x, r) \zeta_n(z) + \\
& - r \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z).
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Após resolver o problema auxiliar e feita a expansão da concentração em série, o próximo passo é tomar momentos, ou seja, aplicar o operador integral

$$\int_0^h (\cdot) \zeta_m(z) dz \tag{3.20}$$

na equação (3.19). Assim:

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \int_0^h \bar{u} \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) \int_0^h \bar{w} \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz = \\
& \sum_{n=0}^N \overline{c''_n}(x, r) \int_0^h K_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \int_0^h K'_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& - \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) \lambda_n^2 \int_0^h K_z \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) \int_0^h K'_z \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& - \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) r \int_0^h \beta \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz - \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) r \int_0^h \beta' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& - \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \int_0^h \beta \bar{u} \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz - \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \int_0^h (\beta \bar{u})' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& + \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) \lambda_n^2 \int_0^h \beta \bar{w} \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz - \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) \int_0^h (\beta \bar{w})' \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \quad (3.21) \\
& - \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) \tau r^2 \int_0^h \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz - \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \tau r \int_0^h \bar{u} \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& - \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) \tau r \int_0^h \bar{w} \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \sum_{n=0}^N \overline{c''_n}(x, r) \int_0^h \beta K_x \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& + \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \int_0^h (\beta K_x)' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \int_0^h \beta K'_x \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& + \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \int_0^h (\beta K'_x)' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \sum_{n=0}^N \overline{c''_n}(x, r) \tau r \int_0^h K_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\
& + \sum_{n=0}^N \overline{c'_n}(x, r) \tau r \int_0^h K'_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz - \sum_{n=0}^N \overline{c_n}(x, r) r \int_0^h \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz.
\end{aligned}$$

Executando-se as integrações, obtém-se um sistema EDO, cuja variável dependente é $\overline{c_n}(x, r)$. A obtenção desta variável é feita solucionando-se este sistema de equações. No caso dos coeficientes de difusão dependerem das variáveis x e z , a equação (3.21) se reduz a

um sistema EDO com coeficientes variáveis. Reescrevendo-se a equação (3.21) em notação matricial teremos:

$$B_1(x).Y''(x, r) + B_2(x).Y'(x, r) + B_3(x).Y(x, r) = 0, \quad (3.22)$$

na qual $Y(x, r)$ é o vetor coluna cujas componentes são $\{\bar{c}_n(x, r)\}$. As matrizes B_1 , B_2 e B_3 são dadas respectivamente por:

$$(b_1)_{n,m} = \int_0^h K_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \int_0^h \beta K_x \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \int_0^h (\beta K_x)' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\ + \tau r \int_0^h K_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz$$

$$(b_2)_{n,m} = - \int_0^h \bar{u} \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz - \int_0^h \beta \bar{u} \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz - \int_0^h (\beta \bar{u})' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\ + \int_0^h K'_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \int_0^h \beta K'_x \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \int_0^h (\beta K'_x)' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\ - \tau r \int_0^h \bar{u} \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \tau r \int_0^h K'_x \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz$$

e

$$(b_3)_{n,m} = \int_0^h K'_z \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz - \lambda_n^2 \int_0^h K_z \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz - \int_0^h \bar{w} \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz + \\ - r \int_0^h \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz - r \int_0^h \beta \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz - r \int_0^h \beta' \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\ - \tau r^2 \int_0^h \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \lambda_n^2 \int_0^h \beta \bar{w} \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz + \\ - \int_0^h (\beta \bar{w})' \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz - \tau r \int_0^h \bar{w} \zeta'_n(z) \zeta_m(z) dz.$$

sendo que as integrais em B_1 , B_2 e B_3 são resolvidas numericamente via Quadratura de Gauss Legendre.

Para resolver a equação (3.22) pela técnica da transformada de Laplace, primeira-

mente precisamos fazer uma aproximação *stepwise* das matrizes $B_1(x)$, $B_2(x)$ e $B_3(x)$ tomando-se valores médios para o coeficiente de difusão e sua derivada na variável x para cada subdomínio (o tamanho de cada subdomínio depende do problema a ser resolvido). Assim, a equação (3.22) é simplificada para um conjunto de EDOs no qual B_1 , B_2 e B_3 são matrizes com componentes constantes para cada subdomínio, e é reescrita como:

$$Y''(x, r) + F.Y'(x, r) + G.Y(x, r) = 0, \quad (3.23)$$

na qual a matriz F é definida por $F = B_1^{-1}B_2$, e a matriz G é definida por $G = B_1^{-1}B_3$. O sistema EDO de segunda ordem (3.23) é sujeito às condições de contorno:

$$Y(0, r) = \bar{c}_n(0, r), \quad (3.23a)$$

$$Y'(L_*, r) = \bar{c}'_n(L_*, r). \quad (3.23b)$$

Para determinarmos a condição $Y(0, r)$ aplicamos a transformada de Laplace na condição de fonte (equação (3.11b)) e após expandimos a equação resultante em série:

$$\sum_{n=0}^N \bar{u} \bar{c}_n(0, r) \zeta_n(z) = \frac{Q}{r} \delta(z - H_s). \quad (3.24)$$

Aplicando-se o operador (3.20) na equação (3.24) teremos

$$\int_0^h \sum_{n=0}^N \bar{u} \bar{c}_n(0, r) \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz = \int_0^h \frac{Q}{r} \delta(z - H_s) \zeta_m(z) dz. \quad (3.25)$$

Assim, executando-se as devidas substituições e integrações, a condição de fonte fica

$$\bar{c}_n(0, r) = \frac{Q}{r} \zeta_m(H_s) A^{-1}, \quad (3.26)$$

na qual A^{-1} é a matriz inversa de A [†] que é representada por

$$a_{n,m} = \int_0^h \bar{u} \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz. \quad (3.27)$$

[†]Ao proceder a inversão das matrizes B_1 e A , deve-se lembrar de observar o que acontece com o vento e com os coeficientes de difusão quando $z \rightarrow 0$.

Utilizando-se o mesmo procedimento na condição de contorno para longe da fonte (equação (3.11d)), conclui-se que $Y'(L_*, r) = 0$.

Aplicando-se a redução de ordem na equação (3.23) obtemos um sistema EDO de primeira ordem, dado por

$$Z'(x, r) + H.Z(x, r) = 0, \quad (3.28)$$

em que $Z(x, r)$ é o vetor $Z(x, r) = \text{col}[Z_1(x, r), Z_2(x, r)]$, e a matriz H tem a forma de bloco

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix}.$$

O problema transformado (equação (3.28)) será resolvido por transformada de Laplace e diagonalização [Buske, 2004], [Moreira et al., 2005c], [Wortmann et al., 2005]. Aplicando-se a transformada de Laplace obtemos:

$$s\bar{Z}(s, r) - Z(0, r) + H.\bar{Z}(s, r) = 0, \quad (3.29)$$

em que $\bar{Z}(s, r)$ denota a transformada de Laplace do vetor $Z(x, r)$. Assumindo que a matriz H é não-defectiva podemos escrever:

$$H = X.D.X^{-1}. \quad (3.30)$$

Aqui D é a matriz diagonal dos autovalores da matriz H , X é a matriz dos respectivos autovetores e X^{-1} é a inversa de X . Logo, substituindo-se a equação (3.30) na equação (3.29) temos:

$$s\bar{Z}(s, r) - Z(0, r) + X.D.X^{-1}.\bar{Z}(s, r) = 0, \quad (3.31)$$

ou ainda,

$$(sI + X.D.X^{-1}).\bar{Z}(s, r) = Z(0, r), \quad (3.32)$$

na qual a matriz I é a matriz identidade. Como $X.X^{-1} = X^{-1}.X = I$, a matriz dos autovetores e sua inversa são colocadas em evidência de forma que

$$X.(sI + D).X^{-1}.\bar{Z}(s, r) = Z(0, r), \quad (3.33)$$

cuja solução é:

$$\bar{Z}(s, r) = X.(sI + D)^{-1}.X^{-1}.Z(0, r). \quad (3.34)$$

Aplicando-se a transformada inversa de Laplace (\mathfrak{L}) teremos:

$$Z(x, r) = X.\mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\}.X^{-1}.Z(0, r). \quad (3.35)$$

A matriz $(sI + D)$ é escrita como:

$$(sI + D) = \begin{bmatrix} s + d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s + d_N \end{bmatrix}, \quad (3.36)$$

em que d_n são os autovalores da matriz H (equação (3.28)) ou ainda os elementos da matriz diagonal D . Da álgebra matricial, a inversa de uma matriz diagonal é a inversa dos seus elementos, então

$$(sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s+d_N} \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

Aplicando-se a transformada inversa de Laplace na matriz (3.37), usando resultados padrão da teoria da transformada de Laplace, obtemos:

$$\mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} = G(x, r) = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_N x} \end{bmatrix}. \quad (3.38)$$

Finalmente, substituindo-se a matriz (3.38) na equação (3.35), obtém-se a solução

do problema (3.28) que é escrita como:

$$Z(x, r) = X \cdot \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_N x} \end{bmatrix} \cdot X^{-1} \cdot Z(0, r), \quad (3.39)$$

ou ainda,

$$Z(x, r) = X \cdot G(x, r) \cdot X^{-1} \cdot Z(0, r) = M(x, r) \xi, \quad (3.40)$$

onde $M(x, r) = X \cdot G(x, r)$ e $\xi = X^{-1} \cdot Z(0, r)$.

Podemos reescrever a solução dada pela equação (3.40) como:

$$\begin{pmatrix} Z_1(x, r) \\ Z_2(x, r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(x, r) & M_{12}(x, r) \\ M_{21}(x, r) & M_{22}(x, r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

e para determinar o vetor desconhecido ξ precisamos resolver o seguinte sistema linear resultante da aplicação das condições de contorno na solução (3.28):

$$\begin{pmatrix} M_{11}(0, r) & M_{12}(0, r) \\ M_{21}(L, r) & M_{22}(L, r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_1(0, r) \\ Z_2(L_*, r) \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Uma vez que o vetor é obtido, a solução para a concentração do poluente dada pela equação (3.17) está bem determinada. Nenhuma aproximação é feita durante a derivação da solução, e, assim, a equação (3.17) é exata exceto pelo erro de truncamento. Cabe lembrar que esta solução é válida para qualquer perfil de u , w , K_x e K_z sejam eles constantes ou funções dependentes da altura [Buske, 2004], [Moreira et al., 2005c], [Wortmann et al., 2005].

Neste ponto, é relevante salientar que o problema (3.28) possui uma solução bem conhecida. Ainda mais, a solução discutida é um algoritmo robusto, sob o ponto de vista computacional, para resolver problemas com N grande (N da ordem de 1500.) e um esforço computacional pequeno. Além disso, esta metodologia pode ser facilmente aplicada para a solução da equação (3.28) com condição de contorno. Este tipo de problema aparece na solução da equação de ordenadas discretas em uma placa pelo método LTSN [Segatto e Vilhena, 1999].

Uma vez que os coeficientes da solução em série (3.17) estão determinados, estamos em condições de inverter a solução pela transformada de Laplace. Este procedimento resulta

$$c(x, z, t) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=0}^N \int_0^h \bar{c}_n(x, r) \zeta_n(z) e^{rt} ds. \quad (3.43)$$

Cabe salientar que nenhuma aproximação numérica foi feita durante a derivação da solução até aqui, exceto o truncamento do somatório da equação (3.17).

Devido à impossibilidade de determinarmos as singularidades do integrando que aparece no lado direito da equação acima, não poderemos aplicar o Teorema dos Resíduos para avaliar analiticamente a integral. Assim, na seqüência apresentaremos uma solução aproximada da integral acima usando inversão numérica.

3.2.3 Inversão numérica da transformada de Laplace: *Quadratura Gaussiana*

Uma solução aproximada da integral, que aparece na equação (3.43), pode ser obtida invertendo numericamente a concentração transformada $\bar{C}(x, z, r)$ pelo método da quadratura de Gauss-Legendre [Stroud e Secrest, 1966]. Assim

$$c(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \bar{C}\left(x, z, \frac{P_k}{t}\right), \quad (3.44)$$

ou ainda

$$c(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \sum_{n=0}^N \bar{c}_n\left(x, \frac{P_k}{t}\right) \zeta_n(z), \quad (3.45)$$

na qual N é o número de termos do somatório da fórmula da inversa da GILTT, A_k , P_k e M são, respectivamente, os pesos, as raízes e a ordem da quadratura considerada e estão tabulados no livro de Stroud e Secrest [Stroud e Secrest, 1966]. Quanto à inversão numérica de Laplace, é importante mencionar, que esta aproximação é exata se a função transformada é um polinômio de grau $2M - 1$ na variável considerada.

3.2.4 Inversão numérica da transformada de Laplace: *algoritmo Fixed-Talbot*

Somos cientes da existência na literatura de métodos mais acurados para avaliar a integral que aparece na equação (3.43), como por exemplo a aproximação de multiprecisão

[Valkó e Abate, 2004], [Abate e Valkó, 2004]. Segundo os autores, o algoritmo Fixed-Talbot (*FT algorithm*) [Abate e Valkó, 2004]) é um método robusto de inversão fornecendo resultados com precisão de até M^* dígitos significativos, no qual M^* é o número de termos do somatório do algoritmo FT. Assim, para testar o método de inversão da transformada de Laplace pelo esquema da quadratura Gaussiana, apresentado no item anterior, também resolvemos a integral que aparece na equação (3.43) pelo algoritmo FT. Desta forma, a solução aproximada da equação (3.43) utilizando o algoritmo FT é escrita como

$$c(x, z, t) = \frac{r_*}{M^*} \left[\frac{1}{2} \overline{C}(x, z, r) e^{rt} + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re} [e^{tS(\theta_k)} \overline{C}(x, z, S(\theta_k)) (1 + i\sigma(\theta_k))] \right], \quad (3.46)$$

ou ainda

$$c(x, z, t) = \sum_{n=0}^N \zeta_n(z) \left(\frac{r_*}{M^*} \left[\frac{1}{2} \overline{c}_n(x, r) e^{rt} + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re} [e^{tS(\theta_k)} \overline{c}_n(x, S(\theta_k)) (1 + i\sigma(\theta_k))] \right] \right), \quad (3.47)$$

em que $S(\theta_k) = r_* \theta (\cot \theta + i)$, $-\pi < \theta < \pi$, $\sigma(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot \theta_k - 1) \cot \theta_k$, $\theta_k = k\pi/M^*$ e $r_* = 2M^*/5t$ é um parâmetro baseado em experimentos numéricos [Abate e Valkó, 2004]. O controle de erro de arredondamento da equação (3.47) é especificado pela acurácia requerida, isto é, pelo número de precisão de dígitos decimais (M^*).

3.2.5 Casos particulares

É importante observar que a solução bidimensional transiente, com fechamento não-Fickiano da turbulência e que leva em conta a difusão longitudinal do poluente, encontrada pelo método GILTT na seção anterior, é uma solução geral uma vez que se reduz a casos particulares, casos estes já resolvidos pela mesma técnica durante este trabalho de tese.

Primeiramente, analisaremos os casos transientes. Podemos observar na equação (3.11) que quando os termos responsáveis pelo transporte não-local tendem a zero ($\beta \rightarrow 0$ e $\tau \rightarrow 0$) recaímos no problema transiente com difusão longitudinal e fechamento Fickiano da turbulência:

$$\frac{\partial c(x, z, t)}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) \quad (3.48)$$

Este problema foi resolvido em [Buske et al., 2007a], e os detalhes da derivação podem ser

vistos no Apêndice I.

Ainda, desprezando-se na equação (3.11) a difusão longitudinal (termo de transporte em x é muito maior que o difusivo), ou seja, $|u \frac{\partial c}{\partial x}| \gg |\frac{\partial}{\partial x}(K_x \frac{\partial c}{\partial x})|$ recaímos no problema transiente com fechamento não-Fickiano da turbulência em que as condições de vento fraco são desconsideradas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) + \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) &+ \\ - \tau \frac{\partial^2 c(x, z, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\tau \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\tau \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) & \end{aligned} \quad (3.49)$$

Este problema foi resolvido em [Buske et al., 2006c] (detalhes no Apêndice II). Além disso, fazendo $\beta \rightarrow 0$ e $\tau \rightarrow 0$ na equação (3.49) temos o problema transiente com fechamento Fickiano da turbulência [Moreira et al., 2006a], [Buske et al., 2005c]:

$$\frac{\partial c(x, z, t)}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right) \quad (3.50)$$

Maiores detalhes nos Apêndices III.

O problema transiente (3.50) também foi utilizado para analisar o efeito da ascensão da pluma (*plume rise*) [Buske et al., 2006b]. A maior contribuição para a ascensão da pluma é devido à diferença de densidade entre o contaminante e o ar ambiente. Na prática, a altura efetiva da pluma h_e (m) resulta da soma da altura da fonte H_s (m) e da ascensão da pluma Δh (m), ou seja, $h_e = H_s + \Delta h$. A hipótese básica para o uso desta fórmula é que a uma certa distância da fonte a pluma de material com empuxo, abandonado de uma altura H_s , é visualizada como uma pluma de material sem empuxo abandonado de uma fonte de altura $H_s + \Delta h$. No Apêndice IV temos os detalhes do procedimento utilizado bem como os resultados obtidos.

Agora analisaremos os casos estacionários. O problema transiente (3.11) recai na solução estacionária ao tomarmos o limite quando o tempo é muito grande ($t \rightarrow \infty$), ou seja, teremos $r = 0$ na nossa solução. Como $t \rightarrow \infty$ temos também que $\tau \rightarrow 0$. Desta forma recaímos no problema estacionário com difusão longitudinal e fechamento não-Fickiano da

turbulência:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) + \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{u} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{w} \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.51)$$

Os resultados deste problema foram apresentados no trabalho [Buske et al., 2007f]. Além disso, desprezando-se a difusão longitudinal recaímos no problema estacionário com fechamento não-Fickiano da turbulência:

$$\bar{u} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{u} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \bar{w} \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) \quad (3.52)$$

Os resultados obtidos utilizando-se esta equação foram apresentados em [Buske et al., 2007d] e [Buske et al., 2005d]. No Apêndice V encontra-se o trabalho [Buske et al., 2007d].

Ainda, fazendo $\beta \rightarrow 0$ na equação (3.51) teremos o problema estacionário com o termo de difusão longitudinal e fechamento Fickiano da turbulência:

$$\bar{u} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) \quad (3.53)$$

No Apêndice VI temos a derivação da solução do problema (3.53) e os respectivos resultados numéricos publicados no trabalho [Buske et al., 2007e].

Do mesmo modo, fazendo $\beta \rightarrow 0$ na equação (3.52), teremos o problema estacionário:

$$\bar{u} \frac{\partial c(x, z)}{\partial x} + \bar{w} \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} \right) \quad (3.54)$$

Esse foi o primeiro problema bidimensional (considerando $\bar{w}=0$), aplicado à dispersão de poluentes, a ser resolvido pela técnica GILTT [Buske, 2004]. A equação (3.54) foi amplamente testada, incluindo-se todos os tipos de estabilidade atmosférica e diversos coeficientes de difusão e perfil de vento. Os resultados mais importantes podem ser encontrados nos trabalhos [Buske, 2004], [Wortmann et al., 2005] e [Moreira et al., 2005c]. Nos Apêndices VII e VIII encontram-se os trabalhos de [Wortmann et al., 2005] e [Moreira et al., 2005c], respectivamente.

A solução da equação bidimensional estacionária (3.54) obtida pela GILTT também

foi utilizada para derivar analiticamente os quatro primeiros momentos de concentração ao nível do solo [Tiesi et al., 2007]. Esse trabalho encontra-se no Apêndice IX.

De forma a construir uma solução analítica para a equação de advecção-difusão para simular a dispersão de poluentes na atmosfera considerando-se a deposição seca no solo, a condição de contorno em $z = 0$ do problema (3.54) foi modificada. Desta forma, em $z = 0$ temos a condição de contorno do terceiro tipo

$$K_z \frac{\partial c(x, z)}{\partial z} = V_g c(x, z) \quad em \quad z = 0, \quad (3.55)$$

em que V_g é a velocidade de deposição do poluente. A única diferença na solução da equação de advecção-difusão-deposição está no problema de Sturm-Liouville, pois agora temos condições de contorno de segundo e terceiro tipos [Buske et al., 2007b], [Buske et al., 2007c], [Tirabassi et al., 2008]. Para este tipo de problema de Sturm-Liouville a solução é dada por [Özisik, 1974]

$$\zeta_n(z) = \cos(\lambda_n(h - z)), \quad (3.56)$$

na qual os autovalores λ_n são as raízes positivas da equação transcendental $\lambda_n \tan(\lambda_n h) = H_1$, em que $H_1 = V_g/K_z$, e são calculados pelo método de Newton-Raphson. No Apêndice X encontra-se o trabalho para o caso transiente.

4. DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO

Uma utilização correta dos modelos de transporte e difusão na atmosfera não pode prescindir de um estudo sobre suas capacidades de representarem corretamente situações reais. Quando possível, deve-se verificar a confiabilidade do modelo utilizado com os dados, cenários topográficos e meteorológicos próprios da área de seu emprego [Tirabassi, 2005].

Assim, neste capítulo, apresentam-se os dados experimentais, parametrizações do coeficiente de difusão, perfis de vento, expressões para o parâmetro de dispersão lateral e os índices estatísticos utilizados neste trabalho de tese.

4.1 Dados Experimentais

Qualquer estudo de modelagem é incompleto se não é apropriadamente e adequadamente validado com observações relevantes. A seguir são apresentados os experimentos difusivos utilizados neste trabalho para validar o presente modelo.

4.1.1 Experimento de Copenhagen (Dinamarca)

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning [Gryning et al., 1987] e Gryning e Lyck [Gryning e Lyck, 1984], consistiram na liberação do traçador SF_6 (hexafluoreto de enxofre) ao norte de Copenhagen. É um experimento de **fonte alta e fortemente convectivo**.

O traçador foi abandonado sem empuxo a partir de uma torre com altura de 115 m , sendo coletado ao nível do solo ($z = 0$), em unidades de amostragem localizadas em três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância entre 2 a 6 km , a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente, como mostra a Figura (4.1) (Domínio: 6 km de distância da fonte).

As liberações de SF_6 começaram uma hora antes do início da amostragem. O tempo médio das medidas foi de 1 h e suas imprecisões são de 10 %. O local era principalmente

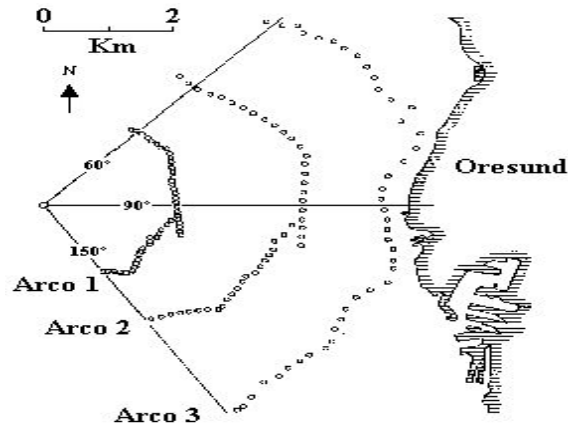


Figura 4.1 – Experimento de Copenhagen.

residencial, com um comprimento de rugosidade de $z_0 = 0,6 \text{ m}$ (é a altura em que o vento é zero).

A Tabela (4.1) mostra os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão na CLC de Copenhagen a serem utilizados no modelo. Na Tabela (4.1) \bar{u} é a velocidade do vento médio (m/s), u_* representa a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Monin-Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s), H_s é a altura da fonte (m) e h é a altura (m) da CLC. Estes dados meteorológicos são médias horárias.

Tabela 4.1 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen
[Gryning et al., 1987].

Expt	\bar{u} (115 m) (ms^{-1})	\bar{u} (10 m) (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	w_* (ms^{-1})	h (m)
1	3,4	2,1	0,36	-37	1,8	1980
2	10,6	4,9	0,73	-292	1,8	1920
3	5,0	2,4	0,38	-71	1,3	1120
4	4,6	2,5	0,38	-133	0,7	390
5	6,7	3,1	0,45	-444	0,7	820
6	13,2	7,2	1,05	-432	2,0	1300
7	7,6	4,1	0,64	-104	2,2	1850
8	9,4	4,2	0,69	-56	2,2	810
9	10,5	5,1	0,75	-289	1,9	2090

Para analisar o problema dependente do tempo, utilizamos dados com uma resolução temporal maior. Em particular, utilizamos medidas médias de 20 *min* das concentrações e valores médios de 10 *min* para os dados meteorológicos. Para detalhes sobre os dados do experimento transiente ver o trabalho de [Tirabassi e Rizza, 1997]. Nas Tabelas (4.2) e (4.3) são apresentadas a velocidade de fricção e o comprimento de Monin-Obukhov (somente um valor para cada experimento), respectivamente, usados nas simulações. Como na literatura não constam os dados de 10 em 10 *min* de u_* e L para o experimento 6, este foi desconsiderado. Para calcular w_* a relação $w_*/u_* = (-h/kL)^{1/3}$ foi usada, na qual k é a constante de von-Kármán.

Tabela 4.2 – Velocidade de fricção u_* em (m/s) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 *min*.

Passo de tempo	1	2	3	4	5	7	8	9
1	0,36	0,68	0,46	0,56	0,58	0,48	0,65	0,72
2	0,37	0,67	0,45	0,51	0,52	0,48	0,79	0,73
3	0,40	0,81	0,47	0,37	0,51	0,57	0,67	0,60
4	0,43	0,68	0,39	0,44	0,58	0,62	0,67	0,59
5	0,35	0,75	0,39	0,48	0,59	0,53	0,68	0,65
6	0,34	0,74	0,40	0,48	0,52	0,65	0,65	0,71
7	0,42	0,76	0,40	0,39	0,52	0,63	0,68	0,73
8	0,43	0,82	0,41	0,40	0,45	0,65	0,67	0,73
9	0,40	0,76	0,31	0,39	0,44	0,66	0,73	0,73
10	0,37	0,73	0,34	0,39	0,44	0,62	0,73	0,66
11	0,35	0,69	0,39	0,39	0,44	0,52	0,75	0,67
12	0,36	0,66	0,40	0,39	0,43	0,62	0,69	0,74

4.1.2 Experimento de Kinkaid (Illinois, USA)

Levando-se em consideração o empuxo, também utilizamos o experimento de Kinkaid (realizado em Illinois - USA), relativo somente a **condições convectivas** (para $-h/L > 10$) e descrito no trabalho de [Hanna e Paine, 1989]. Este experimento consistiu de uma **liberação elevada** em um terreno plano com alguns lagos. Durante o experimento, o SF_6 foi liberado de uma altura de fonte de 187 *m* e medido em uma rede que consistiu de aprox-

Tabela 4.3 – Comprimento de Monin-Obukhov L em (m) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 *min*.

Passo de tempo	1	2	3	4	5	7	8	9
1	-26	-178	-152	-75	-492	-71	-71	-793
2	-23	-227	-194	-42	-215	-80	-85	-471
3	-83	-311	-106	-23	-368	-64	-47	-202
4	-42	-160	-101	-32	-735	-111	-49	-366
5	-36	-203	-129	-71	-366	-177	-45	-633
6	-42	-286	-70	-80	-273	-67	-63	-13588
7	-47	-155	-83	-83	-273	-87	-41	-593
8	-38	-228	-60	-101	-262	-71	-47	-471
9	-83	-184	-106	-129	-395	-56	-70	-389
10	-21	-389	-42	-129	-395	-111	-64	-375
11	-32	-133	-101	-129	-395	-215	-52	-262
12	-29	-375	-70	-129	-759	-123	-39	-252

imadamente 200 amostradores posicionados em arcos de 0,5 a 50 *km* da fonte (Domínio: 50 *km* de distância da fonte). O conjunto de dados inclui os parâmetros meteorológicos como velocidade de fricção, comprimento de Monin-Obukhov e altura da camada limite e são apresentados nas Tabelas (4.4) e (4.5). O comprimento de rugosidade foi de aproximadamente 10 *cm*. As concentrações máximas foram observadas ao nível do solo. O nível de concentração medida é freqüentemente irregular com altos e baixos níveis de concentração ocorrendo intermitentemente ao longo do mesmo arco, além disso há freqüentes lacunas nos arcos de monitoramento. Por estas razões uma variável tem sido escolhida como um fator de qualidade de modo a indicar o grau de legibilidade dos dados. O indicador de qualidade (de 0 a 3) tem sido escolhido [Olesen et al., 1984]. Aqui, somente os dados com fator de qualidade 3 foram considerados.

4.1.3 Experimento de Prairie-Grass (O'Neill, Nebraska)

O Experimento de Prairie-Grass foi realizado em O'Neill, Nebraska no ano de 1956, descrito por [Barad, 1958]. Aqui utilizamos os dados para o caso **convectivo** descritos no artigo de [Nieuwstadt, 1980]. O traçador usado nesse experimento foi o dióxido de enxofre

Tabela 4.4 – Parâmetros meteorológicos para o experimento de Kinkaid
 [Hanna e Paine, 1989] - Parte 1. T_a é a temperatura ambiente, T_i é a
 temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma
 na saída da chaminé.

Expt	L (m)	h (m)	u_* (ms^{-1})	w_* (ms^{-1})	T_a (K)	T_i (K)	V_i (ms^{-1})	Q (gs^{-1})
1	-8,6	2076	0,30	2,65	298,4	416	14,6	10,2
2	-11,2	2092	0,31	2,53	298,4	416	14,6	8,2
3	-3,9	893	0,22	1,95	284,2	432	29,6	11,2
4	-4,8	1032	0,22	1,95	285,2	432	29,2	11,2
5	-10,4	1175	0,28	2,05	286,2	432	29,6	11,3
6	-6,3	1355	0,25	2,19	286,6	432	29,9	11,1
7	-23,5	1300	0,37	2,17	290,8	441	27,9	11,5
8	-40,3	1743	0,34	1,68	291,3	442	27,1	11,8
9	-63,5	1840	0,29	1,24	291,6	445	27,3	12,2
10	-8,6	850	0,30	1,52	296,6	453	28,5	11,2
11	-6,6	1447	0,28	2,31	297,6	456	31,8	11,2
12	-35,4	1223	0,50	2,33	299,9	440	18,0	11,0
13	-58,5	2069	0,57	2,66	300,4	441	18,0	11,0
14	-24,4	950	0,40	1,79	285,0	436	16,6	16,2
15	-33,3	1253	0,46	1,99	286,1	438	16,9	12,0
16	-27,0	1548	0,44	2,12	287,5	434	17,9	11,1
17	-28,6	2250	0,46	2,30	288,5	433	18,7	10,8
18	-41,3	2450	0,52	2,35	289,5	431	17,6	10,8
19	-51,4	2506	0,53	2,29	289,8	431	15,7	10,8
20	-67,8	2528	0,52	2,08	290,1	436	14,2	11,6
21	-14,3	1700	0,37	2,43	290,9	420	17,3	12,1
22	-6,0	1750	0,29	2,56	290,4	423	18,9	12,0
23	-46,1	1776	0,56	2,60	290,9	426	18,3	11,5
24	-29,6	1800	0,47	2,60	292,6	426	18,8	11,1
25	-20,6	1950	0,39	2,46	291,4	395	21,7	10,6
26	-18,7	1131	0,41	2,69	298,0	421	21,1	12,9
27	-42,1	2252	0,47	2,53	299,9	435	29,8	13,1
28	-67,6	2676	0,51	2,37	300,0	436	31,8	13,2
29	-5,2	1725	0,30	3,09	299,6	434	37,3	13,5
30	-4,3	1750	0,26	2,91	299,8	434	39,3	13,7

Tabela 4.5 – Parâmetros meteorológicos para o experimento de Kinkaid
 [Hanna e Paine, 1989] - Parte 2. T_a é a temperatura ambiente, T_i é a
 temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma
 na saída da chaminé.

Expt	L (m)	h (m)	u_* (ms^{-1})	w_* (ms^{-1})	T_a (K)	T_i (K)	V_i (ms^{-1})	Q (gs^{-1})
31	-5,4	1750	0,25	2,61	299,9	434	38,2	13,9
32	-8,0	1450	0,32	2,61	302,2	435	19,8	19,8
33	-11,2	1450	0,33	2,46	302,4	435	20,0	20,0
34	-18,3	1483	0,34	2,21	302,3	436	19,5	19,5
35	-18,5	1505	0,26	1,68	301,5	436	18,6	18,6
36	-45,1	1014	0,52	2,11	292,3	397	16,7	16,7
37	-35,8	1462	0,54	2,98	293,0	397	16,4	16,4
38	-42,3	2274	0,55	2,95	293,5	390	16,2	16,2
39	-86,1	1376	0,63	2,45	297,4	390	18,5	18,5
40	-108,0	1455	0,62	2,25	297,2	395	18,6	18,6
41	-131,0	1539	0,66	2,30	297,1	398	19,1	19,1
42	-191,0	1594	0,61	1,91	296,9	398	18,5	18,5
43	-6,4	1124	0,28	2,51	296,8	427	13,0	13,0
44	-8,3	1250	0,31	2,62	297,7	428	13,2	13,2
45	-10,6	1353	0,32	2,55	298,5	428	12,7	12,7
46	-9,2	1635	0,30	2,54	299,0	428	12,1	12,1
47	-11,6	1721	0,29	2,40	299,4	428	12,2	12,2
48	-21,2	1794	0,32	2,14	299,4	428	12,5	12,5
49	-67,5	1851	0,34	1,55	299,3	427	12,7	12,7
50	-81,2	952	0,67	2,47	299,7	431	12,6	12,6
51	-85,6	1222	0,68	2,59	300,3	431	12,7	12,7
52	-59,2	1300	0,60	2,69	301,1	432	12,9	12,9
53	-113,0	1360	0,68	2,55	301,1	432	12,5	12,5

(SO_2) que foi abandonado a uma altura de 0,46 m e coletado a 1,5 m em arcos concêntricos em distâncias de 50, 100, 200, 400 e 800 m (Domínio: 800 m de distância da fonte). O terreno de Prairie-Grass é plano com comprimento de rugosidade aerodinâmica de apenas 0,6 cm. É um experimento de **fonte baixa**. A Tabela (4.6) mostra os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão a serem utilizados no modelo.

Tabela 4.6 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Prairie-Grass

[Barad, 1958], [Nieuwstadt, 1980].

Expt	L (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	\bar{u} (10 m) (ms^{-1})	Q (gs^{-1})
1	-9	260	0,84	3,2	82
5	-28	780	1,64	7,0	78
7	-10	1340	2,27	5,1	90
8	-18	1380	1,87	5,4	91
9	-31	550	1,70	8,4	92
10	-11	950	2,01	5,4	92
15	-8	80	0,70	3,8	96
16	-5	1060	2,03	3,6	93
19	-28	650	1,58	7,2	102
20	-62	710	1,92	11,3	102
25	-6	650	1,35	3,2	104
26	-32	900	1,86	7,8	98
27	-30	1280	2,08	7,6	99
30	-39	1560	2,23	8,5	98
43	-16	600	1,66	6,1	99
44	-25	1450	2,20	7,2	101
49	-28	550	1,73	8,0	102
50	-26	750	1,91	8,0	103
51	-40	1880	2,30	8,0	102
61	-38	450	1,65	9,3	102

4.1.4 Experimento de Hanford (Washington, USA)

O experimento difusivo de Hanford foi conduzido de maio-junho de 1983, em uma região semi-árida de sul a leste do estado de Washington, EUA, em um terreno geralmente

plano. A descrição detalhada do experimento foi fornecida por [Doran e Horst, 1985]. É um experimento de **fonte baixa** conduzido durante **condições estáveis a quase-neutras**.

Ao todo 6 experimentos foram conduzidos. Em cada experimento o tempo de liberação foi em torno de 30 *min* exceto no experimento 5 que foi de 22 *min*. Os coletores foram posicionados em círculos concêntricos com uma distância angular de 8°, 4°, 4°, 2° e 3° de raio de 100, 200, 800, 1600 e 3200 *m* respectivamente (Domínio: 3200 *m* de distância da fonte). Entretanto, a velocidade de deposição foi avaliada somente para as três últimas distâncias. Dois poluentes, um que deposita (SF_6) e um que não deposita (ZnS), foram liberados simultaneamente de uma altura de 2 *m*. A taxa de liberação média foi de 0,3 *g/s*. A separação lateral entre os pontos de liberação do SF_6 e do ZnS foi menor do que 1 *m*. Os dados meteorológicos foram conseguidos tomando medidas nas alturas de 1, 2, 4, 8, 16 e 32 *m* em uma torre de 122 *m* localizada aproximadamente a 100 *m* para o norte do ponto de liberação [Doran et al., 1984]. Os valores dos parâmetros da CLP são dados na Tabela (4.7). A rugosidade do terreno era de 3 *cm*.

Tabela 4.7 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Hanford [Doran e Horst, 1985], [Doran et al., 1984].

	\bar{u} (2 <i>m</i>)	u_*	L	h
Expt	(ms^{-1})	(ms^{-1})	(<i>m</i>)	(<i>m</i>)
1	3,63	0,40	166	325
2	1,42	0,26	44	135
3	2,02	0,27	77	182
4	1,50	0,20	34	104
5	1,41	0,26	59	157
6	1,54	0,30	71	185

Para calcular a altura da camada limite estável, a relação $h = 0,4(u_*L/f_c)^{1/2}$ foi utilizada [Zilitinkevich, 1972], na qual f_c representa o parâmetro de Coriolis: $f_c = 1,46 \cdot 10^{-4}$.

4.1.5 Experimento IIT Delhi (Índia)

Experimentos de dispersão em condições de **vento fraco** foram realizados pelo Indian Institute of Technology (IIT Delhi) e descritos em [Sharan et al., 1996a], [Sharan et al., 1996b] e [Sharan et al., 2002]. As concentrações experimentais ao nível do solo usando dados

de SF_6 foram obtidas para o caso **instável**. O poluente foi liberado sem empuxo de uma altura de 1 m e as concentrações de SF_6 foram observadas próximas ao solo (0,5 m). A taxa de emissão do traçador SF_6 variou de 30 a 50 $mlmin^{-1}$. O período de amostragem para cada experimento foi de 30 min . Medidas de vento e de temperatura foram obtidas em quatro alturas (2, 4, 15 e 30 m) de uma torre micrometeorológica de 30 m . Em todos os casos, a velocidade de vento foi menor do que 2 ms^{-1} na altura de 15 m . Os amostradores foram colocados em arcos de raio 50 e 100 m (Domínio: 100 m de distância da fonte). A tabela (4.8) mostra os dados meteorológicos utilizados durante os experimentos.

Tabela 4.8 – Parâmetros meteorológicos do experimento IIT Delhi [Sharan et al., 2002].

Expt	\bar{u} (15 m) (ms^{-1})	w_* (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	h (m)
1	2,21	2,37	0,34	-17,5	1570
2	1,09	2,26	0,21	-2,5	1240
6	2,22	2,04	0,34	-20	1070
7	2,43	2,28	0,37	-22	1240
8	1,77	1,09	0,25	-32	943
11	1,49	1,83	0,25	-13	1070
12	2,24	2,32	0,35	-24	1325
13	1,08	1,72	0,21	-2	1070

4.1.6 Experimento de INEL (USA)

O experimento de INEL consistiu de uma série de testes difusivos conduzidos sob condições atmosféricas **estáveis** e com **vento fraco** sobre um terreno plano e uniforme. Os resultados estão publicados em um relatório do NOAA (U.S. National Oceanic and Atmospheric Administration) [Sagendorf e Dickson, 1974]. Por causa da variabilidade da direção do vento, uma malha de coleta de 360° foi implementada. Os arcos foram posicionados nos raios de 100, 200 e 400 m do ponto de emissão (Domínio: 400 m de distância da fonte). Coletores foram posicionados em intervalos de 6° em cada arco, num total de 180 posições de coleta. A altura de coleta foi 0,76 m . O traçador SF_6 foi liberado de uma altura de 1,5 m . A média horária das concentrações foi determinada por meio de captura de elétrons

através de cromatografia. A Tabela (4.9) resume as condições dos testes. Nessa tabela, a média horária do vento, \bar{u} , e o desvio padrão da direção horizontal do vento sobre o período médio considerado, σ_θ , são reportados a 2 m de altura.

Tabela 4.9 – Parâmetros meteorológicos do experimento de INEL [Sagendorf e Dickson, 1974].

Expt	\bar{u} (2 m) (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	σ_θ (deg)	L (m)	h (m)
4	0,7	0,047	13,6	2,4	13
5	0,8	0,053	28,4	3,1	16
6	1,2	0,08	11,4	7,1	30
7	0,6	0,04	23,9	1,8	11
8	0,5	0,033	49,6	1,2	8
9	0,5	0,033	21,4	1,2	8
10	1,1	0,073	24,8	5,9	26
11	1,4	0,093	37,6	9,6	37
12	0,7	0,047	28,8	2,4	13
13	1,0	0,067	12,0	4,9	23
14	1,0	0,067	17,2	4,9	23

A rugosidade utilizada foi de 0,005 m por [Brusasca et al., 1992] e [Sharan e Yadav, 1998]. Os parâmetros de entrada L , u_* e h não foram medidos para o experimento de INEL. A velocidade de fricção foi rugosamente obtida pela expressão $u_* = k\bar{u}(z_r)/\ln(z_r/z_0)$, onde $z_r = 2$ m (altura de referência). O comprimento de Monin-Obukhov foi avaliado através da formulação empírica $L = 1100u_*^2$ [Zannetti, 1990]. A altura da camada limite h é obtida da relação $h = 0,4(u_*L/f_c)^{1/2}$ [Zilitinkevich, 1972].

4.1.7 Experimento de Lilleström (Noruega)

Os dados do conhecido experimento de Lilleström [Siversten e Böhler, 1985] também foram utilizados neste trabalho. Nesse experimento o traçador utilizado foi o SF_6 , e a altura de liberação foi 36 m; o poluente foi coletado próximo ao solo em arcos posicionados entre 160 e 900 m da fonte (Domínio: 900m de distância da fonte). Os dados foram coletados em uma área residencial plana em **condições meteorológicas extremas: vento fraco, terreno coberto de neve e temperatura do ar a -20°C**. Na Tabela (4.10) são apresentados os

parâmetros meteorológicos do experimento. Os parâmetros L , u_* e h foram calculados da mesma forma que no experimento de INEL. Considerando-se que a altura da fonte é de 36 m e que durante os experimentos os perfis de temperatura mostraram uma temperatura de inversão na altura de aproximadamente 100 m , o valor máximo entre 100 m e o valor predito pela fórmula de [Zilitinkevich, 1972] foi escolhido.

Tabela 4.10 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Lilleström

[Siversten e Böhler, 1985].

Expt	\bar{u} (10 m) (ms^{-1})	L (m)	u_* (ms^{-1})	h (m)
1	2,1	86,5	0,28	197
2	1,7	56,7	0,23	143
3	1,7	56,7	0,23	143
4	1,6	50,2	0,21	131
5	0,9	15,9	0,12	100
6	0,5	4,9	0,07	100
7	0,5	4,9	0,07	100
8	0,4	3,1	0,05	100

4.2 Coeficiente de Difusão

Em problemas de difusão atmosférica, a escolha de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para modelar a dispersão de poluentes. A partir de um ponto de vista físico, uma parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no sentido que os modelos matemáticos recebem uma relação aproximada que substitui um termo desconhecido. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros são calculados e relacionados ao entendimento da CLP [Mangia et al., 2002].

Na literatura encontram-se diversas e variadas formulações para o coeficiente de difusão turbulento vertical [Ulke, 2000]. Os coeficientes de difusão dependentes somente da turbulência utilizados neste trabalho são apresentados a seguir.

- **Fórmulas de Degrazia:** utilizadas em toda CLP.

– Condições instáveis ($L \leq 0$) [Mangia et al., 2002]:

$$K_z = 0,22w_*h \left(\frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{\frac{-4z}{h}} - 0,0003e^{\frac{8z}{h}}\right] \quad (4.1)$$

em que h é a altura da CLC.

– Condições estáveis ($L \geq 0$) [Degrazia et al., 2000]:

$$K_z = \frac{0,3(1 - z/h)u_*z}{1 + 3,7(z/\Lambda)}, \quad (4.2)$$

no qual h é a altura da CLE e $\Lambda = L(1 - z/h)^{\frac{5}{4}}$.

- **Fórmulas de Similaridade:** utilizadas somente na camada superficial [Panofsky e Dutton, 1984].

$$K_z = \frac{ku_*z}{\Phi_h(z/L)}, \quad (4.3)$$

em que k é a constante de von-Kármán ($k \cong 0,4$). A função Φ_h é calculada com as fórmulas de Dyer [Dyer, 1974]:

- Condições instáveis ($z/L < 0$): $\Phi_h = (1 - 16\frac{z}{L})^{-\frac{1}{2}}$
- Condições neutras ($z/L > 0$): $\Phi_h = 1$
- Condições estáveis ($z/L > 0$): $\Phi_h = 1 + 5\frac{z}{L}$

- **Fórmulas de Troen e Mahrt:** utilizadas em toda a CLP [Pleim e Chang, 1992].

– Condições instáveis ($h/L < -10$):

$$K_z = kw_*z \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (4.4)$$

– Condições estáveis ou quase neutras ($h/L \geq -10$):

$$K_z = ku_*z \left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 / \Phi_h(z/L) \quad (4.5)$$

Para representar a difusão em regiões próximas à fonte, os coeficientes de difusão devem ser considerados como função não somente da turbulência, mas também da distância

da fonte. É importante salientar que uma parametrização que é dependente da distância da fonte representa, de um modo mais correto, a difusão em ventos fracos [Arya, 1995]. Seguindo-se essa idéia, [Degrazia e Moraes, 1992] e [Degrazia et al., 2001] propuseram uma formulação integral e [Degrazia et al., 1996] e [Degrazia et al., 2002] propuseram uma formulação algébrica para os coeficientes de difusão nas camadas estáveis e instáveis:

- Condições instáveis [Degrazia et al., 2001], [Degrazia et al., 2002]:

$$K_\alpha = \frac{0,09w_*hc_i^{1/2}\psi^{1/3}(z/h)^{4/3}}{(f_m^*)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin\left(\frac{7,84c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_i^{4/3}X^*n'}{(z/h)^{2/3}}\right)}{(1+n')^{5/3}} \frac{dn'}{n'} \quad (4.6)$$

$$K_\alpha = \frac{0,583w_*hc_i\psi^{2/3}(z/h)^{4/3}X^*[0,55(z/h)^{2/3} + 1,03c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_i^{2/3}X^*]}{[0,55(z/h)^{2/3}(f_m^*)_i^{1/3} + 2,06c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_iX^*]^2} \quad (4.7)$$

em que $X^* = xu_*/\bar{u}h$ é a distância adimensional, n' é a frequência adimensional, h é a altura da CLC, $c_{v,w} = 0,36$, $c_u = 0,3$, $(f_m^*)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral independente da estratificação na qual:

$$(f_m^*)_w = \frac{z}{(\lambda_m)_w} = 0,55 \left(\frac{z}{h}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0,0003\exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right]^{-1} \quad (4.8)$$

para a componente vertical, em que $(\lambda_m)_w = 1,8h \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0,0003\exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right]$ é o valor do pico espectral do comprimento de onda vertical. A componente longitudinal obtida de [Olesen et al., 1984] é $(f_m^*)_u = 0,67$. A função dissipação usada aqui é o valor médio $\psi = 0,4$ [Caughey, 1982].

- Condições estáveis [Degrazia e Moraes, 1992], [Degrazia et al., 1996]:

$$K_\alpha = \frac{0,64u_*ha_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}z/h}{8\sqrt{\pi}(f_m)_i} \int_0^\infty \frac{\sin\left(\frac{8\sqrt{\pi}a_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}(f_m)_iX^*n'}{(1,5)^{3/5}z/h}\right)}{(1+n'^{5/3})} \frac{dn'}{n'} \quad (4.9)$$

$$K_\alpha = \frac{2\sqrt{\pi}0,64u_*ha_i^2(1-z/h)^{\alpha_1}(z/h)X^*[2\sqrt{\pi}0,64a_i^2(z/h) + 8a_i(f_m)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X^*]}{[2\sqrt{\pi}0,64(z/h) + 16a_i(f_m)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X^*]^2} \quad (4.10)$$

em que $X^* = xu_*/\bar{u}h$ é a distância adimensional, h é a altura da CLE, α_1 é uma constante que depende da evolução da CLE, $(f_m)_i = (f_m)_{n,i} \left(1 + 3,7\frac{z}{\Lambda}\right)$ é a frequência do pico espectral (i indica as componentes da velocidade turbulenta u, v e w), $(f_m)_{n,i}$

é a frequência do pico espectral na estratificação neutra ($(f_m)_{n,w} = 0,33$; $(f_m)_{n,v} = 0,22$; $(f_m)_{n,u} = 0,045$; [Sorbjan, 1989]), z é a altura acima do solo, $\Lambda = L(1-z/h)^{(1,5\alpha_1-\alpha_2)}$ ($\alpha_1 = 1,5$; $\alpha_2 = 1$; [Nieuwstadt, 1984]) é o comprimento de Monin-Obukhov local e finalmente, $a_i = (2,7c_i)^{1/2}/(f_m)_{n,i}^{1/3}$, onde $c_{v,w} = 0,4$ e $c_u = 0,3$.

Na Figura (4.2) temos os perfis adimensionais dos coeficientes de difusão apresentados anteriormente. Para os casos instáveis utilizou-se os dados do experimento 8 de Copenhagen e para os estáveis os do experimento 6 de Hanford.

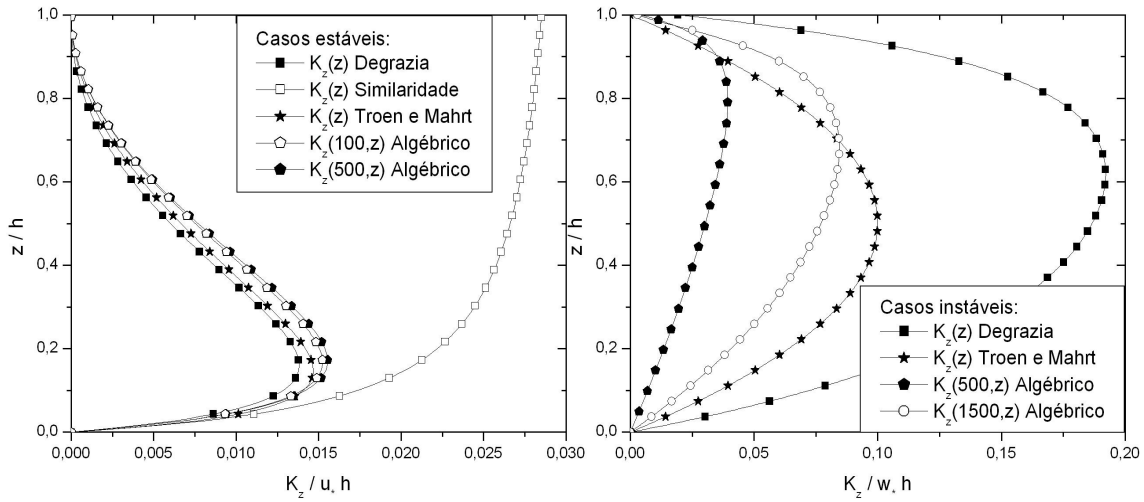


Figura 4.2 – Perfil dos coeficientes de difusão em função da altura adimensional (z/h) para os casos instáveis (K_z/w_*h) e estáveis (K_z/u_*h).

Os coeficientes de difusão são introduzidos nos modelos discutidos no capítulo anterior para que se possa calcular a concentração de poluentes ao nível do solo.

4.3 Expressões para o parâmetro de dispersão lateral

O parâmetro de dispersão lateral é importante para calcularmos a concentração tridimensional do poluente. Todas as soluções encontradas neste trabalho são bidimensionais $c(x, z)$, assim para calcular a concentração tridimensional $C(x, y, z)$, difusão lateral precisa ser incluída. Assumindo que a pluma apresenta uma distribuição Gaussiana da concentração

na lateral, podemos escrever que:

$$\bar{c}(x, y, z) = c(x, z) \frac{e^{(-y^2/2\sigma_y^2)}}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} . \quad (4.11)$$

Essa fórmula (4.11) é utilizada para calcular a concentração máxima ao nível do solo $C(x, 0, 0)$.

Neste trabalho, as fórmulas utilizadas para calcular σ_y foram:

- Condições instáveis [Degrazia et al., 1998]:

$$\frac{\sigma_y^2}{h^2} = \frac{0,21}{\pi} \int_0^\infty \sin^2(2,26\psi^{1/3}X^*n') \frac{dn'}{(1+n')^{5/3}n'^2} , \quad (4.12)$$

em que $X^* = xw_*/\bar{u}h$ é a distância adimensional, h é a altura da CLC e w_* é a escala de velocidade convectiva. A integral acima é resolvida fazendo uma mudança de variáveis para o intervalo $[-1,1]$. A equação (4.12) contém a função dissipação molecular ψ que é expressa como [Hojstrup, 1982]:

$$\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2} , \quad (4.13)$$

na qual L é o comprimento de Monin-Obukhov definido na camada limite superficial.

- Condições estáveis [Cirillo e Poli, 1992]:

O parâmetro de dispersão lateral σ_y pode ser escrito com a equação usada para relacionar σ_y a σ_θ (raiz quadrada do valor médio da direção horizontal do vento). Cirillo e Poli [Cirillo e Poli, 1992] propuseram a seguinte relação para estimar σ_y de σ_θ :

$$\sigma_y = x[\sinh(\sigma_\theta^2)]^{1/2} . \quad (4.14)$$

4.4 Perfil do Vento

As equações usadas pelo modelo para calcular o vento médio são as de similaridade [Panofsky e Dutton, 1984]:

$$\bar{u} = \frac{u_*}{k} \left[\ln \frac{z-d}{z_0} - \psi_m \left(\frac{z-d}{L} \right) \right] \quad se \quad z \leq z_b \quad (4.15)$$

$$\bar{u} = \bar{u}(z_b) \quad se \quad z > z_b \quad (4.16)$$

em que $z_b = \min[|L|, 0, 1h]$, k é a constante de von-Kármán ($k \cong 0,4$), z_0 é a rugosidade do terreno. O deslocamento do plano zero (d) (m) é uma altura acima da superfície em que a velocidade do vento é nula e é consequência do escoamento sobre obstáculos tais como árvores ou construções, sendo desconsiderado neste trabalho ($d = 0$). A função estabilidade ψ_m é expressa em termos das relações de Businger:

$$\psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = -4,7\frac{z}{L} \quad \text{para} \quad 1/L \geq 0,$$

$$\psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = \ln\left(\frac{1+x^2}{2}\right) + \ln\left(\frac{1+x}{2}\right)^2 - 2\arctan x + \frac{\pi}{2} \quad \text{para} \quad 1/L < 0,$$

com $x = (1 - 15\frac{z}{L})^{\frac{1}{4}}$.

Alternativamente, a velocidade do perfil de vento pode ser descrita por uma lei de potência como [Panofsky e Dutton, 1984]

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^\alpha, \quad (4.17)$$

na qual \bar{u} e \bar{u}_1 são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas z e z_1 e α é um expoente que está relacionado com a intensidade da turbulência [Irwin, 1979].

4.5 Índices Estatísticos

Geralmente, procura-se objetivar a avaliação da performance dos modelos através da utilização de índices estatísticos que descrevem a capacidade de representar dados observados (seção 4.1). Para a elaboração desta análise estatística, emprega-se aqui um programa desenvolvido por Hanna em 1989 [Hanna, 1989]. Estes índices estatísticos são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental Americana (USEPA), pela Força Aérea Americana (*US Air Force*), pelo Instituto Americano do Petróleo (API), bem como pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera após o *Workshop "Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessments in Europa"*, realizado na Bélgica em 1994 [Olesen, 1995].

As notações utilizadas para os índices o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas e previstas, C é a concentração de poluentes, e σ é o desvio padrão.

Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

1. Erro quadrático médio normalizado: $NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o} \overline{C_p}}$
informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. É uma estatística adimensional, e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.
2. Coeficiente de correlação: $COR = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}$
descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para um boa performance, o seu valor deve ser 1.
3. Fator de dois: FA2
fração de dados (% normalizados a 1) que estão entre $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$. Quanto mais próximo de 1 este valor estiver, maior é a confiabilidade no modelo.
4. Fração de Inclinação: $FB = \frac{\overline{C_o - C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}$
informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.
5. Desvio fracional padrão: $FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)}$
O valor ótimo é zero.

5. RESULTADOS

Neste capítulo, apresentam-se os resultados numéricos e estatísticos obtidos com o método GILTT, na ordem em que foram desenvolvidos nesta tese. Cabe salientar que não estamos apresentando todos os resultados que obtivemos, escolhendo os mais relevantes. Além disso, informações e resultados adicionais podem ser encontrados nos Apêndices I a X.

Para a obtenção da concentração de poluentes as parametrizações da turbulência e os dados meteorológicos dos experimentos discutidos no Capítulo 4 foram utilizados. Para a obtenção dos resultados numéricos utilizou-se a linguagem de programação Fortran 90. O computador utilizado nas simulações foi um Fujitsu Siemens, Intel Celeron M, processador de 1.60 GHz, 1024 MB de memória RAM, sistema operacional Windows XP.

5.1 Resultados para os modelos com fechamento Fickiano da turbulência

5.1.1 Problema estacionário

Consideremos primeiramente o problema independente do tempo representado pela equação (3.54). Num primeiro momento consideraremos $\bar{w} = 0$; a análise para o caso $\bar{w} \neq 0$ será abordada no item (5.2).

Para verificar o comportamento da concentração de poluentes ao nível do solo foram utilizados os dados do experimento oito de Copenhagen (informações sobre o experimento encontram-se no capítulo anterior). O experimento 8 foi escolhido por ser o caso mais convectivo. Para tanto, foram escolhidos 200 autovalores, e a concentração de poluentes foi avaliada de 5 em 5 autovalores. Na tabela (5.1) mostra-se o comportamento dos resultados, como uma função da soma dos autovalores N , da concentração de poluentes normalizada pela taxa de emissão Q em diferentes distâncias da fonte (os valores para $N = 10, 20, 30, 40, 50$ e 60 foram omitidos devido ao comprimento da tabela). Estes mesmos dados encontram-se na Figura (5.1), e pode-se observar uma clara convergência numérica dos resultados da concentração de poluentes, obtidos na Tabela (5.1), com o aumento do número de autovalores

N . Para visualizar melhor o que acontece no início das simulações utilizamos apenas os 60 primeiros autovalores nos gráficos. Foram utilizados o coeficiente de difusão da equação (4.1) e o perfil de vento potência. Foram necessários 120s para obter estes resultados.

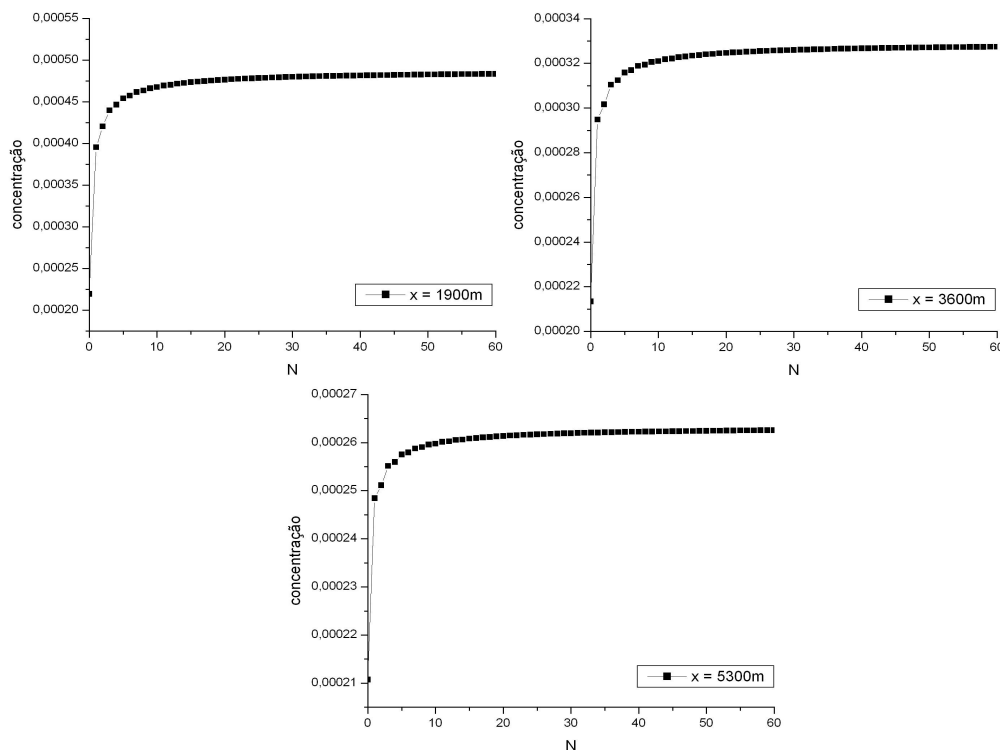


Figura 5.1 – Convergência numérica da concentração de poluentes $(c(x,0)/Q)$ utilizando a equação (3.54), experimento 8 de Copenhagen, coeficiente de difusão da equação (4.1) e o perfil de vento potência.

Podemos observar da Figura (5.1) que para $N = 50$ autovalores a convergência numérica do problema está garantida. Portanto, nesta tese, o valor do truncamento da série (equação (3.17)) será sempre em valor igual ou superior a 50 autovalores. Para a obtenção dos resultados numéricos desta seção utilizamos $N = 100$ autovalores na solução em série. Na Tabela (5.2) encontram-se as concentrações superficiais integradas lateralmente para os nove experimentos de Copenhagen. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $c(x,0)/Q$, C_o representa as concentrações observadas experimentalmente e C_p

Tabela 5.1 – Comportamento da concentração de poluente ($c(x,0)/Q$) para o experimento 8 de Copenhagen, utilizando a equação (3.54), coeficiente de difusão da equação (4.1) e o perfil de vento potência.

N	x=1900m	x=3600m	x=5300m
5	0,000454123	0,000315909	0,000257518
15	0,000473416	0,000323471	0,000260830
25	0,000478414	0,000325457	0,000261702
35	0,000480758	0,000326303	0,000262112
45	0,000482117	0,000326934	0,000262350
55	0,000482999	0,000327286	0,000262505
65	0,000483611	0,000327531	0,000262612
70	0,000483845	0,000327624	0,000262653
75	0,000484056	0,000327709	0,000262691
80	0,000484231	0,000327779	0,000262721
85	0,000484390	0,000327843	0,000262749
90	0,000484524	0,000327896	0,000262773
95	0,000484646	0,000327953	0,000262794
100	0,000484751	0,000327987	0,000262813
105	0,000484846	0,000328026	0,000262830
110	0,000484930	0,000328059	0,000262844
115	0,000485006	0,000328089	0,000262858
120	0,000485072	0,000328116	0,000262869
125	0,000485133	0,000328140	0,000262880
130	0,000485186	0,000328161	0,000262889
135	0,000485235	0,000328181	0,000262897
140	0,000485278	0,000328198	0,000262905
145	0,000485318	0,000328214	0,000262912
150	0,000485352	0,000328228	0,000262918
155	0,000485384	0,000328241	0,000262924
160	0,000485412	0,000328252	0,000262929
165	0,000485438	0,000328260	0,000262934
170	0,000485461	0,000328271	0,000262938
175	0,000485481	0,000328280	0,000262941
180	0,000485499	0,000328287	0,000262944
185	0,000485516	0,000328294	0,000262947
190	0,000485530	0,000328299	0,000262950
195	0,000485543	0,000328304	0,000262952
200	0,000485555	0,000328309	0,000262954

representa as concentrações previstas pelo modelo. Os resultados obtidos utilizando a GILTT são confrontados com os resultados experimentais (concentrações integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão do poluente de [Gryning et al., 1987]). Devemos ter em mente que os experimentos de campo geralmente possuem imprecisões e, por este motivo, a comparação com modelos que apresentem solução similar da equação de advecção-difusão (analítica ou semi-analítica) é de grande importância. Por este motivo os resultados obtidos também são comparados com os obtidos por [Moreira, 1999] e [Degrazia, 1998]. Analisando-se a Tabela (5.2) verifica-se uma boa concordância dos resultados do modelo com os dados experimentais.

A Tabela (5.3) apresenta o resultado dos índices estatísticos, obtidos pela GILTT e comparados com os obtidos em [Moreira, 1999] pelo método ADMM e em [Degrazia, 1998] com o tradicional modelo gaussiano (Detalhes sobre os referidos modelos podem ser encontrados em [Degrazia, 1998] e [Moreira et al., 2006b]). Observa-se, nos resultados obtidos pelos três modelos, um erro quadrático médio (NMSE) baixo, coeficiente de correlação (COR) alto (em torno de 90 %) e um fator de dois (FA2) máximo, indicando bons resultados.

Já na Tabela (5.4) apresentam-se os resultados dos índices estatísticos, obtidos pela GILTT e comparados com os dados experimentais de Copenhagen, Prairie-Grass (ambos convectivos) e Hanford (estável) utilizando o perfil de similaridade para o vento e coeficientes de difusão (4.1) e (4.2), respectivamente. Analisando-se os índices estatísticos [Hanna, 1989], podemos afirmar que o modelo simula satisfatoriamente as concentrações observadas dos três experimentos.

A seguir, na Figura (5.2), apresentam-se os gráficos de espalhamento para os três experimentos, nos quais temos as concentrações observadas experimentalmente em função das previstas pelo modelo, utilizando-se o coeficiente de difusão dado pela equação (4.1), para os experimentos de Copenhagen e Prairie-Grass e equação (4.2) para o experimento de Hanford. O perfil de vento similaridade foi utilizado.

Na análise de gráficos de espalhamento, quanto mais próximos estiverem os resultados da reta central, melhores os resultados. As retas laterais pontilhadas indicam o fator de dois (FA2), ou seja, se todos os dados obtidos estão entre estas retas tem-se um FA2 igual a 1 (valor máximo). Observa-se pelo gráfico de espalhamento da Figura (5.2) uma boa concordância dos resultados obtidos com a GILTT para o caso do experimento de Copenhagen,

Tabela 5.2 – Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen, utilizando a equação (3.54), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $c(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.

Expt	Dist. (m)	Dados - C_o ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	GILTT - C_p ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	ADMM - C_p ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	Gaussiano - C_p ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)
1	1900	6,48	6,84	7,16	6,32
	3700	2,31	3,97	3,95	4,10
2	2100	5,38	4,65	4,05	3,71
	4200	2,95	3,05	2,87	2,58
3	1900	8,20	8,14	7,86	7,53
	3700	6,22	5,19	5,12	5,40
	5400	4,30	3,98	3,78	4,35
4	4000	11,66	9,24	9,04	8,65
5	2100	6,72	8,58	7,18	6,14
	4200	5,84	6,71	6,08	5,63
	6100	4,97	5,39	5,04	4,78
6	2000	3,96	3,51	2,97	3,19
	4200	2,22	2,50	2,30	2,39
	5900	1,83	1,98	1,86	1,97
7	2000	6,70	4,67	4,42	4,10
	4100	3,25	2,76	2,71	2,62
	5300	2,23	2,23	2,14	2,22
8	1900	4,16	4,83	4,70	4,21
	3600	2,02	3,27	3,23	3,20
	5300	1,25	2,63	2,50	2,62
9	2100	4,58	4,45	3,91	3,60
	4200	3,11	2,91	2,75	2,44
	6000	2,59	2,19	1,00	1,93

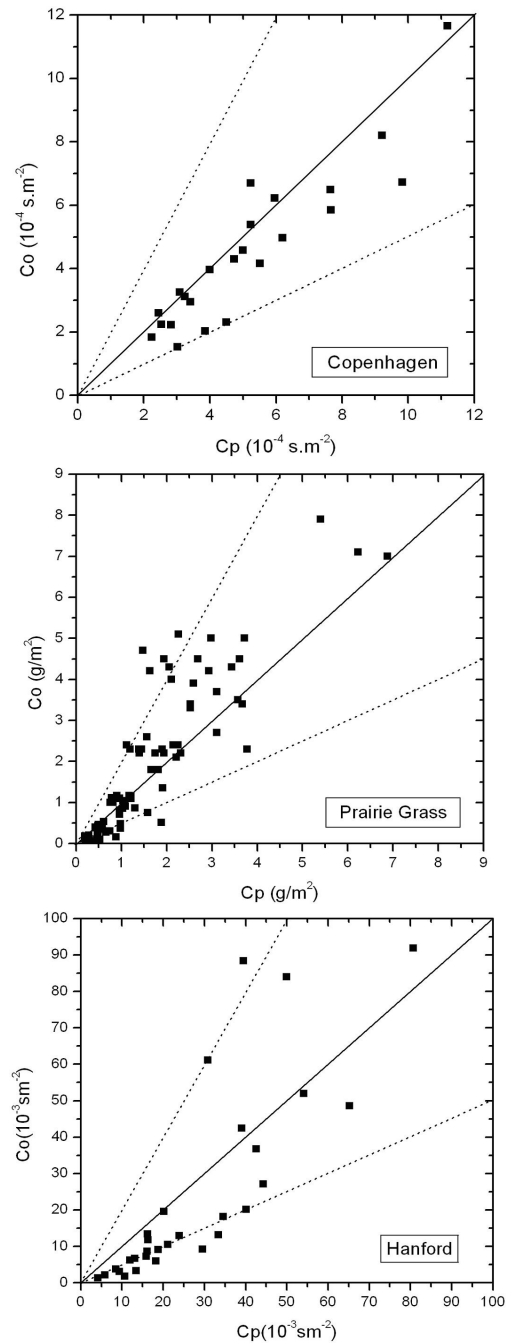


Figura 5.2 – Gráfico de espalhamento dos dados observados experimentalmente de concentração (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo (Cp), utilizando a equação (3.54), perfil de vento similaridade e: (a) experimento de Copenhagen e coeficiente de difusão (4.1); (b) experimento de Prairie-Grass e coeficiente de difusão (4.1); (c) experimento de Hanford e coeficiente de difusão (4.2).

Tabela 5.3 – Avaliação estatística do modelo (3.54) utilizando o experimento de Copenhagen, coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.

Modelos	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT	0,05	0,91	1,00	0,00	0,14
ADMM	0,06	0,92	1,00	0,06	0,19
Gaussiano	0,06	0,89	1,00	0,02	0,09

Tabela 5.4 – Avaliação estatística do modelo (3.54) utilizando os experimentos de Copenhagen, Prairie-Grass e Hanford e perfil de vento similaridade.

Modelos	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Copenhagen (convectivo, fonte alta)	0,06	0,92	1,00	-0,14	-0,02
Prairie-Grass (convectivo, fonte baixa)	0,39	0,82	0,57	-0,14	0,37
Hanford (estável, fonte baixa)	0,32	0,90	0,72	0,16	0,33

que é um experimento de fonte alta. Para os casos de fonte baixa estável (Hanford) e instável (Prairie-Grass) os resultados são satisfatórios. No caso do experimento de Hanford podemos observar que o modelo superestima as concentrações observadas experimentalmente. Já para o caso de Prairie-Grass acontece o contrário, ou seja, o modelo subestima os dados experimentalmente observados.

É muito importante ter conhecimento da distância da fonte onde ocorre a concentração máxima de poluentes. Para isto, na Figura (5.3) analisa-se o gráfico da concentração adimensional ($C^* = \bar{c}u h/Q$) ao nível do solo ($z/h = 0$) em função da posição $X^* = xw_*/\bar{u}h$ para diferentes alturas de fonte adimensionais ($H_s/h = 0,025; 0,1; 0,25; 0,5$). O experimento 8 de Copenhagen é utilizado. Para a altura $H_s/h = 0,025$ é verificado um pico acentuado na área próxima à fonte. Com o crescimento da altura da fonte, observam-se um decaimento do pico e uma diferente localização do mesmo (como esperado, a dispersão é maior pois a chaminé está mais alta).

Na Figura (5.4) mostramos as isolinhas da concentração predita pela GILTT para diferentes alturas de fonte, para o caso do cenário meteorológico do experimento 1 de Prairie-Grass, ou seja, $u_* = 0,2m/s$, $L = -9m$, $w_* = 0,84m/s$ e $h = 260m$ (informações sobre o experimento encontram-se no capítulo anterior). Utilizam-se o coeficiente de difusão (4.1)

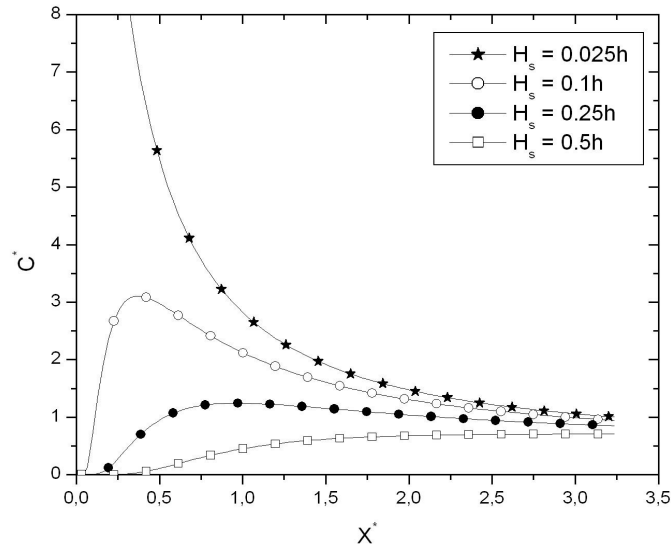


Figura 5.3 – Gráfico da concentração adimensional ao nível do solo ($C^* = \bar{c}u\bar{h}/Q$) em função da posição adimensional $X^* = xw_*/\bar{u}h$ para o experimento 8 de Copenhagen, utilizando a equação (3.54), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.

e perfil de vento similaridade. Podemos observar nestas figuras a forte influência do coeficiente de difusão escolhido bem como de sua derivada, que aqui são coeficientes variáveis com a altura (caso estes coeficientes fossem constantes teríamos quatro gráficos similares ao apresentado para $H_s/h = 0,5$, ou seja, simétricos em relação ao eixo z). Utilizando o mesmo experimento, na Figura (5.5), apresentam-se os perfis verticais de concentração ($C^{*z} = \bar{c}u\bar{h}/Q$) para três distâncias adimensionais ($X^* = 0,25; 0,5$ e $0,75$) e altura de fonte adimensional (a) $H_s/h = 0,05$, b) $H_s/h = 0,1$, c) $H_s/h = 0,25$). Estes gráficos apresentam valores maiores de concentração para distâncias menores, e menores com o crescimento da distância. Além disso, com o crescimento da distância, há uma tendência à obtenção de um perfil homogêneo de concentração.

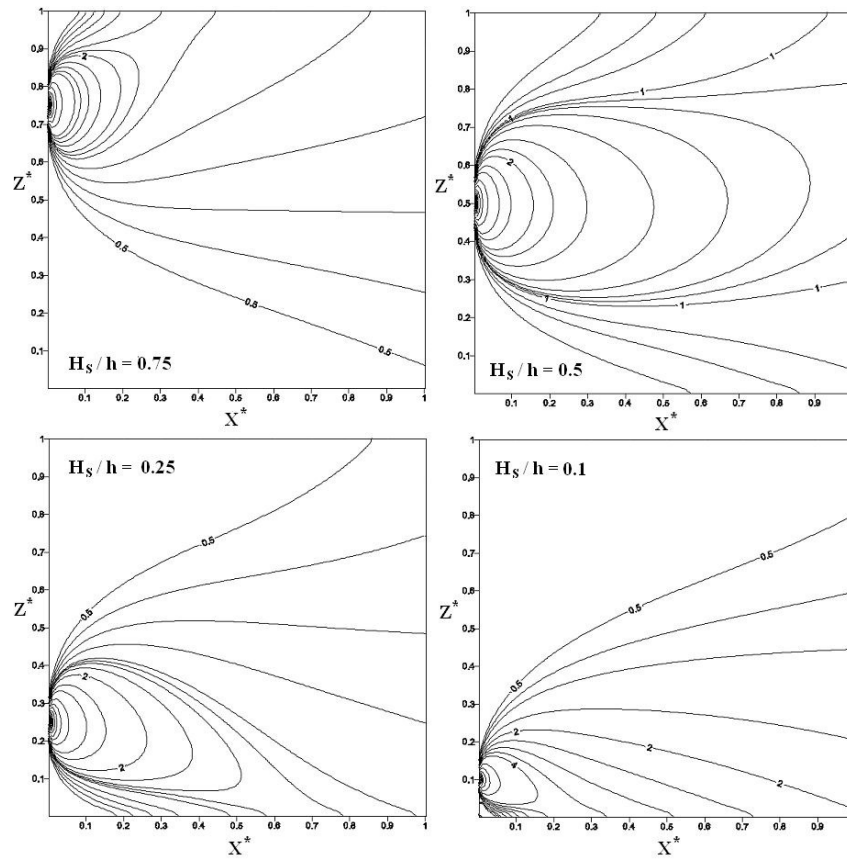


Figura 5.4 – Isolinhas da concentração ($C^* = \bar{c}uh/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$) predita para diferentes alturas de fonte para o caso do cenário meteorológico do experimento 1 de Prairie-Grass, utilizando a equação (3.54), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento similaridade.

5.1.2 Problema transiente

Consideremos agora o problema dependente do tempo (equação (3.50)). Novamente consideraremos $\bar{w} = 0$; a análise para o caso $\bar{w} \neq 0$ será abordada no item (5.2). Para a obtenção da concentração de poluentes, utilizamos os dados meteorológicos do experimento de Copenhagen apresentados nas Tabelas (4.2) e (4.3) bem como as alturas da camada limite apresentadas na Tabela (4.1). Foram utilizados o coeficiente de difusão da equação (4.1), o perfil de vento potência e $N = 100$ autovalores na solução em série (equação (3.17)) para a obtenção dos resultados numéricos.

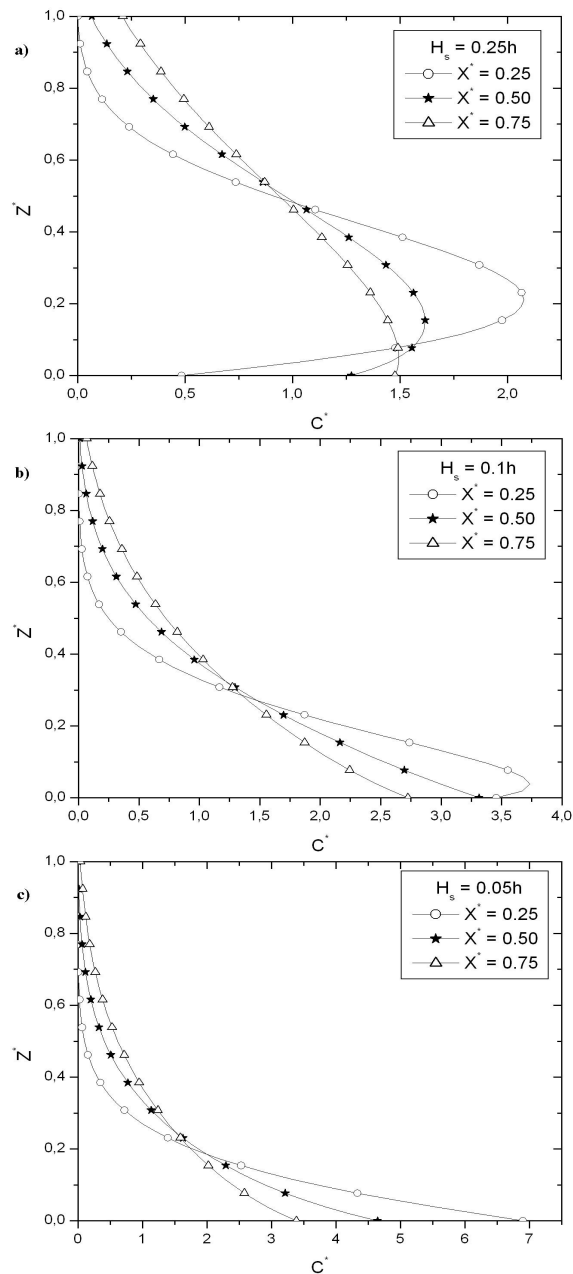


Figura 5.5 – Perfil vertical da concentração $C^* = \bar{c}u h/Q$ para três distâncias adimensionais ($X^*=0,25; 0,5;0,75$) e altura da fonte adimensional: a) $H_s/h = 0,25$, b) $H_s/h = 0,1$, c) $H_s/h = 0,05$. Experimento 1 de Prairie-Grass, utilizando a equação (3.54), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento similaridade.

No experimento de Copenhagem as emissões de SF_6 começaram 1h antes do início das amostragens, ou seja, depois de uma hora de emissão do poluente é que as concentrações começaram a ser medidas. As concentrações foram obtidas considerando-se médias de 20 minutos na segunda hora. Assim, obtemos três medidas da concentração de poluentes na segunda hora. Além disso, como os dados de L , u_* e w_* são de 10 em 10 minutos utiliza-se um passo de 600 s. A concentração obtida experimentalmente não é dependente do tempo, por isso foi feita uma média aritmética dos valores das concentrações encontradas de 10 em 10 *min* na segunda hora. A concentração encontrada é normalizada pela taxa de emissão Q em diferentes distâncias da fonte.

Antes de mais nada precisamos definir o número de pontos de quadratura que iremos utilizar para a inversão da transformada de Laplace (equação (3.45)). Na Figura (5.6) plotamos a concentração adimensional integrada lateralmente ($C^* = c\bar{u}h/Q$) como uma função da distância adimensional da fonte ($X^* = xw_*/\bar{u}h$) para diferentes tempos ($t = 500$; 1000; 1500; 2000 s) considerando altura de fonte adimensional $H_s = 0,25h$ e diferentes pontos de quadratura. Segundo Stroud e Secrest [Stroud e Secrest, 1966], o módulo da parte real das raízes do esquema de quadratura Gaussiana para a inversão da transformada de Laplace (equação (3.45)), cresce conforme M aumenta (ordem de aproximação). Como a solução da equação de advecção-difusão transiente considerada apresenta termos exponenciais, é fácil perceber que a partir da solução numérica podem surgir para os argumentos positivos *overflow* e para os negativos, *underflow*, quando M assume valores maiores que 8. Vale a pena ressaltar que, os cálculos aqui apresentados foram feitos em um microcomputador PC com precisão simples (32 bits). Assim, podemos garantir que os resultados apresentados são de boa precisão sob o ponto de vista estatístico. Sobre este comentário, devemos observar que as curvas para a concentração na Figura (5.6), especialmente para tempos pequenos, apresentam oscilações não-físicas para $M = 4$ e $M = 8$. Analisando-se com mais detalhes a Figura (5.6) observamos que a solução transiente, como esperado, converge para a solução estacionária e as oscilações desaparecem. Portanto, a partir de agora adotaremos o valor $M = 2$ na fórmula (3.45) de modo a eliminar este problema. Também podemos observar que para tempos pequenos (como o caso de $t = 500$ s) a concentração do poluente não vai a zero como o esperado já que em pouco tempo este poluente não pode viajar tão longe. Este problema numérico ocorre devido à inversão numérica escolhida. Este problema numérico

Tabela 5.5 – Avaliação estatística do modelo (3.50) utilizando o experimento de Copenhagen. Considerou-se a solução do problema procedendo-se a inversão de Laplace pelo método da quadratura de Gauss (equação(3.45)) e pelo método FT (equação(3.47)).

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT (equação(3.45))	0,06	0,89	1,00	-0,08	0,09
GILTT (equação(3.47))	0,04	0,91	1,00	-0,02	0,08

é solucionado quando fazemos a inversão numérica de Laplace utilizando o método Fixed-Talbot (equação (3.47)) como podemos ver na Figura (5.7). Cabe ainda salientar que nosso interesse neste trabalho é para tempos maiores do que meia hora no mínimo.

Na Figura (5.8) é apresentado um gráfico de espalhamento da concentração observada experimentalmente ao nível do solo e das simuladas pelo modelo proposto, normalizada pela taxa de emissão ($c(x, 0, t)/Q$), para $M = 2$ pontos de quadratura. Observa-se que o modelo reproduz muito bem as concentrações observadas para estes pontos de quadratura.

Na Tabela (5.5) apresentam-se os resultados estatísticos obtidos. Analisando-se os índices estatísticos [Hanna, 1989] da Tabela (5.5) vemos que o modelo simula muito bem as concentrações observadas, com valores de NMSE, FB e FS próximos a zero, COR próximo a 1 e FA2 máximo. Cumpre observar que para este problema, além da solução do problema ter sido obtida procedendo-se à inversão de Laplace pelo método da quadratura Gaussiana (equação (3.45)), também foi considerada a inversão de Laplace pelo método Fixed-Talbot (equação (3.47)) considerando $M^* = 5$. Observa-se uma pequena melhora nos resultados da GILTT utilizando-se o método FT. Cabe ressaltar que escolhemos $M^* = 5$, para o caso da inversão de Laplace pelo método Fixed-Talbot, pois para mais casas decimais de precisão ($M^* = 10$ ou 50 por exemplo) o tempo computacional aumenta de forma exponencial, passando de minutos a horas. O tempo computacional para $M = 2$ e $M^* = 5$, para 100 autovalores, é de aproximadamente 4 *min*.

Nas Tabelas (5.6) e (5.7) encontram-se as concentrações superficiais integradas lateralmente e normalizadas pela taxa de emissão $c(x, 0, t)/Q$. C_o representa as concentrações observadas experimentalmente e C_p as obtidas pela GILTT invertendo a transformada de Laplace pelos métodos da Quadratura de Gauss (QG), $M = 2$, e Fixed-Talbot (FT), $M^* =$

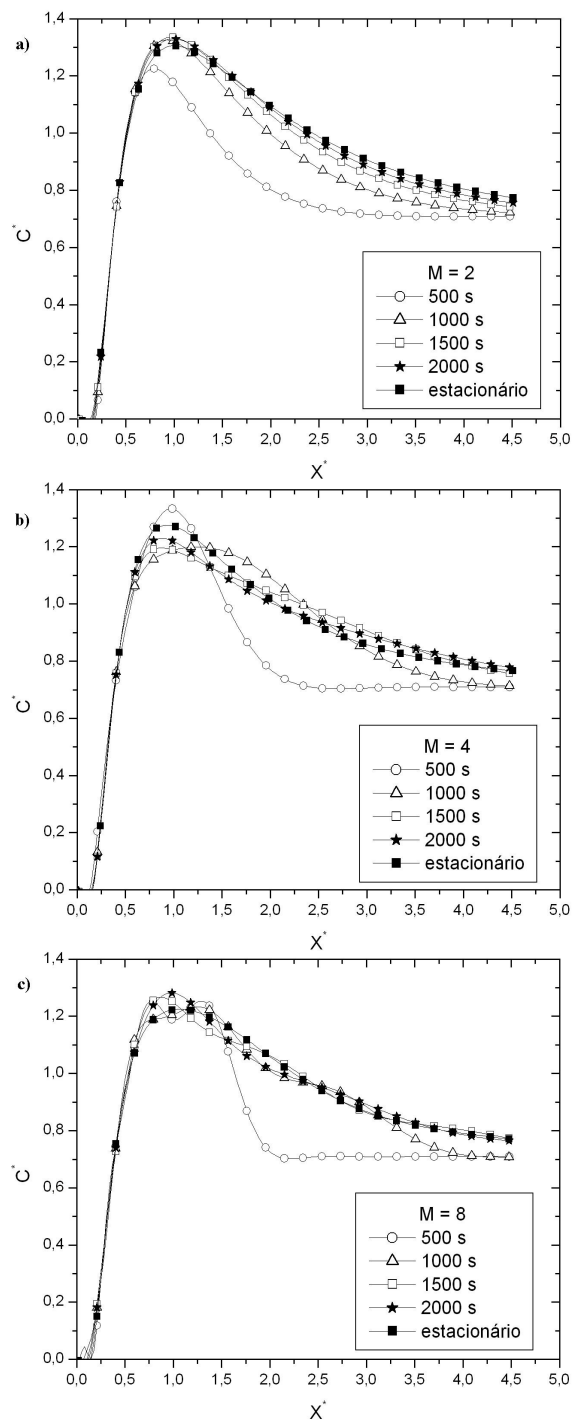


Figura 5.6 – Concentração adimensional integrada lateralmente como uma função da distância adimensional da fonte para diferentes tempos e pontos de quadratura: a) $M = 2$; b) $M = 4$; c) $M = 8$ ($C^* = \bar{c} \bar{u} h / Q$, $X^* = x w_* / \bar{u} h$ e $H_s = 0,25h$). Foram utilizados o problema (3.50), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.

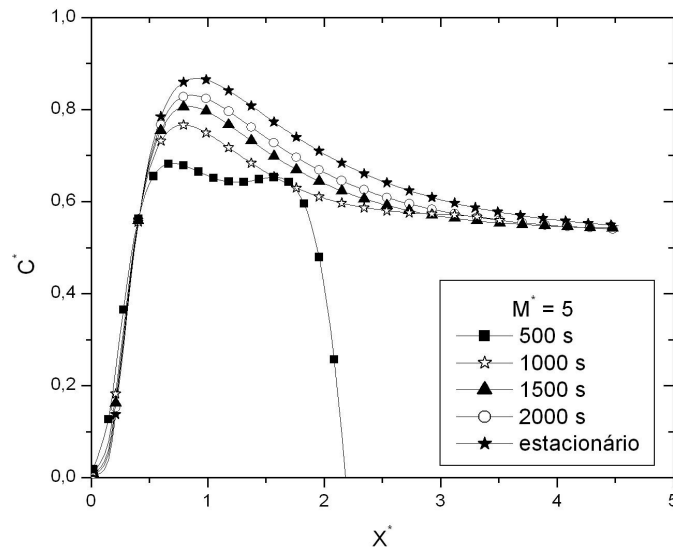


Figura 5.7 – Concentração adimensional integrada lateralmente $C^* = \bar{c} \bar{u} h / Q$ como uma função da distância adimensional da fonte $X^* = x w_* / \bar{u} h$ para diferentes tempos e precisão $M^* = 5$ e $H_s = 0,25h$). Foram utilizados o problema (3.50), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.

5. Na Tabela (5.6) são apresentadas as concentrações obtidas fazendo a média aritmética dos valores das concentrações encontradas de 10 em 10 *min* na segunda hora. Na Tabela (5.7) podemos ver as concentrações obtidas em cada um dos três períodos da segunda hora de medição da concentração de poluentes. Os resultados obtidos utilizando a GILTT são confrontados com os resultados experimentais. Analisando-se as Tabelas (5.6) e (5.7) verifica-se uma ótima concordância dos resultados do modelo com os dados experimentais.

Da análise dos resultados obtidos nesta seção, somos confiantes em afirmar que o método GILTT é um método analítico robusto sob o ponto de vista computacional, por isso promissor, no sentido de que a generalização do problema estacionário para o transiente foi realizada de maneira simples pela técnica da transformada de Laplace, para a simulação da dispersão de poluentes na atmosfera.

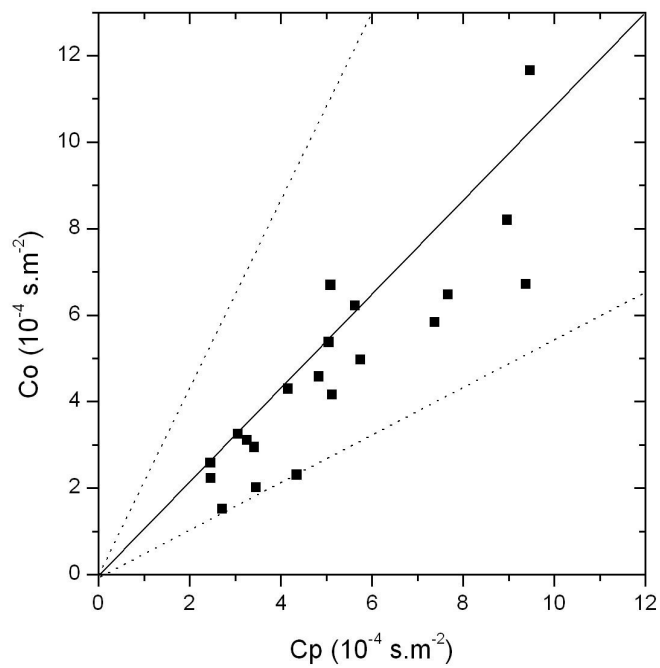


Figura 5.8 – Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e a do modelo (C_p), normalizada pela taxa de emissão ($c(x, 0, t)/Q$) para os pontos de quadratura $M = 2$ utilizando a equação (3.50), coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência.

Tabela 5.6 – Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen, utilizando a equação (3.50), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $c(x, 0, t)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente. QG significa inversão da transformada de Laplace pelo método da Quadratura Gaussiana e FT pelo algoritmo Fixed-Talbot.

Expt	Dist. (m)	Dados - C_o ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	GILTT - C_p	
			QG ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	FT ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)
1	1900	6,48	7,66	6,52
	3700	2,31	4,35	3,49
2	2100	5,38	5,05	4,93
	4200	2,95	3,41	2,94
3	1900	8,20	8,96	8,17
	3700	6,22	5,62	4,97
	5400	4,30	4,15	3,91
4	4000	11,66	9,47	10,49
5	2100	6,72	9,38	8,83
	4200	5,84	7,37	6,29
	6100	4,97	5,75	4,95
7	2000	6,70	5,09	4,91
	4100	3,25	3,06	2,66
	5300	2,23	2,46	2,11
8	1900	4,16	5,12	5,37
	3600	2,02	3,45	3,60
	5300	1,25	2,72	2,96
9	2100	4,58	4,83	4,74
	4200	3,11	3,26	2,81
	6000	2,59	2,46	2,01

Tabela 5.7 – Concentrações superficiais integradas lateralmente (Cp) para o experimento de Copenhagen, para os três períodos de 20 minutos da segunda hora de medição do poluente utilizando-se a equação (3.50), o coeficiente de difusão (4.1) e perfil de vento potência. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $c(x, 0, t)/Q$, e Co representa as concentrações observadas experimentalmente.

Exp	Dist. (m)	Período I			Período II			Período III		
		Co	Cp1	Cp2	Co	Cp1	Cp2	Co	Cp1	Cp2
1	1900	5,60	7,73	6,17	8,27	7,66	6,56	5,51	7,59	6,83
	3700	1,74	4,29	3,27	2,25	4,37	3,51	3,02	4,38	3,69
2	2100	4,36	5,12	4,78	5,14	5,04	4,95	6,73	5,00	5,07
	4200	2,72	3,44	2,79	1,96	3,41	2,96	4,20	3,37	3,07
3	1900	6,00	9,05	7,83	9,26	8,96	8,21	9,32	8,87	8,48
	3700	4,70	5,59	4,74	6,53	5,64	4,99	7,62	5,64	5,17
	5400	3,93	4,07	3,77	5,24	4,17	3,92	4,01	4,21	4,04
4	4000	6,26	9,44	10,37	9,97	9,48	10,51	17,37	9,48	10,60
5	2100	5,78	9,48	8,53	8,62	9,38	8,88	5,89	9,27	9,08
	4200	5,09	7,35	5,96	6,55	7,39	6,33	5,91	7,37	6,59
	6100	5,07	5,64	4,70	5,37	5,78	4,97	4,65	5,82	5,18
7	2000	2,72	5,16	4,75	12,74	5,09	4,93	5,25	5,03	5,06
	4100	2,31	3,08	2,53	1,34	3,06	2,68	2,42	3,03	2,78
	5300	2,45	2,46	2,01	0,64	2,46	2,13	1,49	2,45	2,21
8	1900	4,00	5,16	5,26	4,84	5,12	5,39	3,65	5,07	5,47
	3600	2,31	3,47	3,53	1,34	3,45	3,61	2,42	3,43	3,67
	5300	2,45	2,72	2,92	0,64	2,72	2,97	1,49	2,71	3,00
9	2100	3,98	4,90	4,59	3,93	4,83	4,76	5,90	4,77	4,87
	4200	3,46	3,29	2,67	2,44	3,26	2,83	3,40	3,22	2,94
	6000	3,96	2,46	1,88	2,04	2,46	2,02	1,76	2,44	2,11

5.1.3 Considerando a deposição de poluentes

Consideremos agora os problemas estacionário (equação (3.54)) e dependente do tempo (equação (3.50)), nos quais o efeito da deposição de poluentes no solo é levado em conta considerando-se em $z = 0$ a condição de contorno (3.55). Para a obtenção da concentração de poluentes utilizam-se os dados meteorológicos do experimento de Hanford (informações sobre o experimento encontram-se no capítulo anterior). Foram utilizados o coeficiente de difusão da equação (4.2), o perfil de vento potência e $N = 60$ autovalores na solução em série para a obtenção dos resultados numéricos para ambos os problemas. Os autovalores da equação transcendental (3.56) foram calculados pelo método de Newton-Rapson.

Na Tabela (5.8) encontram-se os dados meteorológicos e da concentração de poluente que deposita (C_d) SF_6 e que não deposita (C_{nd}) ZnS para os seis experimentos de Hanford. Cumpre observar que o vento aqui utilizado difere do vento da Tabela (4.7) que era medido em $z = 2 m$ de forma a podermos comparar com os dados da literatura, e a explicação para isto pode ser encontrada no artigo de [Doran et al., 1984], artigo este utilizado nas comparações feitas. Os dados de C_d/C_{nd} obtidos com a GILTT também são apresentados na Tabela (5.8). Como um teste, já que possuímos apenas dados experimentais estacionários, utilizou-se $t = 3600 s$ para avaliar a solução da equação transiente cuja inversão da transformada de Laplace é feita pelo método FT com $M^* = 5$.

Em [Doran e Horst, 1985] são apresentados quatro modelos que avaliam a deposição seca no solo por quatro diferentes aproximações: a aproximação *source depletion* de [Chamberlain, 1953], o modelo *source depletion* corrigido de [Horst, 1983], o modelo K proposto por [Ermak, 1977] e [Rao, 1981] e o modelo K corrigido de [Rao, 1981]. Para podermos comparar os resultados obtidos com a GILTT, novos parâmetros estatísticos tiveram de ser calculados (usados no artigo de [Doran e Horst, 1985]) e descritos por [Fox, 1981] e [Wilmott, 1982]:

Viés médio (*Mean bias*): $(\bar{d}) = \sum_{i=1}^{N^*} d_i / N^*$

Variância (*Variance*): $(SS^2) = \sum_{i=1}^{N^*} (d_i - \bar{d})^2 / (N^* - 1)$

Erro absoluto médio (*Mean absolute error*): $(MAE) = \sum_{i=1}^{N^*} |Cp_i - Co_i| / N^*$

Tabela 5.8 – Dados meteorológicos e do poluente para os seis experimentos de Hanford. Dados do poluente são normalizados pela taxa de emissão Q . Índice d refere-se ao material que deposita e índice nd refere-se ao material que não deposita.

Exp.	Arc (m)	ZnS/Q ($s.m^{-2}$)	SF_6/Q ($s.m^{-2}$)	$\bar{u}(0,53\sigma_z)$ ($m.s^{-1}$)	σ_z (m)	V_g ($cm.s^{-1}$)	C_d/C_{nd} expt	C_d/C_{nd} (Eq. 3.54)	C_d/C_{nd} (Eq. 3.50)
1	800	0,00224	0,00373	7,61	28,0	4,21	0,601	0,76	0,61
	1600	0,00098	0,00214	8,53	43,4	4,05	0,459	0,67	0,53
	3200	0,00059	0,00130	9,43	65,0	3,65	0,451	0,58	0,50
2	800	0,00747	0,0129	3,23	19,0	1,93	0,579	0,52	0,40
	1600	0,00325	0,00908	3,59	24,3	1,80	0,358	0,41	0,37
	3200	0,00231	0,00722	3,83	28,7	1,74	0,320	0,30	0,34
3	800	0,00306	0,00591	4,74	28,4	3,14	0,518	0,67	0,52
	1600	0,00132	0,00331	5,40	44,6	3,02	0,399	0,57	0,47
	3200	0,00066	0,00179	6,32	70,5	2,84	0,370	0,45	0,43
4	800	0,00804	0,0201	3,00	13,0	1,75	0,400	0,50	0,38
	1600	0,00426	0,0131	3,39	17,8	1,62	0,325	0,39	0,35
	3200	0,00314	0,00915	3,75	23,1	1,31	0,343	0,29	0,32
5	800	0,00525	0,0105	3,07	24,6	1,56	0,500	0,56	0,44
	1600	0,00338	0,00861	3,24	28,5	1,47	0,393	0,45	0,42
	3200	0,00292	0,00664	3,46	34,6	1,14	0,440	0,33	0,38
6	800	0,00723	0,0134	3,17	18,6	1,17	0,540	0,59	0,49
	1600	0,00252	0,00615	3,80	34,1	1,15	0,410	0,49	0,44
	3200	0,00125	0,00311	4,37	58,7	1,10	0,402	0,36	0,40

Fator de concordância (*Index of agreement*): $(I) = 1 - [\sum_{i=1}^{N^*} (P'_i - O'_i) / \sum_{i=1}^{N^*} (|P'_i| + |O'_i|)^2]$

em que d_i é a diferença entre valores observados (Co_i) e preditos (Cp_i), $P'_i = Cp_i - \overline{Co_i}$, $O'_i = Co_i - \overline{Co_i}$, na qual a barra superior indica uma média e $0 < I < 1$ e N^* é o número de dados.

Na Tabela (5.9) as comparações entre os resultados obtidos pela GILTT e pelos modelos acima ([Chamberlain, 1953], [Ermak, 1977], [Horst, 1983], [Rao, 1981]) são apresentadas, e é possível ver uma boa performance da solução obtida quando comparada aos outros modelos. A abreviação *c.* na tabela significa corrigido.

Tabela 5.9 – Avaliação estatística do modelo com deposição de poluentes comparado com os modelos de [Chamberlain, 1953], [Ermak, 1977], [Horst, 1983] e [Rao, 1981].

Parâmetro	GILTT (Eq. 3.54)	GILTT (Eq. 3.50)	<i>source</i> <i>depletion</i>	<i>source</i> <i>depletion c.</i>	modelo K	modelo K <i>c.</i>
\bar{d}	0,06	0,001	0,11	0,01	0,21	0,07
MAE	0,09	0,04	0,11	0,05	0,21	0,07
SS	0,09	0,06	0,05	0,06	0,08	0,05
COR	0,76	0,73	0,82	0,70	0,63	0,78
I	0,76	0,85	0,64	0,83	0,42	0,76

A seguir, na Figura (5.9) é apresentado um gráfico de espalhamento da concentração observada experimentalmente ao nível do solo e das simuladas pelo modelo proposto (equação (3.54) com condição de contorno (3.55)). Observa-se que o modelo reproduz muito bem as concentrações observadas.

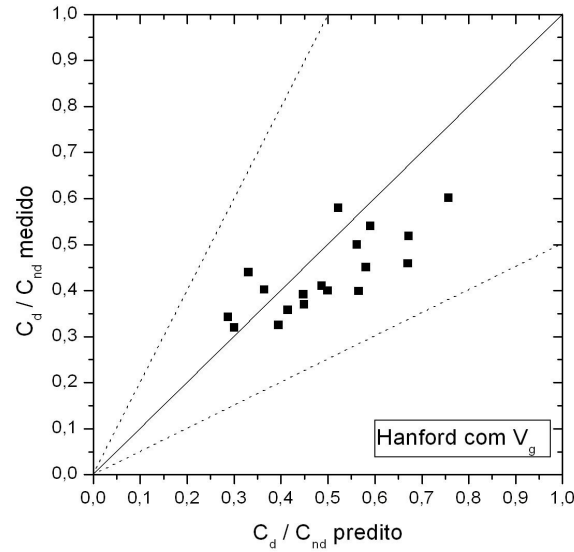


Figura 5.9 – Gráfico de espalhamento dos dados observados experimentalmente de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p), utilizando a equação de advecção-difusão-deposição, perfil de vento potência e coeficiente de difusão (4.2).

5.2 Campo de velocidades constante e geradas pelo LES

Consideremos agora o problema dependente do tempo (equação (3.50)). Foram utilizados o coeficiente de difusão da equação (4.1), o perfil de vento potência e $N = 100$ autovalores na solução em série (equação (3.17)) para a obtenção dos resultados numéricos.

Para ilustrar a assimetria do fluxo turbulento na Figura (5.10), apresentamos resultados numéricos para a concentração de poluentes em termos das variáveis adimensionais $X^* = xw_*/\bar{u}h$ e $Z^* = z/h$, bem como isolinhas de concentração para diferentes velocidades verticais do vento ($\bar{w} = -0,5; 0; 0,5$). Utilizamos uma fonte de altura $H_s = 0,25h$.

Podemos verificar a influência da velocidade vertical \bar{w} na Figura (5.10). Apesar de considerar velocidades verticais constantes, podemos verificar que quando a velocidade vertical é positiva (Figura (5.10c)), a pluma tem um comportamento ascendente. Já quando

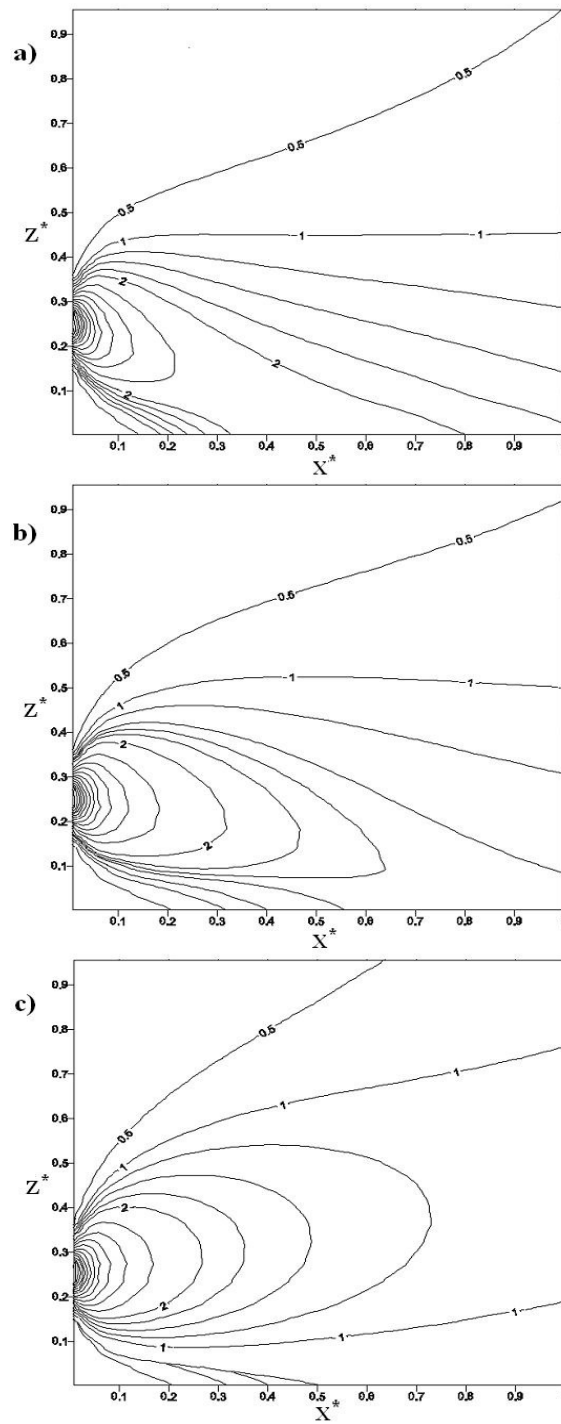


Figura 5.10 – Isolinhas de concentração adimensional previstas pelo modelo ($C^* = \bar{c}uh/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) para diferentes velocidades verticais do vento e condições estacionárias: a) $\bar{w}=-0,5$; b) $\bar{w}=0$; c) $\bar{w}=0,5$

a velocidade é negativa (Figura (5.10a)), a pluma tem um comportamento descendente. Aqui novamente podemos observar a forte influência do coeficiente de difusão escolhido bem como de sua derivada (do mesmo modo que ocorreu na Figura (5.4)), pois neste trabalho estes coeficientes são variáveis com a altura (caso estes coeficientes fossem constantes teríamos para $\bar{w} = 0$ um gráfico simétricos em relação ao eixo z , o mesmo ocorre se escolhermos a altura de fonte como sendo $H_s/h = 0,5$).

Lembrando que um dos nossos objetivos aqui é mostrar a capacidade do presente modelo de simular a dispersão de poluentes na atmosfera para problemas mais realísticos, aplicamos o método GILTT para um problema com as velocidades do vento geradas pelo LES (*Large Eddy Simulation*) [Moeng e Sullivan, 1994] com uma grade de 64x64 pontos. Os dados do LES foram gerados pelo pesquisador Umberto Rizza do *Centro Nazionale della Ricerca* (CNR Lecce/Itália). Foi simulado um experimento de dispersão em regime turbulento convectivo para testar o modelo. De acordo com o trabalho de [Nieuwstadt e de Valk, 1987], é gerado um campo turbulento quase-estacionário da CLP usando o modelo LES. Então incorpora-se o poluente no domínio de simulação e estuda-se a sua evolução resolvendo a equação de difusão correspondente. Por este procedimento é possível estudar simultaneamente a evolução da turbulência e os campos de concentração [Nieuwstadt e de Valk, 1987].

É sabido que a turbulência na CLP é gerada por dois mecanismos de forças principais: mecânico e térmico. O primeiro é relacionado com o cisalhamento do vento, e é governado por vento geostrófico. O último é diretamente relacionado ao fluxo de calor na superfície e geralmente é responsável pelo transporte convectivo de *momentum*, calor e muitos outros escalares. Seguindo os trabalhos de [Moeng e Sullivan, 1994], foi gerado uma CLP puramente convectiva

Os cálculos foram gerados num domínio retangular combinado que acomoda muitas correntes ascendentes (*updrafts*) num dado tempo. A dimensão do quadrado é de 5x5 km na direção horizontal e 2 km na direção vertical. A resolução é 64 pontos de grade em cada uma das três coordenadas. As simulações começaram a partir de fluxo laminar, com vento geostrófico constante ($10m/s$) durante todo o domínio numérico. Para ter uma forte camada de inversão acima da CLP simulada, o perfil da temperatura potencial virtual média inicial é $300K$ abaixo da altura da CLP inicial, h_0 , com um aumento de $8K$ através de seis níveis de Δz num raio de decaimento de $3K/Km$ acima disso. Os parâmetros externos, como o

domínio, tamanho da grade, vento geostrófico, fluxo de calor na superfície e a altura da camada de inversão inicial são mostrados na Tabela (5.10).

Tabela 5.10 – Parâmetros externos para as simulações com LES.

Ptos da malha	Tamanho do domínio	Vento Geostrófico	Fluxo de calor na superfície	Altura da inversão inicial
(N_x, N_y, N_z)	(L_x, L_y, L_z)	(u_g, v_g)	Q_*	$(h)_0$
	(km)	(ms^{-1})	($ms^{-1}K$)	(m)
(64, 64, 64)	(5, 5, 2)	(10, 0)	0.24	1000

A condição quase-estacionária é obtida rodando o modelo LES para 4000 passos de tempo (mais que quatro horas de simulação em tempo real). Na Tabela (5.11), mostram-se os parâmetros meteorológicos correspondentes. Estes representam o tempo inicial, ou seja, $t = 0$, para o experimento de dispersão.

Tabela 5.11 – Parâmetros meteorológicos das simulações do LES.

\bar{u}	u_*	L	w_*	h
(ms^{-1})	(ms^{-1})	(m)	(ms^{-1})	(m)
10	0,65	-12	2,1	1100

Para poder aplicar o método GILTT com os dados discretos gerados pelo LES, foi feita uma interpolação polinomial do campo de vento ($\bar{u}(x, z)$ e $\bar{w}(x, z)$) na variável z e tomamos uma média na variável x . Os dados gerados pelo LES (um arquivo do tipo asc para cada velocidade do vento) são interpolados por uma função de grau 9, através do método dos mínimos quadrados, de forma que para cada nível vertical do domínio eu tenho uma função interpoladora diferente.

Na Figura (5.11) apresentamos as concentrações adimensionais integradas lateralmente $C^* = c\bar{u}h/Q$ em termos das variáveis adimensionais $X^* = xw_*/\bar{u}h$ e $Z^* = z/h$ obtidas utilizando no modelo GILTT os dados gerados pelo LES descritos acima.

Podemos dizer que os resultados obtidos usando-se os perfis de vento gerados pelo LES são satisfatórios, em relação ao comportamento da curva para o tamanho da malha e a interpolação polinomial considerada, concordando com resultados encontrados por Lamb [Lamb, 1978] e Willis e Deardorff [Willis e Deardorff, 1976], [Willis e Deardorff, 1978]. Estes

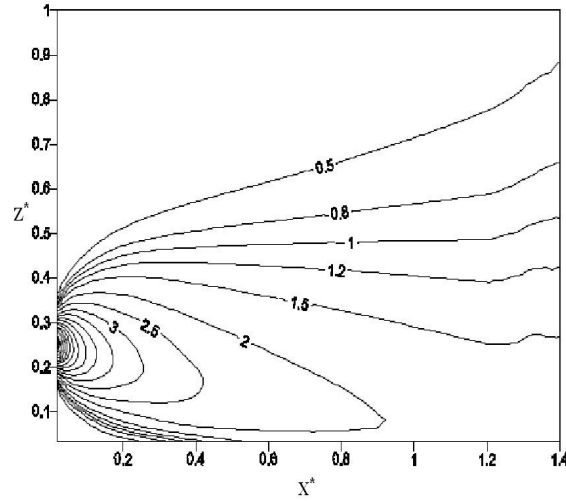


Figura 5.11 – Isolinhas de concentração adimensional previstas pelo modelo ($C^* = \bar{c}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) com velocidades do vento geradas pelo LES

resultados podem ser melhorados usando-se uma resolução maior que 64 pontos de grade nas três coordenadas (por exemplo, 96, 128, ...). Cabe lembrar que a interpolação aqui usada foi polinomial, e por isso esperam-se melhores resultados usando outras funções interpoladoras (mínimos quadrados, *splines*, entre outras) que melhor representem os valores numéricos gerados pelo LES.

5.3 Resultados para os modelos com fechamento não-Fickiano da turbulência

Agora apresentaremos os resultados obtidos com as equações (3.49), (3.52) com o fechamento não-Fickiano da turbulência. Foram utilizados o coeficiente de difusão da equação (4.1), o perfil de vento potência e $N = 100$ autovalores na solução em série (equação (3.17)) para a obtenção dos resultados numéricos.

As expressões utilizadas para avaliar o termo $\beta = S_k \sigma_w T_{l_w}$ são obtidas em [Degrazia et al., 1997] e [Degrazia et al., 2001]. Assim, a variação da velocidade turbulenta Euleriana é representada pela expressão

$$\sigma_w^2 = 1,06c_w \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)^{2/3}} \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2, \quad (5.1)$$

Tabela 5.12 – Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Copenhagen.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
$S_k = -1,0$	0,08	0,91	1,00	0,14	0,26
$S_k = -0,5$	0,06	0,91	1,00	0,08	0,21
$S_k = 0,0$	0,05	0,91	1,00	0,02	0,15
$S_k = 0,5$	0,05	0,91	1,00	-0,05	0,07
$S_k = 1,0$	0,08	0,88	1,00	-0,13	-0,03

na qual h é a altura da CLC, $\psi = 1,5 - 1,2 \left(\frac{z}{h}\right)^{1/3}$ é a taxa de dissipação e $c_w = 0,36$. Além disso, a escala de tempo Lagrangiana é representada pela expressão

$$T_{L_w} = \frac{0,55}{4} \frac{1}{\sigma_w} \frac{z}{(f_m^*)_w}, \quad (5.2)$$

em que $(f_m^*)_w = \frac{z}{(\lambda_m)_w}$ é a frequência normalizada do pico espectral vertical. A expressão utilizada para o valor do pico espectral do comprimento de onda vertical $(\lambda_m)_w$ foi

$$(\lambda_m)_w = 1,8h \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right) \right]. \quad (5.3)$$

Para analisar a influência do termo de contragradiente na simulação do transporte turbulento utilizou-se diferentes valores para o termo da assimetria (S_k). Primeiramente utilizamos o valor de $S_k = 1,0$ como sugerido por [van Dop e Verver, 2001]. Nas Figuras (5.12) e (5.13) apresentam-se os gráficos de espalhamento das concentrações observadas experimentalmente em função das preditas pelo modelo utilizando os experimentos de Copenhagen e Prairie-Grass. Consideram-se os casos sem e com o termo de contragradiente, ou seja, $S_k = 0,0$ e $S_k = 1,0$ respectivamente. Conforme se pode observar, temos uma boa concordância dos resultados obtidos com a GILTT para o valor de S_k considerado em ambos os casos. Foram utilizados o coeficiente de difusão da equação (4.1) e o perfil de vento potência.

Os resultados dos índices estatísticos usados para avaliar a performance do modelo são mostrados nas Tabelas (5.12) e (5.13). De modo a testar a solução encontrada utilizaram-se valores de assimetria negativa e positiva, coeficiente de difusão (4.1) e o perfil de vento potência. Podemos observar que uma boa concordância entre os dados experimentais e o modelo é obtida para os valores de S_k considerados no caso do experimento de Copenhagen.

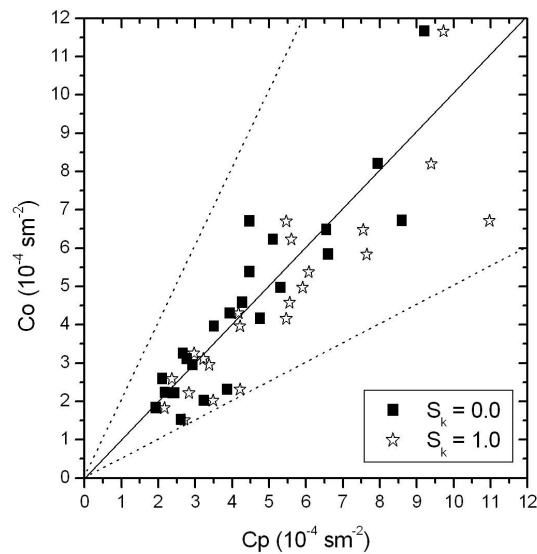


Figura 5.12 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observados experimentalmente de concentração (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo (Cp) utilizando a equação (3.52).

Tabela 5.13 – Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Prairie-Grass.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
$S_k = -1,0$	0,30	0,88	0,71	0,09	0,26
$S_k = -0,5$	0,25	0,88	0,76	-0,07	0,08
$S_k = 0,0$	0,74	0,83	0,66	0,37	0,52
$S_k = 0,5$	0,52	0,85	0,74	0,26	0,39
$S_k = 1,0$	0,64	0,83	0,68	0,31	0,46

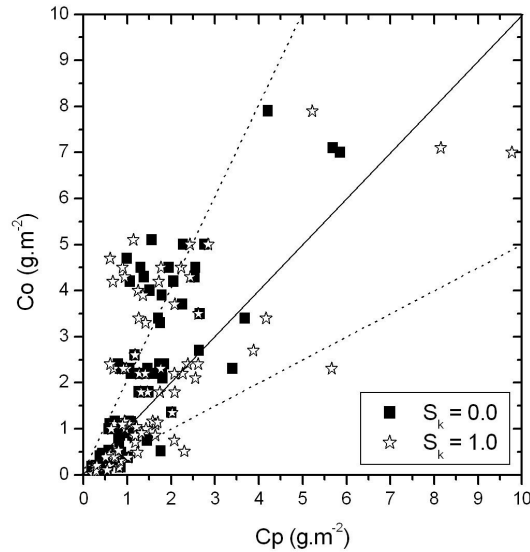


Figura 5.13 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Prairie-Grass dos dados observados experimentalmente de concentração (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo (Cp) utilizando-se a equação (3.52).

Para o caso de Prairie-Grass vemos uma concordância razoável entre os dados experimentais e os obtidos pelo modelo, observando-se uma melhora nos valores do NMSE e FA2 para os valores de S_k considerados.

A Figura (5.14) mostra o efeito do transporte não-Fickiano nas concentrações ao nível do solo para quatro diferentes alturas de fonte e diferentes valores de S_k ($S_k = -0,5; 0; 0,5$). Verificamos que o valor da assimetria altera o valor do pico de concentração, principalmente para fontes baixas. Assim, nas Figuras (5.14a) e (5.14b), observamos que quanto maior o valor da assimetria maior será a concentração de poluentes. Para fontes elevadas também observamos a influência da assimetria e, como podemos ver nas Figuras (5.14c) e (5.14d), uma alteração desta em relação aos dois casos anteriores ocorre. Na figura (5.14c) vemos que até $X^* \sim 1,7$ quanto menor a assimetria maior é a concentração e depois deste valor quanto maior a assimetria maior é a concentração. Já na Figura (5.14d) ($H_s/h = 0,9$) é verificado que a concentração é praticamente nula até uma certa distância ($X^* \sim 0,6$ para

valores negativos de S_k e $X^* \sim 1,0$ para valores de positivos de S_k) e depois começa a crescer alcançando o mesmo valor que $S_k = 0,0$ em $X^* \sim 11$.

A Figura (5.15) mostra um exemplo da concentração em função da distância da fonte com e sem o termo de contragradiente para o conjunto de dados do experimento 8 de Copenhagen. Os dados experimentais também são mostrados na figura. É possível ver que a influência do termo de contragradiente é confinada perto da fonte apenas e que os resultados estão mais próximos aos dados experimentais para valores negativos de S_k na maioria dos casos.

Além disso a Figura (5.16) mostra um exemplo da concentração em função da distância da fonte com e sem o termo de contragradiente para o experimento de número 7 de Prairie-Grass. Os dados experimentais também são mostrados na figura. Novamente é possível ver que a influência do termo de contragradiente é confinada perto da fonte apenas e que os resultados estão mais próximos aos dados experimentais para valores positivos de S_k .

Analisando os gráficos da concentração em função da distância da fonte, Figuras (5.15) e (5.16), vemos um melhoramento dos resultados numéricos, comparando com o modelo K, para o modelo com contragradiente para o caso de fonte baixa e para pontos próximos a fonte considerando $S_k = 1,0$. Por outro lado, para problemas de fonte alta e novamente para pontos próximos à fonte, observamos que os resultados com contragradiente são mais próximos aos dados experimentais agora para $S_k = -1,0$. Este resultado inesperado (para S_k negativo), embora ainda não bem entendido, possui uma explicação dada por [Cuijpers e Holtslag, 1998]. Eles mostraram que na CLC seca, o termo não-local das equações (3.9) e (3.10) é negativo devido aos sinais similares da assimetria e do fluxo gradiente. No caso de uma nuvem de fumaça, o termo não-local é positivo por causa de sinais opostos da assimetria e do fluxo gradiente [Cuijpers e Holtslag, 1998]. Na nossa opinião o caso para valores negativos do parâmetro S_k necessita de mais investigação para uma melhor compreensão.

Temos que observar que os resultados tanto para o problema com fonte elevada e baixa, para pontos longe da fonte, mostram a equivalência do contragradiente e do modelo K.

Somos confiantes em afirmar que atingimos mais um de nossos objetivos, uma vez que generalizamos pelo método GILTT, também analiticamente, a solução da dispersão da

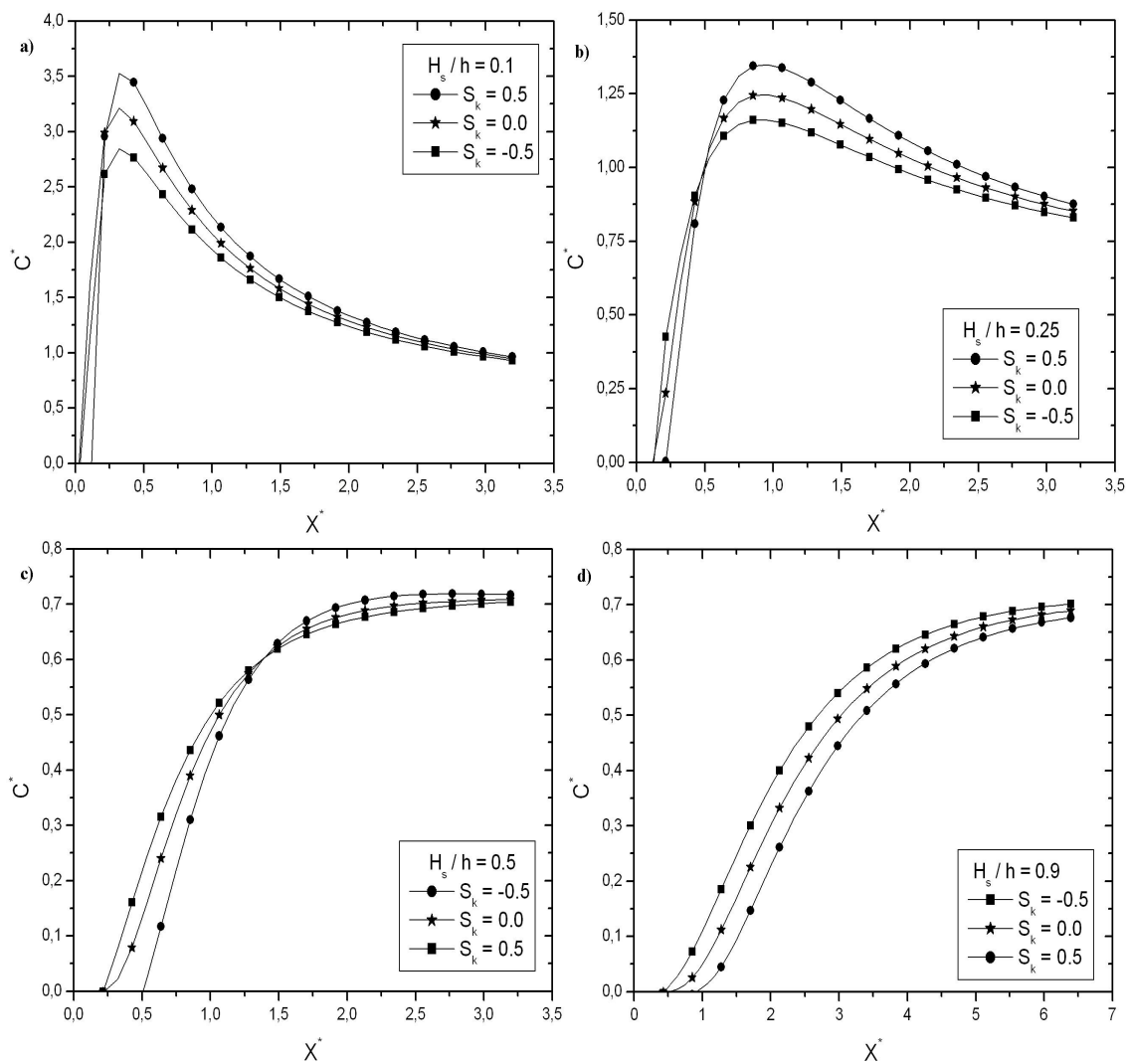


Figura 5.14 – Gráfico da concentração superficial adimensional ($C^* = \bar{c}u\bar{h}/Q$) em função da distância adimensional ($X^* = xw_*/\bar{u}h$) para quatro alturas de fonte diferentes utilizando-se a equação (3.52).

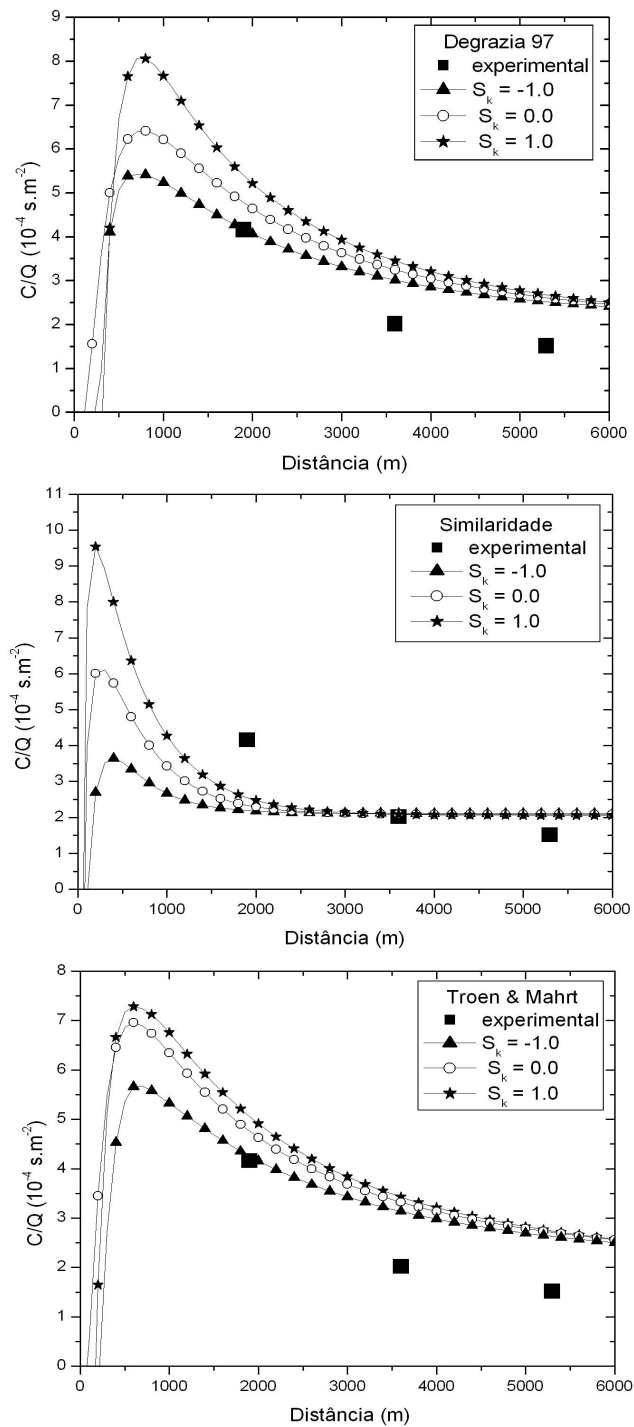


Figura 5.15 – Gráfico da concentração em função da distância da fonte com $S_k = -1,0; 0,0$ e $1,0$ para o experimento 8 de Copenhague.

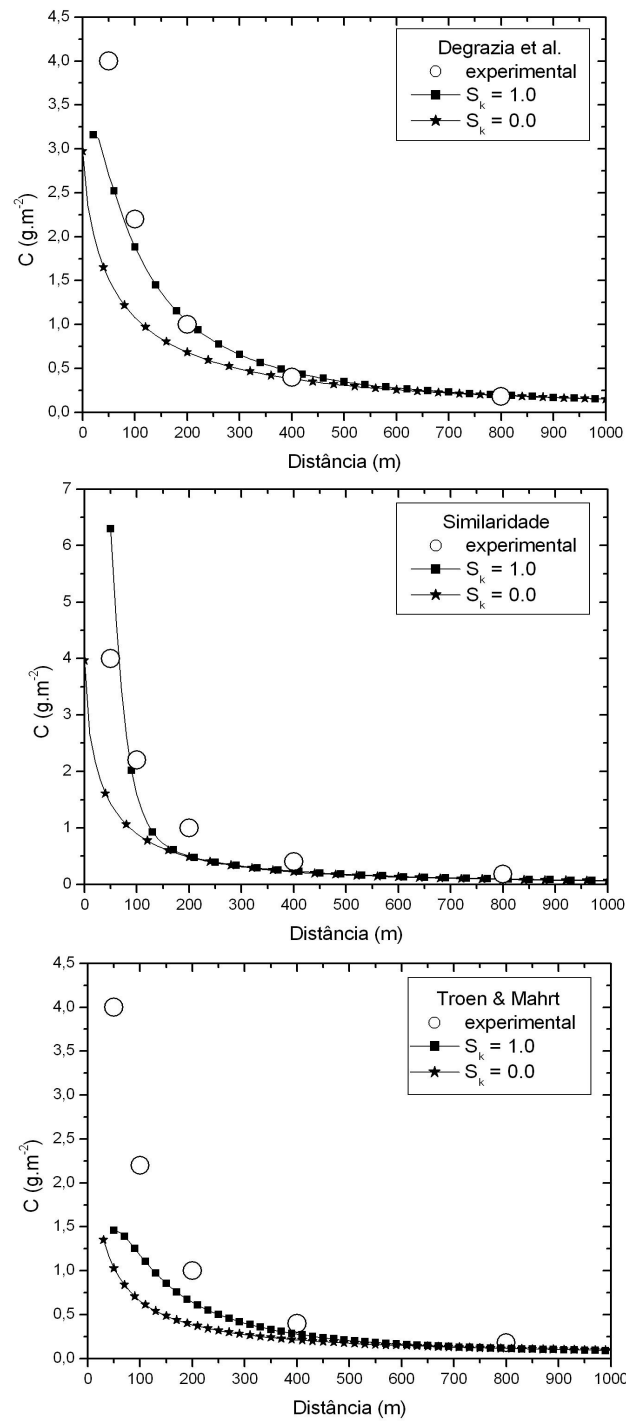


Figura 5.16 – Gráfico da concentração em função da distância da fonte com $S_k = 0,0$ e $1,0$ para o experimento 7 de Prairie-Grass.

concentração de poluentes na atmosfera do modelo Fickiano para o não-Fickiano de uma maneira direta e simples. A razão para esta afirmativa vem do fato de que, para o modelo não-Fickiano, aparece na equação de advecção-difusão um termo adicional com derivada cruzada que é facilmente resolvido pela GILTT. Reforçamos este argumento também pelos bons resultados estatísticos previamente discutidos.

5.4 Resultados considerando-se condições de vento fraco nos modelos com fechamento Fickiano e não-Fickiano

Aqui, utilizando-se o método GILTT, investigamos o problema de modelagem da dispersão de poluentes em condições de ventos fracos em todas as condições de estabilidade atmosférica. A solução em série analítica da equação de advecção-difusão (equações (3.11), (3.48), (3.51), (3.53)) foi encontrada considerando-se os fechamentos Fickiano e não-Fickiano da turbulência nos casos estacionário e transiente.

Adicionalmente, usamos uma parametrização que é dependente da distância da fonte e que corretamente representa a difusão em ventos fracos [Arya, 1995]. Os coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte utilizados para avaliar a performance do modelo foram discutidas anteriormente na seção 4.2 e representados pelas equações (4.6) - (4.10). Para o perfil de vento escolhemos o do tipo potência.

Os resultados obtidos pela GILTT são validados com os resultados experimentais disponíveis na literatura para condições de ventos fracos [Sagendorf e Dickson, 1974], [Sharan et al., 1996a], [Sharan et al., 1996b], [Sharan e Yadav, 1998] e [Sharan et al., 2002]. Dois conjuntos de dados foram utilizados. Em condições estáveis utilizamos o experimento de INEL (seção 4.1.6) e em condições instáveis o experimento de IIT Delhi (seção 4.1.5). Para a obtenção dos resultados numéricos utilizamos 60 autovalores na solução em série (equação (3.17)).

Para podermos comparar os resultados aqui encontrados com os da literatura precisamos conhecer a concentração máxima no solo (como discutido na seção 4.3). O parâmetro de dispersão lateral σ_y é dado pelas equações (4.12) e (4.14) discutidas na seção 4.3.

Primeiramente vamos analisar o caso em que as condições são estáveis, estacionárias e com fechamento Fickiano da turbulência, representados pela equação (3.53). Na Figura (5.17a) temos o diagrama de espalhamento dos dados observados e preditos das concentrações

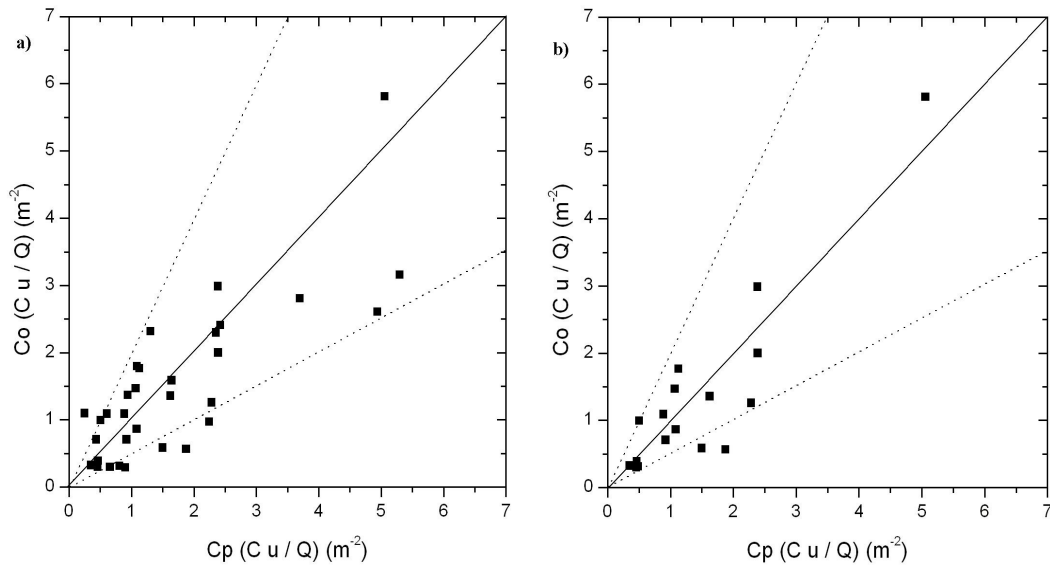


Figura 5.17 – Diagrama de espalhamento das concentrações observada ao nível do solo (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) usando a solução (3.53) para:

a) experimento de INEL; b) experimento de INEL para $u < 1\text{ m/s}$.

máximas (concentrações máximas na altura de $0,78\text{ m}$) para o experimento de INEL [Sagendorf e Dickson, 1974], enquanto que na Figura (5.17b) temos o diagrama de espalhamento dos dados observados e previstos das concentrações máximas somente para $u < 1\text{ m/s}$.

As Tabelas (5.14) e (5.15) apresentam a performance do modelo K para o caso estável. Para o perfil de vento escolhemos o do tipo potência.

Tabela 5.14 – Avaliação estatística do modelo (3.53) utilizando o experimento de INEL.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT com K_x	0,28	0,81	0,79	-0,12	-0,16

Analisando-se os índices estatísticos [Hanna, 1989] da Tabela (5.14), é possível notar que as concentrações máximas calculadas pelo modelo GILTT reproduzem de forma satisfatória os resultados experimentais. O teste principal da performance do modelo é mostrado na Tabela (5.15), a qual apresenta os resultados das simulações considerando-se os experimentos em que a velocidade do vento é menor que 1 m/s . Podemos observar que o modelo

Tabela 5.15 – Avaliação estatística do modelo (3.53) utilizando o experimento de INEL considerando apenas $u < 1m/s$.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT com K_x	0,18	0,90	0,89	-0,07	0,15

Tabela 5.16 – Avaliação estatística do modelo (3.53) utilizando o experimento de IIT Delhi.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT com K_x	0,32	0,71	0,81	0,08	-0,11

K apresenta melhores resultados quando consideramos os experimentos nos quais a velocidade do vento é menor que 1 ms^{-1} . Portanto, é possível ver que, em cenários de ventos fracos, o modelo que considera a difusão longitudinal apresenta melhores resultados, entretanto devemos recordar que quanto menos dados são considerados, maior é a incerteza dos índices estatísticos.

A performance do modelo para as condições instáveis foi avaliada usando os dados do experimento de IIT Delhi. Na Figura (5.18) temos o diagrama de espalhamento dos dados observados e preditos das concentrações máximas obtidas usando o método GILTT. Podemos observar que as concentrações máximas calculadas ao nível do solo reproduzem de forma razoável os resultados experimentais. Na Tabela (5.16) temos a performance do modelo.

Com o objetivo de testar a nova solução analítica transiente (3.48) utilizamos os experimentos IIT Delhi e INEL. Cabe salientar que não encontramos na literatura dados transientes de experimentos realizados em condições de ventos fracos e portanto, como um exemplo, consideramos o tempo de 1 h nas simulações. Na Tabela (5.17) são apresentados os resultados estatísticos encontrados para ambos os casos considerados. Para a inversão de Laplace utilizamos a quadratura de Gauss com $M = 2$ e o método FT com precisão $M^* = 5$. As parametrizações da turbulência escolhidas foram as mesmas utilizadas para o caso estacionário.

Podemos observar que os resultados obtidos para ambos os experimentos são muito similares aos encontrados nas condições estacionárias. No caso do experimento de INEL

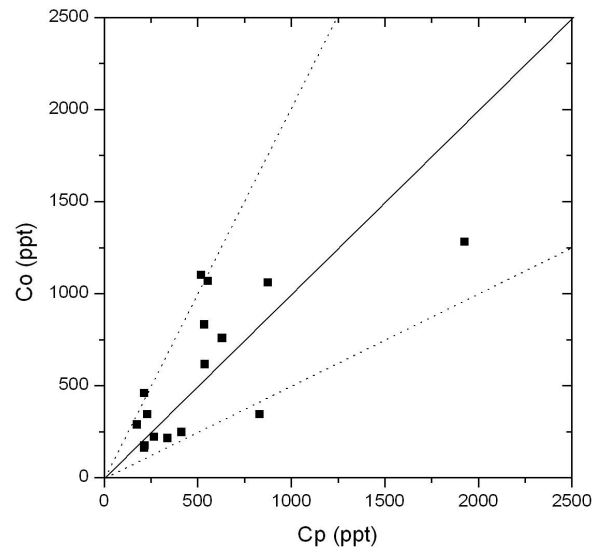


Figura 5.18 – Diagrama de espalhamento das concentrações observada ao nível do solo (C_o) e preditas pelo modelo (C_p) usando a solução (3.53) para o experimento IIT Delhi.

tivemos um NMSE maior, no caso transiente em relação ao caso estacionário, utilizando-se o método da quadratura de Gauss na inversão numérica de Laplace, o que não ocorre utilizando-se o algoritmo FT. Para o caso de IIT Delhi podemos salientar a significativa melhora no FA2 utilizando-se o algoritmo FT.

A solução do problema (3.51) com fechamento não-Fickiano da turbulência também foi testada para as condições de ventos fracos. O experimento IIT Delhi foi utilizado. As parametrizações da turbulência escolhidas foram as mesmas utilizadas para o caso estacionário da presente seção. Além do valor de $S_k = 1,0$ como sugerido por [van Dop e Verver, 2001], também consideramos o valor $S_k = 0,6$ conforme sugerido por [Wyngaard e Weil, 1991]. Na Figura (5.19), podemos ver o gráfico de espalhamento dos dados observados no experimento IIT Delhi versus os dados preditos pela GILTT. Os resultados estatísticos [Hanna, 1989] são apresentados na Tabela (5.18). Podemos observar que as concentrações máximas calculadas reproduzem de forma satisfatória os resultados experimentais para ambos os valores de S_k sugeridos na literatura. Observa-se também que os valores encontrados

Tabela 5.17 – Avaliação estatística do modelo (3.48) utilizando os experimentos de INEL e IIT Delhi.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT com $K_x + t$ - INEL QG	0,30	0,82	0,82	-0,20	-0,23
GILTT com $K_x + t$ - INEL FT	0,27	0,81	0,76	-0,03	-0,11
GILTT com $K_x + t$ - IIT Delhi QG	0,32	0,70	0,81	0,06	-0,13
GILTT com $K_x + t$ - IIT Delhi FT	0,33	0,71	0,94	-0,02	-0,21

são muito similares aos encontrados com o fechamento Fickiano da turbulência mostrando a pouca influência do contragradiente, para o experimento utilizado, em condições de vento fraco.

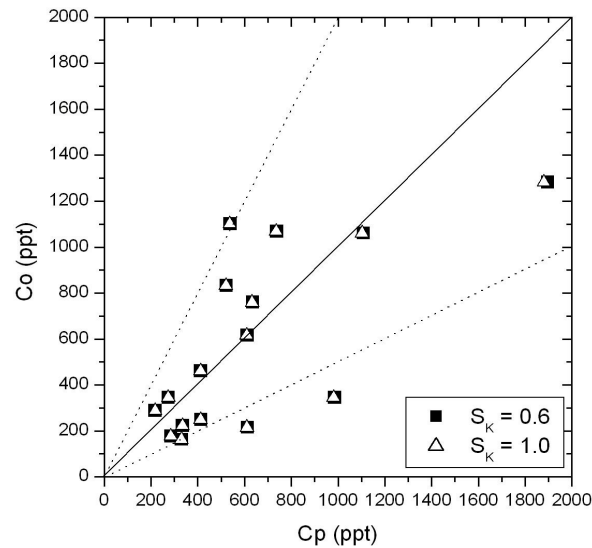


Figura 5.19 – Gráfico de espalhamento para o experimento de IIT Delhi dos dados observados experimentalmente (C_o) em comparação com os resultados preditos pelo modelo (C_p) utilizando a equação (3.51).

O objetivo desta parte do trabalho era estender a solução analítica apresentada por [Moreira et al., 2005c] para condições de ventos fracos. De fato, apresentamos uma nova solução exata mais geral da equação de advecção-difusão a qual pode ser aplicada para

Tabela 5.18 – Avaliação estatística do modelo (3.51) utilizando o experimento de IIT Delhi considerando $S_k = 0,6$ e $S_k = 1,0$.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT com K_x e $S_k = 0,6$	0,28	0,69	0,75	-0,08	-0,09
GILTT com K_x e $S_k = 1,0$	0,27	0,69	0,75	-0,07	-0,08

descrever a dispersão turbulenta de muitas quantidades escalares, tais como poluição do ar, material radioativo, calor, etc. em condições de vento fraco. Além da advecção na direção do vento, o modelo considera a difusão longitudinal e o fechamento não-Fickiano da turbulência.

Para mostrar as performances da solução encontrada em cenários reais, introduzimos algumas parametrizações da turbulência da CLP e comparamos os valores preditos pelo modelo com dados coletados durante experimentos conhecidos na literatura. Conseguimos uma concordância razoável entre as concentrações observadas e aquelas calculadas com a técnica GILTT. Esperamos melhorar os resultados aqui apresentados usando a solução analítica encontrada por este método para o problema tridimensional de advecção-difusão [Segatto et al., 2006].

6. CONCLUSÃO

Começaremos nossa análise final lembrando que o teorema de Cauchy-Kowalewsky garante a existência e unicidade de uma solução analítica para a equação de advecção-difusão [Courant e Hilbert, 1989]. Sabemos que as soluções analíticas podem ser escritas de duas formas equivalentes: solução expressa ou na forma integral ou com uma formulação em série. Neste trabalho de tese, focando nossa atenção na simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, apresentamos uma solução analítica com uma formulação em série da equação de advecção-difusão transiente bidimensional pelo método GILTT. Soluções analíticas são de fundamental importância para entender e descrever fenômenos físicos, pois elas levam em conta explicitamente todos os parâmetros de um problema, de modo que suas influências podem ser confiavelmente investigadas e facilmente obter-se o comportamento assintótico da solução.

Para compreender melhor a importância de pesquisar a solução analítica da equação de advecção-difusão, a fim de simular a dispersão de poluentes na CLP, deve-se procurar as possíveis fontes de erro tanto no modelo quanto na simulação numérica da concentração do poluente. É necessário recordar que a equação de advecção-difusão discutida é uma descrição matemática dos fenômenos físicos da dispersão de contaminantes na CLP, supondo os modelos Fickiano e não-Fickiano (primeira e segunda ordem de fechamento respectivamente) para a turbulência, velocidade do vento e coeficientes de difusão turbulenta vertical. Além destas incertezas e também da compreensão incompleta dos fenômenos da turbulência, tem-se que fazer um exame do erro inerente ao método matemático adotado para resolver a equação da advecção-difusão. Aparece aqui a relevância da solução analítica. Certamente, tendo em vista o tipo de solução apresentada, pode-se dizer que o erro no cálculo da concentração do poluente por este tipo de solução, à exceção do erro de truncamento e da inversão numérica da transformada de Laplace, é mitigado pelo caráter analítico da solução. Conseqüentemente, o erro neste trabalho fica restrito às incertezas impostas ao modelo.

Face ao exposto se está em posição de comentar algumas vantagens adicionais da

solução analítica além da elegância matemática da solução. Primeiramente, é possível controlar, pela metodologia proposta, o erro, controlando o número de termos do somatório na equação (3.17) (fórmula da inversa da GITT). Esta afirmativa é justificada pelos resultados descritos na tabela (5.1). Aumentando-se o número de termos do somatório na solução da série, observa-se um aumento da coincidência do número de dígitos significativos da solução. Além disso, analisando-se os resultados da Tabela (5.3), verifica-se, como esperado, que uma boa concordância, sob o ponto de vista estatístico, é conseguida entre os resultados semi-analíticos (método ADMM) e analíticos (da aproximação via GILTT) quando comparados com os dados experimentais. Esta equivalência também é confirmada nos resultados encontrados nos Apêndices II a XI. Tendo em mente a equivalência dos métodos GILTT e ADMM, acreditamos que a seleção do método para simular a dispersão de poluentes irá depender do problema a ser resolvido e da habilidade e experiência do usuário.

Assim, acreditamos que atingimos nosso objetivo porque apresentamos uma nova solução analítica com uma formulação em série, da equação de advecção-difusão transiente bidimensional pelo método GILTT, cuja solução também é garantida pelo teorema de Cauchy-Kowalewsky [Courant e Hilbert, 1989]. Além da advecção na direção do vento, o modelo considera a difusão longitudinal e os fechamentos Fickiano e não-Fickiano da turbulência. Cabe salientar que esta solução é válida para quaisquer coeficientes de difusão e perfis de vento dependentes da variável z .

É importante observar que a solução bidimensional transiente, com fechamento não-Fickiano da turbulência e que leva em conta a difusão longitudinal do poluente, encontrada pelo método GILTT no Capítulo 3, é uma solução geral uma vez que se reduz a casos particulares, casos estes resolvidos pela mesma técnica durante este trabalho de tese conforme visto na seção 3.2.5. Além disso, esta solução mais geral da equação de advecção-difusão pode ser aplicada para descrever a dispersão turbulenta de muitas quantidades escalares, tais como poluição do ar (como nesta tese), material radioativo, calor, etc.

Para mostrar as performances da solução encontrada em cenários reais, introduzimos algumas parametrizações da turbulência da CLP e comparamos os valores preditos pelo modelo com dados coletados durante experimentos conhecidos na literatura. Conseguimos uma boa concordância entre as concentrações observadas e aquelas calculadas com a técnica GILTT para a maioria dos casos considerados.

Além disso, para mostrar a capacidade do presente modelo de simular a dispersão de poluentes na atmosfera para problemas mais realísticos, aplicamos o método GILTT para um problema com as velocidades do vento geradas pelo LES (seção 5.2). Os resultados obtidos usando-se os perfis de vento gerados pelo LES foram satisfatórios, em relação ao comportamento da curva para o tamanho da malha e a interpolação polinomial considerada, concordando com resultados encontrados na literatura. Espera-se melhorar estes resultados usando uma resolução maior de grade e outras funções interpoladoras que melhor representem os valores numéricos gerados pelo LES.

Finalmente, focaliza-se a atenção futura para as melhorias do modelo. A equação tridimensional de advecção-difusão também será resolvida por esta metodologia. Isto pode ser feito aplicando-se o método GILTT na variável y , e então seguir o mesmo procedimento adotado neste trabalho de tese.

Uma questão que precisa ser trabalhada consiste na generalização desta solução para problemas que requerem parâmetros físicos com variação temporal e espacial. O termo de fonte, o terreno complexo e as reações químicas também devem ser considerados no modelo. Focaremos nossa atenção futura nestas direções.

Concluindo, por estes procedimentos, esperando de algum modo ter aliviado as incertezas discutidas anteriormente, pretendeu-se mostrar a aptidão do método analítico proposto para resolver problemas físicos realísticos da dispersão de poluentes na CLP.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abate, J. and Valkó, P. P., 2004. "Multi-precision Laplace transform inversion", **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol. 60, pp. 979–993.

Alves, L. S., Cotta, R. M., and Pontes, J., 2002. "Stability analysis of natural convection in porous cavities through integral transforms", **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 45, pp. 1185–1195.

Anfossi, D., 2005, "**Dispersão lagrangeana na camada limite planetária**". Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária, Organizadores: D.M. Moreira, J.C. Carvalho e M.T. Vilhena, Editora da UFRGS, Porto Alegre.

Arya, P., 1995. "Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds", **Journal of Applied Meteorology**, vol. 34, pp. 1112–1122.

Arya, P., 2003. "A review of the theoretical bases of short-range atmospheric dispersion and air quality models", **Proc. Indian Natn Sci. Acad.**, vol. 69A, pp. 709–724.

Arya, S. P., 1999. "**Air pollution meteorology and dispersion**". Oxford University Press, New York.

Barad, M. L., 1958. "Project Prairie-Grass: A field program in diffusion", **Geophys. Res. , Air Force Cambridge research Centre , USA**, vol. I and II(59).

Berlyand, M., 1975. "**Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere**". Translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA.

Blackadar, A. K., 1997. **"Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences"**. Springer-Verlag.

Bowne, N. and Londergan, R., 1981, Overview, result and conclusions for the EPRI plume model validation and development project: plane site. EPRI Report EA-3074.

Brown, M. J., Arya, S. P., and Snyder, W., 1997. "Plume descriptors from a non-Gaussian concentration model", **Atmospheric Environment**, vol. 31, pp. 183–189.

Brusasca, G., Tinarelli, G., and Anfossi, D., 1992. "Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 707–723.

Buligon, L., 2004. **"Solução da equação de advecção-difusão unidimensional transiente para o estudo da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária"**, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS.

Buligon, L., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2006. "Uma solução semi-analítica da dispersão de poluentes com a equação do telégrafo e fluxo contra-gradiente", **Revista Brasileira de Meteorologia**, vol. 21, pp. 77–85.

Buske, D., 2004. **"Solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILTT aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos"**, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Buske, D., Costa, C., Tirabassi, T., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2007a. "An unsteady analytical solution of advection-diffusion equation for low wind conditions", **Proceedings do XXVIII Congresso Ibero Latino-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia, Porto, Portugal**.

Buske, D., Costa, C. P., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2005a. "Simulação da dispersão de poluentes na CLE pelos métodos GILTT e ADMM", **Proceedings do IX Congresso Argentino de Meteorologia**.

Buske, D., Costa, C. P., Vilhena, M. T., and Moreira, D. M., 2005b. "Uma solução analítica para a dispersão de poluentes em condições estáveis pelo método GILTT: experimento de Hanford", **Proceedings do XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional**.

Buske, D., Moreira, D. M., Tirabassi, T., and Vilhena, M. T., 2007b. "An unsteady two-dimensional analytical solution for modeling air pollution dispersion and turbulent dry deposition", **Proceedings do 19th Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**.

Buske, D., Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Segatto, C. F., 2005c. "Solução da equação de difusão-advectação dependente do tempo bidimensional pelo método GILTT para simulação de contaminantes na camada limite convectiva", **Revista Ciência e Natura**, pages 281–284.

Buske, D., Vilhena, M. T., and Moreira, D. M., 2005d. "Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion by the GILTT method", **Proceedings do XXVI Congresso Ibero Latino-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia**.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Bodmann, B., 2007c, "**An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach**", pages 27–36. *Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications*, Organized by: C. Constanda; S. Potapenko, Birkhauser, Boston.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Brauer, C. R., 2006a. "The GILTT solution for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant", **Proceedings of the International Youth Nuclear Congress, Stockholm, Sweden and Olkiluoto, Finland**.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2006b. "An analytical air pollution model for warm sources", **Proceedings of the 11th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences, Curitiba**.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2006c. "Analytical solution for the transient two-dimensional advection-diffusion equation considering nonlocal

closure of the turbulent diffusion”, **Proceedings of the 5th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, Dubrovnik, Croácia.**

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2006d. ”Evaluation of eddy diffusivity parameterizations by an analytical solution of the advection-diffusion equation”, **Proceedings do XIV Congresso Brasileiro de Meteorologia, Florianópolis.**

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2007d. ”An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure”, **Environmental Fluid Mechanics**, vol. 7, pp. 43–54.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2007e. ”Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 41, pp. 5496–5501.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2007f. ”Solução analítica da equação de advecção-difusão considerando fechamento não-local da turbulência e condições de vento fraco”, **Revista Ciência e Natura**, pages 27–30.

Buske, D., Wortmann, S., and Vilhena, M. T., 2003. ”Solução Analítica para a Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária pelo Método GITT”, **Revista Ciência e Natura**, pages 83–86.

Carvalho, D. L., 1996. ”**Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva**”, Dissertação de mestrado, Mestrado em Meteorologia, USP.

Cataldi, M., Margalho, M., Velloso, M., and Pimentel, L., 2000. ”Estudo do transporte de poluentes na região da camada de superfície sob diversas condições de estabilidade atmosférica”, **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, vol. 1, pp. 2890–2899.

Caughey, S. J., 1982, ”**Diffusion in the convective boundary layer**”. Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling, Edited by F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, Reidel, Boston.

Chamberlain, A. C., 1953, Aspects of travel and deposition of aerosol and vapour clouds. Report AERE-HP/R-1261, UKAEA, Harwell, Berkshire, England.

Cheroto, S., Mikhailov, M. D., Kakaç, S., and Cotta, R. M., 1999. "Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms", **International Journal of Thermal Sciences**, vol. 38, pp. 613–621.

Cirillo, M. C. and Poli, A. A., 1992. "An inter comparison of semi empirical diffusion models under low wind speed, stable conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 765–774.

Costa, C., Buske, D., Tirabassi, T., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2007. "A solution of the steady-state three-dimensional advection-diffusion equation with non-local turbulence closure", **Proceedings do 5º Simpósio de Meteorologia e Geofísica da APMG - 8º Encontro Luso-Espanhol de Meteorologia, Peniche, Portugal**.

Costa, C., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2006. "Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 40(29), pp. 5659–5669.

Costa, C. P., 2004. "**Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**", Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS.

Costa, C. P., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2004. "Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na camada limite convectiva", **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**.

Costa, C. P., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2005. "Contaminant dispersion simulation by solving the three-dimensional advection-diffusion equation combining the GILTT and ADMM methods", **Proceedings do 18th Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**.

Cotta, R. and Mikhaylov, M., 1997. "**Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**". John Wiley & Sons, Baffins Lane, Chichester, England.

Cotta, R. M., 1993. "**Integral transforms in computational heat and fluid flow**". CRC Press, Boca Raton, Florida.

Cotta, R. M. and Barros, F. P. J., 2007. "Integral transforms for three-dimensional steady turbulent dispersion in rivers and channels", **Applied Mathematical Modelling**, vol. 31, pp. 2719–2732.

Courant, R. and Hilbert, D., 1989. "**Methods of Mathematical Physics**". John Wiley & Sons.

Cuijpers, J. W. M. and Holtslag, A. A. M., 1998. "Impact of skewness and nonlocal effects on scalar and buoyancy flux in convective boundary layers", **Journal of Atmospheric Science**, vol. 55, pp. 151–162.

de Roode, S. R., Jonker, H. J. J., Duynkerke, P. G., and Stevens, B., 2004. "Countergradient fluxes of conserved variables in the clear convective and stratocumulus-topped boundary layer: the role of the entrainment flux", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 112, pp. 179–196.

Deardoff, J. M., 1966. "The countergradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory", **Journal of the Atmospheric Sciences**, vol. 23, pp. 503–506.

Deardoff, J. M., 1972. "Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers", **Journal of the Atmospheric Sciences**, vol. 29, pp. 91–115.

Deardoff, J. W. and Willis, G. E., 1975. "A parameterization of diffusion into the mixed layer", **Journal of Applied Meteorology**, vol. 14, pp. 1451–1458.

Degrazia, G., Anfossi, D., Carvalho, J., Mangia, C., Tirabassi, T., and Campos Velho, H., 2000. "Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 34, pp. 3575–3583.

Degrazia, G. and Moraes, O., 1992. "A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 58, pp. 205–214.

Degrazia, G. A., 1998. "Modelling dispersion from elevated sources in a planetary boundary layer dominated by moderate convection", **Il Nuovo Cimento**, vol. 21C, pp. 345–353.

Degrazia, G. A., Mangia, C., and Rizza, U., 1998. "A comparison between different methods to estimate the lateral dispersion parameter under convective conditions", **Journal of Applied Meteorology**, vol. 37, pp. 227–231.

Degrazia, G. A., Moraes, O., and Oliveira, A. P., 1995. "An analytical formulation for mixing length scales in a convective PBL", 21th **Int. Technical Meeting on Air Pollution and its Application, 6-10 Nov. , Baltimore.**

Degrazia, G. A., Moreira, D. M., Campos, C. R. J., Carvalho, J. C., and Vilhena, M. T., 2002. "Comparison between an integral and algebraic formulation for the eddy diffusivity using the Copenhagen experimental dataset", **Il Nuovo Cimento**, vol. 25C, pp. 207–218.

Degrazia, G. A., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2001. "Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer", **Journal of Applied Meteorology**, pages 1233–1240.

Degrazia, G. A., Velho, H. F. C., and Carvalho, J. C., 1997. "Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties", **Contributions to Atmospheric Physics**, pages 57–64.

Degrazia, G. A., Vilhena, M. T., and Moraes, O. L. L., 1996. "An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion", **Il Nuovo Cimento**, vol. 19C, pp. 399–403.

Demuth, C. A., 1978. "Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 1255–1258.

Doran, J. C., Abbey, O. B., Buck, J. W., Glover, D. W., and Horst, T. W., 1984, Field validation of Exposure Assessment Models. Technical Report EPA/600/384/092A, Data Environmental Science Research Lab, Research Triangle Park, NC.

Doran, J. C. and Horst, T. W., 1985. "An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements", **Atmospheric Environment**, vol. 19, pp. 939–951.

Dyer, A. J., 1974. "A Review of flux-profile relationship", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 7, pp. 363–372.

Ermak, D. L., 1977. "An analytical model for air pollution transport and deposition from a point source", **Atmospheric Environment**, vol. 11, pp. 231–237.

Ertel, H., 1942. "Der vertikale turbulenz-wärmestrom in der atmosphäre", **Meteorologische Zeitschrift**, vol. 59, pp. 250–253.

Ferreira Neto, P. V., 2003. "**Desenvolvimento de um modelo de dispersão de poluentes para o estudo de impacto ambiental em fontes isoladas**", Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Ambiental, ULBRA.

Fiedler, B. H. and Moeng, C. H., 1985. "A practical integral closure model for mean vertical transport of a scalar in a convective boundary layer", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 42(4), pp. 359–363.

Fisher, B. A., 1975. "The long range transport of sulphur dioxide", **Atmospheric Environment**, vol. 9, pp. 1063–1070.

Fox, D. G., 1981. "Judging air quality model performance: a summary of the AMS workshop on dispersion model performance", **American Meteorological Society**, vol. 62, pp. 599–609.

Gryning, S., Holtslag, A., Irwing, J., and Silversten, B., 1987. "Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters", **Atmospheric Environment**, vol. 21(1), pp. 79–89.

Gryning, S. E., 1981, Elevated source SF_6 - tracer dispersion experiments in the Copenhagen area. Report RISOE-R-446, Risoc National Laboratory, Roskilde, Denmark.

Gryning, S. E. and 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.

Hamba, F., 1993. "A modified K model for chemically reactive species in the planetary boundary layer", **Journal of Geophysical Research**, vol. 98(3), pp. 5173–5182.

Hanna, S. and Paine, R. J., 1989. "Híbrido plume dispersion model (HPDM) development and evaluation", **Journal of Applied Meteorology**, vol. 28, pp. 206–224.

Hanna, S. R., 1989. "Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods", **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1385–1395.

Heinen, I. R., 2005. "**Solução analítica da equação da energia estacionária e bidimensional para simulação de escoamento plenamente desenvolvido em placa plana paralela pelo método da GILTT**", Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Hojstrup, J., 1982. "Velocity spectra in the unstable boundary layer", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 39, pp. 2239–2248.

Holtstlag, A. and Boville, B. A., 1993. "Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model", **Journal of Climate**, vol. 6, pp. 1825–1842.

Holtstlag, A. and Moeng, C. H., 1991. "Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 48, pp. 1690–1698.

Horst, T. W., 1983, "**A correction to the Gaussian source depletion model**", pages 1205–1218. Precipitation Scavenging, Dry Deposition and Resuspension, Edited by Pruppacher H. R., Semonin R. G. and Slinn W. G. N., Elsevier North Holland, Amsterdam, The Netherlands.

Irwin, J. S., 1979. "A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability", **Atmospheric Environment**, vol. 13, pp. 191–194.

Lamb, R. G., 1978. "A numerical study of dispersion from an elevated point source in the convective planetary boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 1297–1304.

Lin, J. S. and Hildeman, L. M. A., 1997. "A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition", **Atmospheric Environment**, vol. 31, pp. 59–71.

Liu, C., Szecsody, J., Zachara, J., and Ball, W., 2000. "Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media", **Advances in Water Resources**, vol. 23, pp. 483–492.

Magno, R. N., Macêdo, E. N., and Quaresma, J. N., 2002. "Solutions for the internal boundary layer equations in simultaneously developing flow of power-law fluids within parallel plates channels", **Chemical Engineering Journal**, vol. 87, pp. 339–350.

Mangia, C., Moreira, D. M., Schipa, I., Degrazia, G. A., Tirabassi, T., and Rizza, U., 2002. "Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 36, pp. 67–76.

Mikhaylov, M. and Özisik, 1984. "**Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**". John Wiley & Sons, New York.

Moeng, C. H. and Sullivan, P. P., 1994. "A comparison of shear and buoyancy driven planetary boundary layer flows", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 51, pp. 999–1022.

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, Mestrado em Física, UFSM.

Moreira, D., 1999. "**Modelo Euleriano semi-analítico de dispersão turbulenta de contaminantes**", Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Moreira, D. M., Carvalho, J. C., and Tirabassi, T., 2005a. "Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers", **Atmospheric Environment**, vol. 39(20), pp. 3643–3650.

Moreira, D. M., Ferreira Neto, P. V., and Carvalho, J. C., 2005b. "Analytical solution of the Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation", **Environmental Modelling and Software**, vol. 20, pp. 1159–1165.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D., and Tirabassi, T., 2006a. "The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL", **Atmospheric Environment**, vol. 40, pp. 3186–3194.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Carvalho, C., and Degrazia, G. A., 2004. "Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion", **Environmental Modelling and Software**, vol. 20(10), pp. 1347–1351.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Buske, D., and Costa, C. P., 2008. "Comparison between analytical models to simulate pollutant dispersion in the atmosphere", **International Journal of Environment and Waste Management**, vol. 1(2), pp. in press.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Buske, D., and Cotta, R. M., 2005c. "Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method", **Atmospheric Environment**, vol. 39, pp. 6289–6294.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., and Carvalho, C., 2005d. "A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant", **Ecological Modelling**, vol. 189(3-4), pp. 413–424.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Costa, C., and Bodmann, B., 2006b. "Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach", **Water, Air and Soil Pollution**, vol. 177, pp. 411–439.

Moura, A., 1999. "Modelos Multidimensionais Analíticos de Dispersão de Contaminantes na Atmosfera: Coeficientes de Difusão Dependentes da Distância da Fonte", Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Moura, A., Vilhena, M., and Degrazia, G., 1995. "Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável", **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**.

Nieuwstadt, F. T. M., 1980. "An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 14, pp. 1361–1364.

Nieuwstadt, F. T. M., 1984. "The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 41, pp. 2202–2216.

Nieuwstadt, F. T. M. and de Valk, J. P. J. M. M., 1987. "A large eddy simulation of buoyant and non-buoyant plume dispersion in the atmospheric boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 21, pp. 2573–2587.

Nieuwstadt, F. T. M. and Haan, B. J., 1981. "An analytical solution of the one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation", **Atmospheric Environment**, vol. 15, pp. 845–851.

Nieuwstadt, F. T. M. and Van Ulden, A. P., 1978. "A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 2119–2124.

Olesen, H. R., 1995. "Datasets and protocol for model validation", **International Journal of Environment and Pollution**, vol. 5, pp. 693–701.

Olesen, H. R., Larsen, S. E., and Hojstrup, J., 1984. "Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 29, pp. 285–312.

Özisik, M., 1974. "**Heat Conduction**". John Wiley & Sons, New York, 2 edition.

Panofsky, H. A. and Dutton, J. A., 1984. "**Atmospheric Turbulence**". John Wiley & Sons, New York.

Pasquill, F. and Smith, F. B., 1983. "**Atmospheric Diffusion**". Halsted Press, New York, 3 edition.

Pereira, L. L., 2007. "**Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, resolvendo um problema advectivo - difusivo dependente do tempo com fonte**

arbitrária”, Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Pereira, L. M., Guerrero, J. S., Brazão, N., and Cotta, R. M., 2002. ”Compressible flow and heat transfer in ultracentrifuges hybrid analysis via integral transforms”, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 45, pp. 99–112.

Pires, C., 1996. ”Um estudo analítico de dispersão de contaminantes abandonados por fontes aéreas em uma camada limite convectiva”, Dissertação de mestrado, Curso de Pós Graduação em Sensoriamento Remoto.

Pleim, J. E. and Chang, J. S., 1992. ”A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 965–981.

Priestly, C. H. B. and Swinbank, W. C., 1947. ”Vertical transport of heat by turbulence in the atmosphere”, **Proceedings of the Royal Society of London**, pages 543–561.

Rao, K. S., 1981, Analytical solutions of a gradient-transfer model for plume deposition and sedimentation. NOAA Tech. Mem. ERL ARL-109, Air Resources Laboratories, Silver Spring, MD.

Ribeiro, M., Cataldi, M., Guerrero, J., and Pimentel, L., 2000. ”Estudo da dispersão de poluentes na atmosfera via transformação integral”, **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, vol. 1, pp. 2969–2975.

Ribeiro, M., Ferreira, M., Guerrero, J., and Pimentel, L., 2002. ”Efeito do mecanismo de reação química sobre o transporte de contaminantes na região da camada limite atmosférica”, **Proceedings do XII Congresso Brasileiro de Meteorologia**.

Roberts, O. F. T., 1923. ”The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere”, **Proceedings of the Royal Society of London**, vol. 104, pp. 640–648.

Robson, R. E. and Mayocchi, C. L., 1994. ”A simple model of countergradient flow”, **Physics of Fluids**, vol. 6, pp. 1952–1954.

Rounds, W., 1955. "Solutions of the two-dimensional diffusion equation", **American Geophysical Union**, vol. 36, pp. 395–405.

Sagendorf, J. F. and Dickson, C. R., 1974, Diffusion under low wind-speed, inversion conditions. Technical Memorandum ERL ARL-52, U. S. National Oceanics and Atmospheric Administration.

Scriven, R. A. and Fisher, B. A., 1975. "The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II - The effect of turbulent diffusion", **Atmospheric Environment**, vol. 9, pp. 59–69.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T., 1999. "The state of art of the LTS_N method", **Proceedings of Mathematics and Computational Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications**, pages 1618–1631.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T., Buske, D., and Moreira, D. M., 2006. "An analytical solution for the time-dependent 3D advection-diffusion equation in cartesian geometry by integral transform technique", **Proceedings of the International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, Hersonnisos (Creta, Grécia), Weinheim : Wiley - VCH**, pages 299–302.

Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N., 1997. "**Atmospheric chemistry and physics of air pollution**". John Wiley & Sons, New York.

Sharan, M. and Modani, M., 2007. "Variable K-model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions in the surface based inversion", **Atmospheric Environment**, vol. 41, pp. 6951–6963.

Sharan, M., Modani, M., and Yadav, A. K., 2003. "Atmospheric dispersion: an overview of mathematical modelling framework", **Proc. Indian Natn Science Acad.**, vol. 69A, pp. 725–744.

Sharan, M., Singh, M. P., and Yadav, A. K., 1996a. "A mathematical model for the dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance", **Atmospheric Environment**, vol. 30, pp. 1137–1145.

Sharan, M., Singh, M. P., Yadav, A. K., Agarwal, P., and Nigam, S., 1996b. "A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 30, pp. 1209–1220.

Sharan, M. and Yadav, A. K., 1998. "Simulation of experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model", **Atmospheric Environment**, vol. 32, pp. 3481–3492.

Sharan, M., Yadav, A. K., and Modani, M., 2002. "Simulation of short-range diffusion experiment in low wind convective conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 36, pp. 1901–1906.

Siversten, B. and Böhler, T., 1985, Verification of dispersion estimates using tracer data. NILU Report TR 19/85, The Norwegian Institute for Air Research, Lilleström, Norway.

Smith, F. B., 1957a, Convection-diffusion processes below a stable layer. Technical Report 1048, Meteorological Research Committee, London.

Smith, F. B., 1957b. "The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere", **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 2, pp. 49–76.

Sorbjan, Z., 1989. "**Structure of the atmospheric boundary layer**". Prentice Hall, New Jersey.

Storch, R. and Pimentel, L., 2003. "Desenvolvimento de um modelo euleriano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos", **Revista Ciência e Natura**, pages 103–106.

Storch, R. and Pimentel, L., 2005. "Atmospheric dispersion simulation via generalized integral transform technique and sign-count method", **Revista Ciência e Natura**, pages 277–280.

Stroud, A. H. and Secrest, D., 1966. "**Gaussian quadrature formulas**". Englewood Cliffs, N. J., Prentice Hall Inc.

Stull, R. B., 1988. "**An Introduction to Boundary Layer Meteorology**". Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holanda.

Tiesi, A., Buske, D., Costa, C., Tirabassi, T., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2007. "Evaluation of plume descriptors obtained by an analytical solution approach of the advection-diffusion equation", **Proceedings of the 11th Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, Cambridge, Inglaterra**, vol. 2, pp. 223–227.

Tirabassi, T., 2005, "**Dispersão euleriana na camada limite planetária**". Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária, Organizadores: D.M. Moreira, J.C. Carvalho e M.T. Vilhena, Editora da UFRGS, Porto Alegre.

Tirabassi, T., Buske, D., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2008. "A two-dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground", **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, page In Press.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1992. "An analytical model for a screen evaluation of the environmental impact from a single point source", **II Nuovo Cimento**, vol. 15c, pp. 181–190.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1993. "An air pollution model for complex terrain", **Proceeding of Air Pollution conference, Monterrey, México**, pages 149–156.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1995. "A practical model for the dispersion of skewed puffs", **Journal of Applied Meteorology**, vol. 34, pp. 989–993.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1997. "Boundary layer parameterization for a non-Gaussian puff model", **Journal of Applied Meteorology**, vol. 36, pp. 1031–1037.

Tirabassi, T., Tagliazucca, M., and Paggi, P., 1989. "A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 857–862.

Tirabassi, T., Tagliazucca, M., and Zannetti, P., 1986. "A non-Gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements", **JAPCA**, vol. 36, pp. 592–596.

Ulke, A. G., 2000. "New turbulent parameterisation for a dispersion model in the atmospheric boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 34, pp. 1029–1042.

Valkó, P. P. and Abate, J., 2004. "Comparison of sequence accelerators for the Gaver method of numerical Laplace transform inversion", **Computers and Mathematics with Application**, vol. 48, pp. 629–636.

van Dop, H. and Verver, G., 2001. "Countergradient transport revisited", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 58, pp. 2240–2247.

Van Ulden, A. P., 1978. "Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 2125–2129.

Velloso, M., Barbarioli, A., Guerrero, J., and Pimentel, L., 2003. "Desenvolvimento de um modelo computacional para estudo do efeito do mecanismo de deposição sobre a dispersão de poluentes atmosféricos", **Revista Ciência e Natura**, pages 25–28.

Velloso, M. F., Storch, R. B., Perez Guerrero, J. S., and Pimentel, L. C., 2004. "Estudo do transporte de poluentes na camada limite atmosférica a partir de dois modelos algébricos para o coeficiente de difusão turbulenta e transformação integral", **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**.

Vilhena, M., Rizza, U., Degrazia, G., Mangia, C., Moreira, D., and Tirabassi, T., 1998. "An analytical air pollution model: Development and evaluation", **Contributions to Atmospheric Physics**, vol. 71, pp. 315–320.

Willis, G. E. and Deardoff, J. W., 1976. "A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer", **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, vol. 102, pp. 427–445.

Willis, G. E. and Deardoff, J. W., 1978. "A laboratory study of dispersion from an elevated source within a modelled convective planetary boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 1305–1311.

Wilmott, C. J., 1982. "Some comments on the evaluation of model performance", **Bulletin of the American Meteorological Society**, vol. 63, pp. 1309–1313.

Wortmann, S., Moura, A., and Vilhena, M. T., 2000. "Solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável", **Proceedings of the Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences**.

Wortmann, S., Vilhena, M. T., Moreira, D., and Buske, D., 2005. "A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL", **Atmospheric Environment**, vol. 39, pp. 2171–2178.

Wyngaard, J. C. and Brost, R. A., 1984. "Top-down bottom-up diffusion of a scalar in the convective boundary layer", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 41, pp. 102–112.

Wyngaard, J. C. and Weil, J. C., 1991. "Transport asymmetry in skewed turbulence", **Physics Fluids A**, vol. 3, pp. 155–162.

Yeh, G. and Huang, C., 1975. "Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 9, pp. 381–390.

Zannetti, P., 1990. "**Air Pollution Modelling**". Computational Mechanics Publications, Southampton.

Zilitinkevich, S. S., 1972. "On the determination of the height of the Ekman boundary layer", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 3, pp. 141–145.

Zilitinkevich, S. S., Gryanik, V. M., Lykossov, V. N., and Mironov, D. V., 1999. "Third-order transport and nonlocal turbulence closures for convective boundary layers", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 56, pp. 3463–3477.

I. An Unsteady Analytical Solution of Advection-Diffusion Equation for Low Wind Conditions

Artigo apresentado e publicado nos anais do XXVIII Congresso Ibero Latino-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia (CMNE / CILAMCE 2007) que se realizou na cidade do Porto em Portugal no período de 13 a 15 de junho de 2007.

AN UNSTEADY ANALYTICAL SOLUTION OF THE ADVECTION-DIFFUSION EQUATION FOR LOW WIND CONDITIONS

Daniela Buske^{1,2*}, Camila Pinto da Costa^{1,2}, Tiziano Tirabassi², Davidson Martins Moreira³ and Marco Tullio Vilhena¹

1: Universidade Federal do Rio Grande do Sul – PROMEC - Porto Alegre – Brasil
e-mail: buske@mecanica.ufrgs.br, camila@mecanica.ufrgs.br, vilhena@mat.ufrgs.br

2: Institute ISAC of CNR , Bologna, Italy
e-mail: t.tirabassi@isac.cnr.it

3: Universidade Federal de Pelotas – UNIPAMPA- Bagé - Brasil
e-mail: davidson@mecanica.ufrgs.br

Key words: Low winds, Advection-diffusion equation, Air pollution modeling, Eulerian dispersion models, GILTT method, Turbulence parameterizations.

Summary. *The importance of dispersion modelling in low wind conditions lies in the fact that such conditions occur frequently and are crucial for air pollution episodes. The present study proposes an unsteady general (without any restriction to wind and eddy diffusivity vertical profiles) solution of advection–diffusion equation for dispersion of contaminants in low wind conditions that takes into account the along-wind diffusion applying the GILTT method. In order to show the performances of the solution in actual scenarios, we introduced some parameterizations of the Planetary Boundary Layer and compared the values predicted by the solutions with an experimental data set.*

1. INTRODUCTION

The importance of dispersion modeling in low wind conditions lies in the fact that such conditions occur frequently and are crucial for air pollution episodes. In such conditions, the pollutants are not able to travel far and thus the near-source areas are affected the most.

Several models have been developed to describe dispersion processes under low winds conditions. Sharan and Yadav [1] used a model including stream wise diffusion and variable eddy diffusivities. The eddy diffusivities were specified as linear functions of the downwind distance. The model of [2] gave almost identical results when compared with the ones of the model of [1] for the INEL dataset. Sagendorf and Dickson [3] used a Gaussian model and also divided each computation period into 2-min time intervals, summing the results to determine the total concentration. The limitations of the said models arise from a built-in assumption of a homogeneous wind field and restrictions concerning the shape of the source. More recently, [4], attempted to simulate ground-level concentrations in low wind conditions, utilizing a Lagrangian dispersion model with random time steps and a negative intercorrelation parameter for the horizontal wind components.

In the present work, we investigate the problem of modeling contaminant dispersion from ground-level sources in low wind situations for stable conditions. The present study proposes an unsteady general (without any restriction to wind and eddy diffusivity vertical profiles) solution of advection–diffusion equation for dispersion of contaminants in low wind conditions that takes into account the along-wind diffusion applying the General Integral Laplace Transform Technique (GILTT) [5].

The main feature of the GILTT method involves the following steps: reduction of the time-dependent problem to a stationary by the applications of the Laplace transform technique, construction of an auxiliary Sturm-Liouville problem associated to the stationary problem, determination of the integral transform technique in a truncated series using as basis the eigenfunction of the solved Sturm-Liouville problem, replacement of this expansion in the original problem. By taking moment, we come out with the GILTT transformed equation, which consists of first order matrix ordinary differential equation. This transformed equation is then solved analytically by the Laplace transform technique. The time-dependent concentration is finally obtained by inverting numerically the solution of the stationary problem by the Fixed Talbot (FT) algorithm.

The low wind data collected during stable conditions, from the series of field experiments conducted at the Idaho National Engineering Laboratory (INEL) [3], have been simulated using the new analytical solution of the advection-diffusion equation.

2. DIFFUSION MODEL

The cross-wind integration of the advection-diffusion equation leads to:

$$\frac{\partial^y(x, z, t)}{\partial t} + u(z) \frac{\partial^y(x, z, t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x(x, z) \frac{\partial^y(x, z, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(x, z) \frac{\partial^y(x, z, t)}{\partial z} \right), \quad (1)$$

subjected to the boundary conditions of zero flux at the ground and PBL top, and a Q rate source emission at plume height H_s :

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

$$u(z)c^y(0, z, t) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{at } x = 0 \quad (1b)$$

$$\frac{\partial c^y(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad \text{at } x = L \quad (1c)$$

and the initial condition:

$$c^y(x, z, 0) = 0 \quad \text{at } t = 0 \quad (1d)$$

where c^y represents the cross-wind integrated pollutant concentration, h is the boundary layer height, u is the horizontal component of the wind speed, L is faraway from the source and K_x and K_z are the longitudinal and vertical eddy diffusivities, respectively, and are dependent on the x and z .

Using the Laplace Transform technique, transforming t into r and c^y into C , the equation (1) becomes:

$$u(z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x(x, z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(x, z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial z} \right) - rC(x, z, r) \quad (2)$$

To solve the problem (2) by the GILTT method we recast this equation as:

$$\begin{aligned} u(z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial x} = & K_x(x, z) \frac{\partial^2 C(x, z, r)}{\partial x^2} + K_x'(x, z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial x} + \\ & + K_z(x, z) \frac{\partial^2 C(x, z, r)}{\partial z^2} + K_z'(x, z, r) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial z} - rC(x, z, r). \end{aligned} \quad (3)$$

Following the works of [6] and [7], we pose that the solution of the problem (3) has the form:

$$C(x, z, r) = \sum_{i=0}^N \bar{c}_i(x, r) \Psi_i(z), \quad (4)$$

where $\Psi_i(z)$ are the eigenfunctions ($\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$) and λ_i the eigenvalues ($\lambda_i = \frac{i\pi}{h}$ for

$i = 0, 1, 2, 3, \dots$) of the associated Sturm-Liouville problem.

Replacing the above equation in Eq. (3) and taking inner-product with the eigenfunctions, we get:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^N \bar{c}'_i(x, r) \int_0^h K'_x(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \sum_{i=0}^N \bar{c}''_i(x, r) \int_0^h K_x(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \\ & + \sum_{i=0}^N \bar{c}_i(x, r) \int_0^h K'_z(x, z) \Psi'_i(z) \Psi_j(z) dz - \sum_{i=0}^N \lambda_i^2 \bar{c}_i(x, r) \int_0^h K_z(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - \\ & - \sum_{i=0}^N \bar{c}'_i(x, r) \int_0^h u(z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - \sum_{i=0}^N r \bar{c}_i(x, r) \int_0^h \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

for $i = 0, 1, 2, \dots, N$. In the case $K_x \rightarrow 0$, on this assumption, we obtain the solutions of Moreira et al. [6].

Rewriting Eq. (5) in matrix fashion, we obtain:

$$B(x)Y''(x, r) + D(x)Y'(x, r) + E(x)Y(x, r) = 0, \quad (6)$$

where $Y(x)$ is the column vector whose components are $\bar{c}_i(x)$ and the entries of matrices B , D and E are respectively given by:

$$b_{i,j} = \int_0^h K_x(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz \quad (7)$$

$$d_{i,j} = - \int_0^h u(z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \int_0^h K'_x(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz \quad (8)$$

$$e_{i,j} = \int_0^h K'_z(x, z) \Psi'_i(z) \Psi_j(z) dz - \lambda_i^2 \int_0^h K_z(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - r \int_0^h \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz \quad (9)$$

Indeed, to solve the Eq. (6) by the Laplace Transform technique, likewise [7], firstly we perform a stepwise approximation of the entries of the matrices $B(x)$, $D(x)$ and $E(x)$ by taking average values for the eddy diffusivity and its derivative in the x variable for each sub-domain. Here it is important to mention that no approximation is made on the derivatives appearing in the advection-diffusion equation. It turns out that problem (5) simplifies to a set of ordinary differential equations in which B , D and E are matrices with constant components for every sub-domain. Henceforth the previous solution obtained by [6] can be applied in a straightforward manner. For such we recast equation (5) as:

$$Y''(x, r) + FY'(x, r) + GY(x, r) = 0, \quad (10)$$

where the matrices F and G are defined, respectively, like $F = B^{-1}D$, $G = B^{-1}E$.

Applying the order reduction to Eq. (10) we come out with the result:

$$Z'(x, r) + HZ(x, r) = 0. \quad (11)$$

subjected to the boundary conditions:

$$Z_1(0, r) = Q\Psi_j(H_s)A^{-1} \text{ and } Z_2(L, r) = 0 \quad (11a)$$

Here $Z(x, r)$ is the vector $Z(x, r) = \text{col}(Z_1(x, r), Z_2(x, r))$, $A = a_{i,j} = \int_0^h u(z)\Psi_i(z)\Psi_j(z)dz$ and

the matrix H has the block form
$$H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix}.$$

In order to make possible the application of the Laplace transform technique to problem (11) defined over a finite domain ($0 \leq x \leq L$), let us define the auxiliary problem

$$Z'(x, r) + HZ(x, r) = 0, \quad (12)$$

subject to the boundary condition

$$Z(0, r) = W_0 \quad (12a)$$

and boundness of the vector Z at infinity. Here W_0 is the vector $W_0 = \text{col}(W_1, W_2)$ and only the subvector W_1 is known. Comparing problems (12) and (11), we promptly realize that the solution of problem (11), actually coincides with the solution of problem (12) when we restrict the solution to the domain $0 \leq x \leq L$. To fulfill this constrain we must apply the condition $Z(L, r) = 0$. We are now in position to solve problem (11). For such we initially apply the Laplace transform technique to problem (12) and then perform the diagonalization of the matrix H . This procedure allow us to perform the Laplace inversion yielding the solution

$$Z(x, r) = X \exp(Dx)X^{-1}Z(0) = M(x, r)\xi \quad (13)$$

where $M(x, r) = X \exp(Dx)$ and $\xi = X^{-1}Z(0)$. By the choice of a new arbitrary constant vector ξ , we avoid the inversion of X . To this point we must notice that all components of the arbitrary constant vector ξ are unknown.

Here X is the matrix of eigenvectors of matrix H and D is a diagonal matrix of the respective eigenvalues. As mentioned, to construct the solution of problem (11) we need to apply the condition $Z_2(L, r) = 0$ and also $Z_1(0, r) = Q\Psi_j(H_s)A^{-1}$ because the new constant vector definition (ξ). For such we recast the solution given by Eq. (13) like:

$$\begin{pmatrix} Z_1(x, r) \\ Z_2(x, r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(x, r) & M_{12}(x, r) \\ M_{21}(x, r) & M_{22}(x, r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

To determine the unknown vector ξ , we solve the following linear system resulting from the application of the boundary conditions (11a) to the solution appearing in Eq. (14), namely

$$\begin{pmatrix} M_{11}(0, r) & M_{12}(0, r) \\ M_{21}(L, r) & M_{22}(L, r) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_1(0, r) \\ Z_2(L, r) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Once the constant vector is obtained, the solution for pollutant concentration given by Eq. (4) is well determined.

Finally, the time-dependent concentration is obtained inverting numerically the transformed concentration $C(x, z, r)$ by the FT algorithm [8], [9]:

$$c^y(x, z, t) = \sum_{i=0}^N \Psi_i(z) \left(\frac{r}{M} \left\{ \frac{1}{2} \bar{c}_i(x, r) e^{rt} + \sum_{k=1}^{M-1} \text{Re} \left[e^{t S(\theta_k)} \bar{c}_i(x, S(\theta_k)) (1 + i \sigma(\theta_k)) \right] \right\} \right) \quad (16)$$

where $S(\theta_k) = r\theta(\cot\theta + i)$, $-\pi < \theta < +\pi$, $\sigma(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot\theta_k - 1)\cot\theta_k$, $\theta_k = \frac{k\pi}{M}$ and $r = 2M/5t$ is a parameter based on numerical experiments. To control the round-off error in the computation of (16), we specify the precision requirement: number of precision decimal digits = M .

We must remind that above equations deal with cross-wind integrated concentration $c^y(x, z, t)$. Indeed, if we want to calculate the three-dimensional concentration $c(x, y, z, t)$, lateral diffusion needs to be included. If we assume that the plume has a Gaussian concentration distribution in the lateral, then, to calculate the concentration in the K-model, the following expression is assumed:

$$c(x, y, z, t) = c^y(x, z, t) \frac{e^{(-y^2/2\sigma_y^2)}}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \quad (17)$$

where $C(x, z, t)$ is computed from Eq. (16).

3. TURBULENT PARAMETERIZATIONS

In the atmospheric diffusion problems, the turbulent parameterization represents a fundamental aspect of contaminant dispersion modeling. The reliability of each model strongly depends on the way that turbulent parameters are calculated and related to the current understanding of the PBL [10].

For the stable case, the lateral dispersion parameter σ_y can be written with the equation used to relate σ_y to σ_θ (root mean square value of horizontal wind direction). Cirillo and Poli [2] proposed the following relation to estimate σ_y from σ_θ :

$$\sigma_y = x[\sinh(\sigma_\theta^2)]^{1/2} \quad (18)$$

To represent the near-source diffusion in weak winds the eddy diffusivities should be considered as functions of not only turbulence (*e.g.*, large eddy length and velocity scales), but also of distance from the source [11]. Following this idea, [12] proposed for the Stable Boundary Layer (SBL) an algebraic formulation for the eddy diffusivities. It takes the form:

$$\frac{K_\alpha}{u_* h} = \frac{2\sqrt{\pi}0.64a_i^2(1-z/h)^{\alpha_1}(z/h)X' [2\sqrt{\pi}0.64a_i^2(z/h)+8a_i(fm)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X']}{[2\sqrt{\pi}0.64(z/h)+16a_i(fm)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X']^2}, \quad (19)$$

where u_* is the friction velocity, h is the height of the turbulent SBL, α_1 is a constant that depends on the evolution state of the SBL, $(f_m)_i = (f_m)_{n,i} \left(1 + 3.7 \frac{z}{\Lambda}\right)$ is the frequency of the spectral peak (i standing for the turbulent velocity components u , v and w), $(f_m)_{n,i}$ is the frequency of the spectral peak in the neutral stratification ($(f_m)_{n,w} = 0.33$; $(f_m)_{n,u} = 0.045$; [13]), z is the height above the ground, $\Lambda = L(1-z/h)^{(1.5\alpha_1-\alpha_2)}$ ($\alpha_1 = 1.5$; $\alpha_2 = 1$; [14]) is the local Monin-Obukhov length, $a_i = (2.7c_i)^{1/2} / (f_m)_{n,i}^{1/3}$, where $c_{v,w} = 0.4$ and $c_u = 0.3$ and finally, $X' = xu_* / uz$ represents the nondimensional distance. The generalized eddy diffusivity (19), as a function of downwind distance, is dependent on z and yields a description of turbulent dispersion in the near fields of a source.

The wind speed profile can be described by a power law expressed as follows [15]:

$$\frac{\bar{u}_z}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^n \quad (20)$$

where \bar{u}_z and \bar{u}_1 are the mean wind velocity at the heights z and z_1 , while n is an exponent that is related to the intensity of turbulence [16].

4. EXPERIMENTAL DATA AND MODEL EVALUATION

The data utilized to evaluate the performance of the model in stable conditions are constituted by a series of diffusion tests conducted under stable conditions for surface based releases with light winds over flat, even terrain: the results are published in a U.S. National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) report [1]. Because of wind direction variability a full 360° sampling grid was implemented. Arcs were laid out at radii of 100, 200 and 400m from the emission point. Samplers were placed at intervals of 6° on each arc, for a total of 180 sampling positions. The receptor height was 0.78m. The tracer SF₆ was released at a height of 1.5m. The 1h average concentrations were determined by means of an electron capture gas chromatograph. Wind measurements were provided by lightweight cup anemometers and

bivanes at the 2, 4, 8, 16, 32 and 61m levels of the 61m tower located on the 200m arc. Table 1 summarizes the conditions of the tests. In the table, the hourly average wind speed, u , and the standard deviation of the horizontal wind direction over the averaging period considered, σ_θ , are reported at the 2m level.

Run	u (m/s)	u_* (m/s)	σ_θ (deg)	L (m)
4	0.7	0.047	13.6	2.4
5	0.8	0.053	28.4	3.1
6	1.2	0.08	11.4	7.1
7	0.6	0.04	23.9	1.8
8	0.5	0.033	49.6	1.2
9	0.5	0.033	21.4	1.2
10	1.1	0.073	24.8	5.9
11	1.4	0.093	37.6	9.6
12	0.7	0.047	28.8	2.4
13	1.0	0.067	12.0	4.9
14	1.0	0.067	17.2	4.9

Table 1. Dispersion condition of the tests 4-14 for the stable case (INEL dataset). Meteorological variables are evaluated at the 2 m level.

The roughness length utilized was $z_0 = 0.005\text{m}$ by [17] and [1]. The input parameters L and u_* were not available for the INEL (Idaho National Engineering Laboratory) experiment. Thus, the Monin-Obukhov length was evaluated from an empirical formulation [18]:

$$L = 1100u_*^2 \quad (21)$$

The friction velocity was roughly obtained by the expression:

$$u_* = \frac{ku(z_r)}{\ln(z_r / z_0)}, \quad (22)$$

where $z_r = 2\text{m}$ (reference height) and k is the von Karman constant (~ 0.4). To calculate h (the height of the SBL), the relation $h = 0.4(u_*L/f_c)^{1/2}$ was used [19], where f_c is the Coriolis parameter.

As an example of application we used in this work $t = 3600\text{s}$. Figure 1 shows the observed and predicted scatter diagram of centerline concentrations (that is the centerline concentrations at the elevation of 0.78m) using the model. Regarding this issue, is important to point out that the model reproduces fairly well the observed concentration.

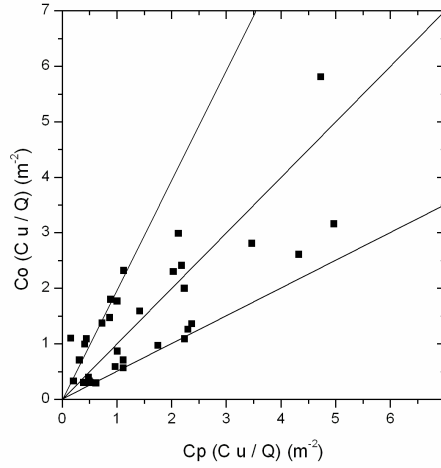


Figure 1. Observed (C_o) and predicted (C_p) scatter diagram of near ground-level centerline concentrations. Data between dot lines correspond to a factor of two.

Analysing the statistical indices [20] in Table 2 we notice that the model simulates satisfactorily the observed concentrations, regarding the $nmse$ (normalised mean square error), fb (fractional bias) and fs (fractional standard deviation) values relatively near to zero and r (correlation coefficient) and $fa2$ (factor of two) relatively near to 1.

	$nmse$	r	$fa2$	fb	fs
GILTT	0.27	0.81	0.76	-0.03	-0.11

Table 2. Statistical evaluation of models results.

5. CONCLUSIONS

We begin our final analysis of the proposed method, underlining that the reported solution is analytical, in the sense no approximation is made along the solution derivation except for the numerical inversion and round-off error. The unsteady mathematical model for the dispersion of a pollutant from a continuously emitting near-ground point source in a PBL, with low wind conditions, has been evaluated in stable conditions using the INEL experiment. Analyzing the results encountered depicted in the Table 2, we can say that, under statistical point of view, the results attained present a good comparison with the experimental data. Therefore the methodology discussed is promising to simulate pollutant dispersion in atmosphere. Furthermore, the use of the FT algorithm [9] allows us to obtain results with a prescribed accuracy.

We focus our future attention in the task of improving this methodology in order to make it

more operational for air quality modeling.

Acknowledgments

The authors thank to CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) and the project “Laboratorio LaRIA” for the partial financial support of this work.

REFERENCES

- [1] M. Sharan, A.K. Yadav, “Simulation of experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model”, *Atmos. Environ.* Vol. **32**, pp. 3481-3492, (1998).
- [2] M.C. Cirillo, A.A. Poli, “An inter comparison of semi empirical diffusion models under low wind speed, stable conditions”, *Atmos. Environ.* Vol. **26A**, pp. 765-774, (1992).
- [3] J.F. Sagendorf, C.R. Dickson, “Diffusion under low wind-speed, inversion conditions”, U.S. National Oceanic and Atmospheric Administration Technical Memorandum ERL ARL-52, (1974).
- [4] D. Oettl, R.A. Almbauer, P.J. Sturm, “A new method to estimate diffusion in stable, low-wind conditions”, *J. Appl. Meteor.* Vol. **40**, pp. 259-268, (2001).
- [5] D.M. Moreira, M.T. Vilhena, D. Buske, T. Tirabassi, “The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL”, *Atmos. Environ.* Vol. **40**, pp. 3186-3194, (2006).
- [6] S. Wortmann, M.T. Vilhena, D.M. Moreira, D. Buske, “A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL”, *Atmos. Environ.* Vol. **39**, pp. 2171-2178, (2005).
- [7] D.M. Moreira, M.T. Vilhena, T. Tirabassi, D. Buske, R.M. Cotta, “Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method”, *Atmos. Environ.* Vol. **39** (34), pp. 6290-6295, (2005).
- [8] P.P. Valkó, J. Abate, “Comparison of sequence accelerators for the Gaver method of numerical Laplace transform inversion”, *Computers and Mathematics with Application* **48**, pp. 629-636, (2004).
- [9] J. Abate, P.P. Valkó, “Multi-precision Laplace transform inversion”, *Int. J. for Num. Methods in Engineering* **60**, pp. 979-993, (2004).
- [10] C. Mangia, D.M. Moreira, I. Schipa, G.A. Degrazia, T. Tirabassi, U. Rizza, “Evaluation of a new eddy diffusivity parameterization from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions”, *Atmos. Environ.* **36**, pp. 67-76, (2002).
- [11] P. Arya, “Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds”, *J. Appl. Meteor.* **34**, pp. 1112-1122, (1995).
- [12] G.A. Degrazia, M.T. Vilhena, O.L.L. Moraes, “An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion”, *Il*

- Nuovo Cimento* **19C**, 399-403, (1996).
- [13] Z. Sorbjan, *Structure of the atmospheric boundary layer*, Prentice Hall, New Jersey, 317pp. (1989).
- [14] F.T.M. Nieuwstadt, “The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer”, *J. Atmos. Sci.* **41**, pp. 2202-2216, (1984).
- [15] H.A. Panofsky, J.A. Dutton, *Atmospheric Turbulence*, John Wiley & Sons, New York, (1988).
- [16] J.S. Irwin, “A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability”, *Atmos. Environ.* **13**, pp. 191-194. (1979).
- [17] G. Brusasca, G. Tinarelli, D. Anfossi, “Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions”, *Atmos. Environ.* **26A**, pp. 707-723, (1992).
- [18] P. Zannetti, *Air Pollution Modelling*, Computational Mechanics Publications, Southampton, 444pp, (1990).
- [19] S.S. Zilitinkevith, “On the determination of the height of the Ekman boundary layer”, *Boundary-Layer Met.* **3**, pp. 141-145, (1972).
- [20] S.R. Hanna, “Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods”, *Atmos. Environ.* **23**, pp. 1385-1395. (1989).

APÊNDICE II

Analytical solution of the transient two-dimensional advection-diffusion equation considering nonlocal closure of the turbulence diffusion

Artigo apresentado e publicado nos anais da conferência Turbulence, Heat and Mass Transfer 5 (THMT'06) que se realizou na cidade de Dubrovnik na Croácia no período de 25 a 29 de setembro de 2006.

Analytical Solution for the Transient Two-Dimensional Advection-Diffusion Equation Considering Nonlocal Closure of the Turbulent Diffusion

D. Buske¹, M. T. de Vilhena¹, D. M. Moreira¹ and T. Tirabassi²

¹*Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul Sarmiento Leite, 425, 3º andar, 90046-900 Porto Alegre, RS, Brazil,*

buske@mecanica.ufrgs.br, vilhena@mat.ufrgs.br, davidson@mecanica.ufrgs.br

²*Institute ISAC of CNR,*

Via P. Gobetti, 101, 40129 Bologna, Italy, t.tirabassi@isac.cnr.it

Abstract — We presented an analytical solution for air pollution dispersion in the atmosphere, solving analytically the transient two-dimensional advection-diffusion equation by the GILTT method, assuming a nonlocal closure of the turbulent diffusion. We also report statistical comparisons with experimental data.

1. Introduction

Eulerian approach for modeling the statistical properties of the concentrations of contaminants in a turbulent flow as the Planetary Boundary Layer (PBL) is widely used in the field of air pollution studies. Within this frame, the diffusion equation that describes the cross-wind integrated concentrations arising from a continuous point source can be written as

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + W \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S, \quad (1)$$

where \bar{c} is the crosswind-integrated concentration, $\overline{w'c'}$ is the vertical turbulent contaminant flux, U and W are the mean longitudinal and vertical components of the wind speed, respectively, and S is the sink/source term, while molecular diffusion has been neglected. Moreover the along-wind diffusion was neglected because considered little in respect to the advection. One of the most widely used closures for Eq. (1), is based on the gradient transport hypothesis which, in analogy to molecular diffusion, assumes that turbulence causes a net movement of material down the gradient of material concentration at a rate which is proportional to the magnitude of the gradient [1]

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (2)$$

where K_z is the vertical eddy diffusivity which must be evaluated using empirical data. The simplicity of the K-theory of turbulent diffusion has led to the widespread use of this theory as mathematical basis for simulating pollutant dispersion (open country, urban, photochemical pollution, etc). But K-closure has its own limits. In contrast to molecular diffusion, turbulent diffusion is scale-dependent. This means that the rate of diffusion of a cloud of material generally depends on the cloud dimensions and the intensity of turbulence. As the cloud grows, larger eddies are incorporated in the expansion process, so that a progressively larger fraction of turbulent kinetic energy is available for the cloud expansion.

Another problem is that the down-gradient transport hypothesis is inconsistent with observed features of turbulent diffusion in the upper portion of the mixed layer, at convective cases where countergradient material fluxes are known to occur [2].

Because countergradient fluxes are thought to be indicative of boundary layer scale eddies, as opposed to small scale ones, such fluxes are often called non-local fluxes. Local K-theory is a method for parameterizing the effects of turbulent mixing based on how small eddies will mix quantities along a local gradient of the transported quantity.

Already some decades ago it was noted that in the upper part of convectively driven boundary layers, the flux of potential temperature is counter to the gradient of the mean potential temperature profile ([3], [4], [5]). The mean potential temperature gradient and the flux change sign at different levels introducing a certain region in the convective boundary layer where they have the same sign. This was in contrast with the common view in first order turbulent closure that turbulent diffusion is downgradient. In order to describe diffusion also in these regions, Ertel [3] and Deardoff [5], [6] proposed to modify the usual applied flux-gradient relationship in K-theory approach according to

$$\overline{w'c'} = -K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right), \quad (3)$$

where γ represents the countergradient term.

In the last years, special attention has been devoted to the task of searching analytical solutions for the advection-diffusion equation in order to simulate the pollutant dispersion in the Planetary Boundary Layer (PBL). Recently, a solution [7] for the transient two-dimensional advection-diffusion equation using the Fickian model appeared in the literature. In this work the advection-diffusion equation is solved by the Laplace Transform technique and the resulting stationary problem by the Generalized Integral Laplace Transform Technique (GILTT). The main idea of the method comprehends the steps: solution of an associated Sturm-Liouville problem, expansion of the pollutant concentration in a series in terms of the evaluated eigenfunction, replacing this expansion in the advection-diffusion equation and taking moments. This procedure leads to a set of ordinary differential equations, known as the transformed problem, which are then analytically solved by the Laplace Transform technique. At this point it is convenient to mention that the meaning of analytical solution relies on the fact that no approximation is made along its derivation except for the inversion of time Laplace Transform concentration.

In this work, we step forward solving the transient two-dimensional equation now assuming the nonlocal closure of the turbulent diffusion [8]. The main difference from the previous work consist in the appearance of cross derivative terms in the diffusion-advection equation which are work out by the GILTT approach in straightforward manner. To reach this goal, we outline the paper as follows: in section 2 we show the derivation of the advection-diffusion equation by the GILTT method for the counter-gradient model. In section 3, we present the turbulent parameterizations. finally, in section 4 we display numerical results and statistical comparisons with experimental data.

2. Solution of the transient advection-diffusion equation

Many schemes and parametrization for countergradient term have been developed (e.g., Wyngaard and Brost [9]; Fiedler and Moeng [10]; Holtslag and Moeng [11]; Wyngaard and Weil [12]; Holtslag and Boville [13]; Hamba [14]; Robson and Mayocchi [15]; Zilitinkevich [16]; De Roode et al. [17]).

The generic equation for turbulent diffusion suggested by van Dop and Verver [8], where the vertical turbulent contaminant flux can be written as

$$\left(1 + \left(\frac{S_k \sigma_w T_{l_w}}{2}\right) \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial t}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (4)$$

where S_k is the skewness, σ_w is the vertical turbulent standard deviation, T_{l_w} is the Lagrangian time scale, τ is the time relaxation and K_z is the vertical eddy diffusivity.

In this work, Eq. (4) is substituted in Eq. (1), leading to

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial t} + U \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial x} + W \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial z} \right) - \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta U \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta W \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial z} \right) - \\ \tau \frac{\partial^2 \bar{c}(x, z, t)}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} \left(\tau U \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left(\tau W \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (5)$$

where $\beta = 0.5 S_k \sigma_w T_{l_w}$.

The Eq. (5) is subject to the usual boundary conditions of zero flux at the ground and PBL top, and a continuous source condition with emission rate Q at height H_s

$$K_z \frac{\partial \bar{c}(x, z, t)}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0, \quad z = z_i, \quad (6)$$

$$U \bar{c}(0, z, t) = Q \delta(z - H_s) \quad em \quad x = 0, \quad (7)$$

we also assume that at the beginning of the pollutant releasing the dispersion region is not polluted, we mean

$$\bar{c}(x, z, 0) = 0 \quad em \quad t = 0, \quad (8)$$

where z_i is the PBL height. In the sequel we consider that K_z , the wind speed U and W depend only on the variable z .

In order to solve problem (5), taking advantage of the well known solution of the stationary problem with advection in the x direction by the GILTT method ([18], [19]), we apply the Laplace Transform technique in Eq. (5), in the t variable. This procedure leads to the stationary problem

$$\begin{aligned} r \bar{C}(x, z, r) + U \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} + W \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} \right) - \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta r \bar{C}(x, z, r) \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta U \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta W \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z} \right) - \\ \tau r^2 \bar{C}(x, z, r) - \tau U r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial x} - \tau W r \frac{\partial \bar{C}(x, z, r)}{\partial z}, \end{aligned} \quad (9)$$

where \bar{C} denotes the Laplace Transform technique of the concentration in the t variable, we mean $\bar{C}(x, z, r) = L\{\bar{c}(x, z, t); t \rightarrow r\}$.

The stationary problem Eq. (9) is solved by the GILTT method. It's important to mention that the solution of the stationary advection-diffusion equation for the case when $\beta \rightarrow 0$, $\tau \rightarrow 0$ and $W = 0$ was obtained in [18] and [19].

Following the works of Moreira et al. [18] and Wortmann et al. [19], we pose that the solution of of Eq. (9) is

$$\overline{C}(x, z, r) = \sum_{i=0}^n \overline{C_i(x, r)} \psi_i(z), \quad (10)$$

where $\psi_i(z)$ is the eigenfunction ($\psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$ for $i = 0, 1, 2, \dots$) obtained from the solution of the Sturm-Liouville problem and λ_i are the respective eigenvalues ($\lambda_i = \frac{i\pi}{h}$ for $i = 0, 1, 2, \dots$). It is important to mention that the problem (9) has the additional term of the countergradient and the advection in the z direction regarding the works [18] and [19]. That is the reason we can't straightly apply the GILTT solution attained by these authors. Therefore, by a similar procedure, we replace the Eq. (10) in Eq. (9), and after taking moments we come out with a set of ordinary differential equations given by

$$Y'(x) + F.Y(x) = 0, \quad (11)$$

where $Y(x)$ is the column vector whose components are $\overline{C_i(x, r)}$ and the matrix F is defined as $F = B^{-1}E$. Here the entries of matrices B and E are respectively given by

$$\begin{aligned} b_{i,j} = & - \int_0^{z_i} U \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz + \int_0^{z_i} \beta U \zeta_i'(z) \zeta_j(z) dz + \\ & + \int_0^{z_i} (\beta U)' \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz + \tau r \int_0^{z_i} U \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz, \end{aligned} \quad (12)$$

and

$$\begin{aligned} e_{i,j} = & \int_0^{z_i} K'_z \zeta_i'(z) \zeta_j(z) dz - \lambda_i^2 \int_0^{z_i} K_z \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz - \int_0^{z_i} W \zeta_i'(z) \zeta_j(z) dz - \\ & - r \int_0^{z_i} \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz - r \int_0^{z_i} \beta \zeta_i'(z) \zeta_j(z) dz - r \int_0^{z_i} \beta' \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz - \\ & - \tau r^2 \int_0^{z_i} \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz + \lambda_i^2 \int_0^{z_i} \beta W \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz - \\ & - \int_0^{z_i} (\beta W)' \zeta_i'(z) \zeta_j(z) dz - \tau r \int_0^{z_i} W \zeta_i'(z) \zeta_j(z) dz. \end{aligned} \quad (13)$$

The transformed problem represented by the Eq. (11) is solved by the Laplace Transform technique and diagonalization and has the well-known solution:

$$Y(x) = X.G(x).\xi. \quad (14)$$

where X is the eigenfunction matrix, G is the diagonal matrix whose entries have the form $e^{-d_i x}$, d_i are the eigenvalues of F and ξ the integration constant vector. Knowing the coefficients of the concentration series expansion the solution of problem (9) is well determined by Eq. (10).

No approximations are made along the derivation of this solution and so it is analytical except for the round-off error (for more details see [18] and [19]).

We obtain the time dependent concentration, by performing the Laplace inversion of the transformed concentration $\overline{C}(x, z, r)$, numerically, by the Gaussian quadrature scheme. By this procedure we get

$$\overline{c}(x, z, t) = \sum_{k=1}^m \frac{P_k}{t} A_k \sum_{i=0}^n \overline{C_i(x, \frac{P_k}{t})} \psi_i(z), \quad (15)$$

where A_k and P_k are the weights and roots of the Gaussian quadrature scheme tabulated in the book of Stroud and Secrest [20].

Finally, it is important to recall that the solution of problem (Eq. 5) given by Eq. (15), is analytical, in the sense that no approximation is made along its derivation, except for the Laplace numerical inversion and round-off error. Regarding the issue of Laplace numerical inversion, it is important to mention, that this approach is exact if the transformed function is a polynomial of degree $2M - 1$ in the $1/s$ variable.

3. Boundary layer parameterizations

In order to use the above solution we have to select a wind and eddy coefficient vertical profiles. In the atmospheric diffusion problems the choice of a turbulent parameterization represents a fundamental decision for pollutant dispersion modeling. The reliability of each model strongly depends on the way the turbulent parameters are calculated and is related to the current understanding of the PBL [21].

In terms of the convective scaling parameters the vertical eddy diffusivity can be formulated as [22]

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \left[1 - \exp\left(\frac{-4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right], \quad (16)$$

where w_* is the convective velocity scale and z_i is the top of the PBL.

The wind speed profile can be described by a power law expressed as follows [23]

$$\frac{\overline{u}_z}{\overline{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^n, \quad (17)$$

where \overline{u}_z and \overline{u}_1 are the mean wind velocity at the heights z and z_1 , while n is an exponent that is related to the intensity of turbulence [24].

4. Numerical results

To analyse the influence of the countergradient term in the turbulent transport we perform the simulation using the experiments of Copenhagen [25] and Prairie-Grass [26] for different values of S_k .

The Copenhagen field campaign [27] took place in the suburbs of Copenhagen in 1978. A *SF6* tracer was released without buoyancy from a tower at a height of 115m and collected at ground-level on arcs located 2000, 4000, and 6000m from the release point. The site was mainly residential with a roughness length, z_0 , of 0.6m. The meteorological conditions during the dispersion experiments ranged from moderately unstable to convective. The Prairie Grass data set [26] is composed of dispersion data from a field experiment conducted in an open country (z_0 was 0.008m) during the summer of 1956 in O'Neill, Nebraska. Sulphur dioxide was released

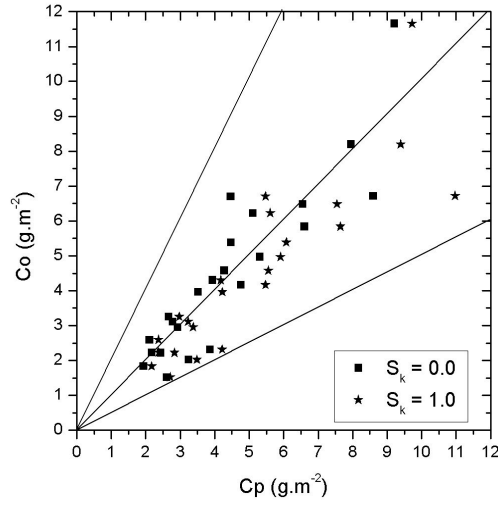


Figure 1: Scatter plotted of observed (C_o) and computed (C_p) data for the Copenhagen experiment. The data between two external lines are in a factor of 2.

from a continuous point source at a height of $0.46m$ and collected at different distances from the source. Here, we use only experiments ranged from moderately unstable to convective conditions and data collected at 5 arcs, 50, 100, 200, 400, 800m, as presented in Nieuwstadt [28]).

In Table 1, we display the statistical indices results to evaluate the model performance, following the work of Hanna [29]. The statistical index FB (fractional bias) indicates whether the predicted quantities (C_p) underestimates or overestimates the observed ones (C_o). The statistical index NMSE (normalized mean square) represents the quadratic error of the predicted quantities in relation to the observed ones. Best results are indicated by values nearest zero in NMSE, FB and FS (fractional standard deviations), and nearest 1 in COR (correlation coefficient), FA2 (fraction of data for $0.5 \leq (C_p/C_o) \leq 2$). The statistical indices shows a good agreement between experimental data and GILTT results. We reinforce this argument, presenting in Figure (1) the scatter the scatter diagram assuming $S_k = -1.0, 0.0$ and 1.0 .

Table 1: Statistical evaluation of the model results for ground-level concentration for the Copenhagen experiment

Model	NMSE	COR	FA2	FB	FS
$S_k = -1.0$	0.08	0.91	1.00	0.14	0.26
$S_k = 0.0$	0.05	0.91	1.00	0.02	0.15
$S_k = 1.0$	0.08	0.88	1.00	-0.13	0.03

In Table 2, we display the statistical indices results to evaluate the model performance, for the Prairie-Grass data set. The statistical indices shows a good agreement between experimental data and GILTT results. This argument is reinforced by Figure (2) where the scatter diagram

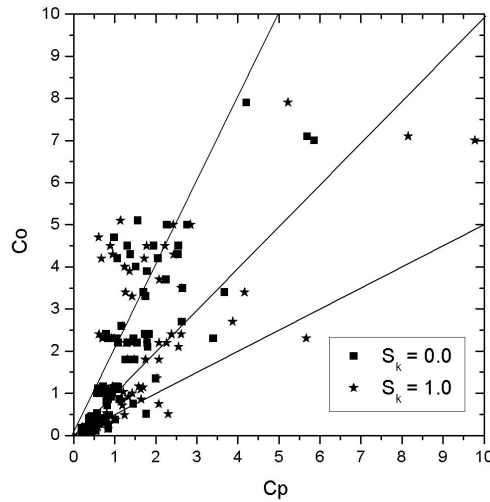


Figure 2: Scatter plotted of observed (C_o) and computed (C_p) data for the Prairie-Grass experiment. The data between two external lines are in a factor of 2.

assuming $S_k = 0.0$ and 1.0 is presented.

Table 2: Statistical evaluation of the model results for ground-level concentration for the Prairie-Grass experiment

Model	NMSE	COR	FA2	FB	FS
$S_k = -1.0$	0.30	0.88	0.71	0.09	0.26
$S_k = 0.0$	0.74	0.83	0.66	0.37	0.52
$S_k = 1.0$	0.52	0.85	0.74	0.26	0.39

Figure 3 shows an example of the concentrations in function to the distance from the source with and without the counter-gradient term for a run of the Copenhagen data set. The experiment 8 of Copenhagen was characterized by a wind velocity at 10 m height of 4.2 m/s, a friction velocity of 0.69 m/s and a Monin-Obukhov length of -56 m. The experimental data are showed in the figure also. It is possible to see that the influence of counter-gradient term is confined near the source only and that the results are closer to experimental data for negative values of S_k .

Moreover Figure 4 shows an example of the concentrations in function to the distance from the source with and without the counter-gradient term for a run of Prairie Grass data set. The experiment used was characterized by a wind velocity at 10 m height of 5.1 m/s, a friction velocity of 0.37 m/s and a Monin-Obukhov length of -10 m. The experimental data are showed in the figure also. Again, it is possible to see that the influence of counter-gradient term is confined near the source only but now the results are closer to experimental data for positive values of S_k .

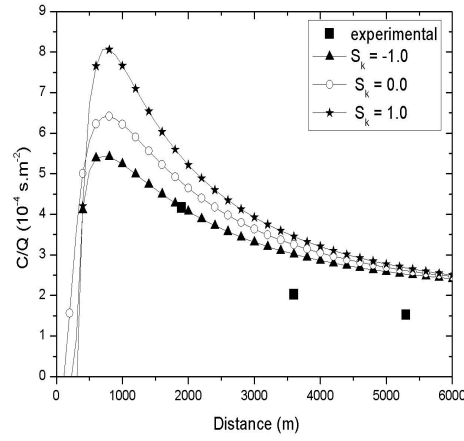


Figure 3: Concentration in function to the distance from the source with $S_k = -1.0, 0.0$ and 1.0 for the run 8 of Copenhagen data set.

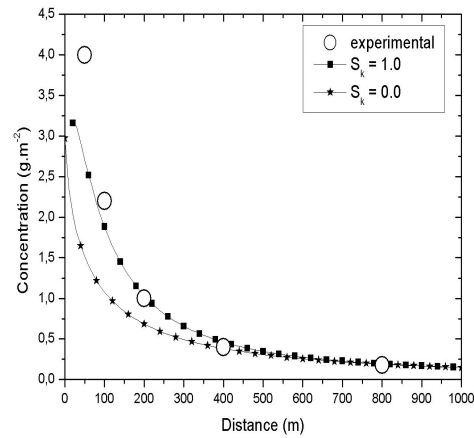


Figure 4: Concentration in function to the distance from the source with $S_k = 0.0$ and 1.0 for a run of Prairie Grass data set.

5. Conclusions

Analysing the results discussed in the previous section, we promptly realize an improvement of the numerical results, comparing with the K-model, for the counter-gradient model for the low source problem and for points near the source considering $S_k = 1$. On the other hand for problems with high source and again for points near the source we notice that the counter-gradient results are closer to experimental data now for $S_k = -1$. This unexpected results (for S_k negative) although not well understood, has an explanation given by Cuijpers and Holtslag [30]. Indeed, they have shown that in the dry convective boundary layer, the nonlocal term in Eq. (4) is negative due to the similar signs of skewness and scalar flux gradient. In the smoke-cloud case, the nonlocal term is positive because of opposite signs of skewness and flux gradient [30]. In our opinion the assumption of negative values for the parameter S_k deserves more investigation for a better comprehension.

Indeed we have to remark that the results either for the problem with high and low source, for points far from the source show the equivalence of the counter-gradient and K-model. Although the application of the proposed solution is specialized to air pollution problems, we would like to point out that this kind of solution is quite general in the sense that can be applied to others fields of science, like heat and mass transfer problems.

6. Acknowledgements

The authors thank to CNPq and CAPES for the partial financial support of this work.

References

1. J.H. Seinfeld and S.N. Pandis. Atmospheric chemistry and physics. John Wiley & Sons, New York, 1997.
2. J.W. Deardoff and G.E. Willis. A parameterization of diffusion into the mixed layer. *Journal of Applied Meteorology*, 14:1451-1458, 1975.
3. H. Ertel. Der vertikale turbulenz-wärmestrom in der atmosphäre. *Meteor. Z.*, 59:250-253, 1942.
4. C.H.B. Priestly and W.C. Swinbank. Vertical transport of heat by turbulence in the atmosphere. *Proc. Roy. Soc. London*, 543-561, 1947.
5. J.W. Deardoff. The countergradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. *Journal of Atmospheric Science*, 23:503-506, 1966.
6. J.W. Deardoff. Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. *Journal of Atmospheric Science*, 29:91-115, 1972.
7. D.M. Moreira, M.T. Vilhena, D. Buske and T. Tirabassi. The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL. *Atmospheric Environment*, 40:3186-3194, 2006.
8. H. van Dop and G.S. Verver. Countergradient transport revisited. *Journal of Atmospheric Science*, 58:2240-2247, 2001.
9. J.C. Wyngaard and R.A. Brost. Top-down bottom-up diffusion of a scalar in the convective boundary layer. *Journal of Atmospheric Science*, 41:102-112, 1984.
10. B.H. Fiedler and C.H. Moeng. A practical integral closure model for mean vertical transport of a scalar in a convective boundary layer. *Journal of Atmospheric Science*, 42:359-363, 1985.
11. A. Holtslag and C.H. Moeng. Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. *J. Climate*, 48:1690-1698, 1991.

12. J.C. Wyngaard and J.C. Weil. Transport asymmetry in skewed turbulence. *Phys. Fluids A*, 3:155-162, 1991.
13. A. Holtslag and B.A. Boville. Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model. *J. Climate*, 6:1825-1842, 1993.
14. F. Hamba. A modified K model for chemically reactive species in the planetary boundary layer. *J. Geophys. Res.*, 98:5173-5182, 1993.
15. R.E. Robson and C.L. Mayocchi. A simple model of countergradient flow. *Physics of Fluids*, 6:1952-1954, 1994.
16. S. Zilitinkevich, V.M. Gryanik, V.N. Lykossov and D.V. Mironov. Third-order transport and nonlocal turbulence closures for convective boundary layers. *Journal of Atmospheric Science*, 56:3463-3477, 1999.
17. S.R. De Roode, H.J.J. Jonker, P.G. Duynkerke and B. Stevens. Countergradient fluxes of conserved variables in the clear convective and stratocumulus-topped boundary layer: the role of the entrainment flux. *Boundary-Layer Meteorology*, 112:179-196, 2004.
18. D.M. Moreira, M.T. Vilhena, T. Tirabassi, D. Buske. and R.M. Cotta. Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method. *Atmospheric Environment*, 39:6289-6294, 2005.
19. S. Wortmann, M.T. Vilhena, D.M. Moreira and D. Buske. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment*, 39:2171-2178, 2005.
20. A.H. Stroud and D. Secrest. Gaussian Quadrature Formulas. Englewood Cliffs, N.J., Prentice Hall Inc., 1966.
21. C. Mangia, D.M. Moreira, I. Schipa, G.A. Degrazia, T. Tirabassi and U Rizza. Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions. *Atmospheric Environment*, 36:67-76, 2002.
22. G.A. Degrazia, H.F. Campos Velho and J.C. Carvalho. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. *Contributions to Atmospheric Physics*, 57-64, 1997.
23. A.H. Panofsky and J.A. Dutton. Atmospheric Turbulence. John Wiley & Sons, New York, 1988.
24. J.S. Irwin. A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. *Atmospheric Environment*, 13:191-194, 1979.
25. S.E. Gryning, A.M.M. Holtslag, J. Irwin and B. Sivertsen. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment*, 21:79-89, 1987.
26. M.L. Barad. Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion. *Geophys. Res.*, Paper No. 59 (II) TR-58-235, Air Force Cambridge Research Centre, USA, 1958.
27. S.E. Gryning and E. Lyck. Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal of Climate Applied Meteorology*, 23:651-654, 1984.
28. F.T.M. Nieuwstadt. Application of mixed-layer similarity to the observed dispersion from a ground level source. *Journal of Climate Applied Meteorology*, 19:157-162, 1980.
29. S.R. Hanna. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment*, 23:1385-1395, 1989.
30. J.W.M. Cuijpers and A.A.M. Holtslag. Impact of skewness and nonlocal effects on scalar and buoyancy flux in convective boundary layers. *Journal of Atmospheric Science*, 55:151-162, 1998.

APÊNDICE III

The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL

Artigo publicado na revista Atmospheric Environment, volume 40, páginas 3186-3195, no ano de 2006.

The GILTT solution of the advection–diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL

D.M. Moreira^{a,*}, M.T. Vilhena^a, D. Buske^a, T. Tirabassi^b

^aUniversidade Federal do Rio Grande do Sul, PROMEC, Porto Alegre, Brazil

^bInstitute ISAC of CNR, Italy

Received 28 July 2005; received in revised form 10 January 2006; accepted 20 January 2006

Abstract

In this work, we present an analytical solution for the nonstationary two-dimensional advection–diffusion equation to simulate the pollutant dispersion in the planetary boundary layer. In this method the advection–diffusion equation is solved by the application of the Laplace transform technique and the solution of the resulting stationary problem by the generalised integral Laplace transform technique (GILTT). We also report numerical simulations and statistical comparison with experimental data available in the literature.

© 2006 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: GILTT; Laplace transform; Atmospheric dispersion; Analytical solution; Time-dependent advection–diffusion equation; Planetary boundary layer; Air pollution modeling

1. Introduction

Lately, special attention has been devoted to the task of simulating pollutant dispersion in atmosphere by solving analytically the advection–diffusion equation. In fact, recently, appeared the generalised integral Laplace transform technique (GILTT) method which solved the two-dimensional stationary advection–diffusion equation (Wortmann et al., 2005; Moreira et al., 2005a), assuming advection only in the x direction and dependency of the eddy diffusivity on z and x , z variables. The main idea of this methodology relies on the solution of the classical GITT transformed equations (Cotta,

1993; Cotta and Mikhaylov, 1997; Cotta et al., 2003) analytically, by the Laplace transform technique. In this work, also pursuing the issue of constructing analytical solution, we step further, now solving the two-dimensional nonstationary advection–diffusion equation, applying the Laplace transform technique in the time variable (Moreira et al., 2005b) and solving the stationary resulting equation by the GILTT method, considering advection either in the x and z variables. To reach this goal we outline the paper as follows: in Section 2, we present the solution of the nonstationary advection–diffusion equation; in Section 3, we briefly report the parameterization considered; in Section 4, we display numerical simulations and statistical comparison with experimental data, we also discuss, under mathematical and computational point of view, the results encountered.

*Corresponding author.

E-mail address: davidson@mecanica.ufrgs.br
(D.M. Moreira).

Finally, in Section 5, we present an analysis of the methodology proposed.

2. Solution of the nonstationary advection–diffusion equation

Let us consider the crosswind integrated nonstationary advection–diffusion equation with advection in the x and z direction (as usual, the alongwind diffusion is neglected because considered little in respect to the advection):

$$\frac{\partial c(x, z, t)}{\partial t} + U \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial x} + W \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, z, t)}{\partial z} \right), \tag{1}$$

where c denotes the crosswind integrated concentration, K_z is the vertical eddy diffusivity and U and W are the components longitudinal and vertical of the wind speed, respectively. Moreover, we introduce the usual boundary conditions of zero flux at the ground and planetary boundary layer (PBL) top, and a continuous source condition with emission rate Q at height H_s :

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

$$Uc(0, z, t) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{at } x = 0, \tag{1b}$$

we also assume that at the beginning of the pollutant releasing the dispersion region is not polluted, we mean

$$c(x, z, 0) = 0 \quad \text{at } t = 0, \tag{1c}$$

where h is the PBL height. In the sequel, we consider that K_z , the wind speed U and W depend only on the variable z .

In order to solve problem (1), taking advantage of the well-known solution of the stationary problem with advection in the x direction by the GILTT method (Moreira et al., 2005a), we apply the Laplace transform technique in Eq. (1), in the t variable. This procedure leads to the stationary problem

$$U \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial x} + W \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} = K_z \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, s)}{\partial z^2} + K'_z \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} - s\bar{C}(x, z, s), \tag{2}$$

where \bar{C} denotes the Laplace transform technique of the concentration in the t variable, we mean $\bar{C}(x, z, s) = L\{c(x, z, t); t \rightarrow s\}$. Now, we are in

position to solve the stationary problem (2) by the GILTT approach. Likewise, in the works of Wortmann et al. (2005) and Moreira et al. (2005a), we pose that the solution of problem (2), has the form

$$\bar{C}(x, z, s) = \sum_{i=0}^N \frac{\bar{c}_i(x, s)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}, \tag{3}$$

where as λ_i and $\Psi_i(z)$ are the respective eigenvalues ($\lambda_i = i\pi/h$ for $i = 0, 1, 2, 3, \dots$) and eigenfunctions ($\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$ for $i = 0, 1, 2, 3, \dots$). It is important to mention that the problem (2) has the additional term of advection in the z direction regarding the works of the Wortmann et al. (2005) and Moreira et al. (2005a). That is the reason we cannot straightly apply the GILTT solution attained by these authors. Therefore, by similar procedure, we replace the above ansatz in Eq. (2) and we obtain

$$U \sum_{i=0}^N \frac{\bar{c}'_i(x, s)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}} + W \sum_{i=0}^N \frac{\bar{c}_i(x, s)\Psi'_i(z)}{N_i^{1/2}} = K_z \sum_{i=0}^N \frac{\bar{c}_i(x, s)\Psi''_i(z)}{N_i^{1/2}} + K'_z \sum_{i=0}^N \frac{\bar{c}_i(x, s)\Psi'_i(z)}{N_i^{1/2}} - s \sum_{i=0}^N \frac{\bar{c}_i(x, s)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}. \tag{4}$$

Here, we adopt the prime notation for the first derivative and double prime notation for the second derivative. Taking moments in Eq. (4), we promptly have

$$\sum_{i=0}^N \left[\frac{\bar{c}'_i(x, s)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h U \Psi_i(z)\Psi_j(z) dz + \frac{\bar{c}_i(x, s)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h W \Psi'_i(z)\Psi_j(z) dz + \frac{\bar{c}_i(x, s)\lambda_i^2}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h K_z \Psi_i(z)\Psi_j(z) dz - \frac{\bar{c}_i(x, s)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h K'_z \Psi'_i(z)\Psi_j(z) dz + \frac{s\bar{c}_i(x, s)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h \Psi_i(z)\Psi_j(z) dz \right] = 0 \tag{5}$$

for $i = 0, 1, 2, 3, \dots$, which can be recast in matrix fashion like

$$Y'(x, s) + FY(x, s) = 0, \tag{6}$$

where $Y(x, s)$ is the column vector whose components are $\bar{c}_i(x, s)$ and the matrix F is defined as

$F = B^{-1}E$. If the eddy diffusivity depend on the x and z variables, Eq. (6) reduces to an ordinary differential equation with variable coefficients. Therefore, recasting Eq. (6) in matrix fashion, we read

$$Y'(x, s) + F(x)Y(x, s) = 0. \tag{7}$$

Here the entries of matrices B and E are, respectively, given by

$$b_{ij} = \int_0^h U \Psi_i \Psi_j dz$$

and

$$e_{ij} = \frac{1}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \left[- \int_0^h K'_z \Psi'_i(z) \Psi_j(z) dz + \lambda_i^2 \int_0^h K_z \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \int_0^h W \Psi'_i(z) \Psi_j(z) dz + s \int_0^h \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz \right].$$

Therefore, we must notice that the components of the matrix F vary with the x variable. Indeed, to solve the Eq. (7) by the Laplace transform technique, likewise the work of [Moreira et al. \(2005a\)](#), we perform a stepwise approximation of the entries of the matrix $F(x)$ by taking average values for the eddy diffusivity and its derivative in the x variable for each sub-domain. Here, it is important to mention that no approximation is made on the derivatives appearing in the advection–diffusion equation. It turns out that problem (7) simplifies to the problem

$$Y'(x, s) + FY(x, s) = 0. \tag{8}$$

Now F is a matrix with constant components for each sub-domain considered. Henceforth, the previous solution obtained by [Wortmann et al. \(2005\)](#) can be applied in a straightforward manner. Indeed, the problem (8) has the well-known solution:

$$Y(x, s) = XG(x, s)\xi. \tag{9}$$

Here ξ is the integration constant vector, G is diagonal matrix whose entries have the form $e^{-d_i x}$, is the eigenfunction matrix, and d_i are the eigenvalues of the matrix F . Therefore, the transformed solution given by Eq. (3) is well determined. We obtain the solution of problem (1), by performing the Laplace inversion of Eq. (5), numerically, by the Gaussian quadrature scheme. By this procedure,

we obtain

$$c(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \bar{C} \left(x, z, \frac{P_k}{t} \right) \tag{10}$$

or

$$c(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \sum_{i=0}^N \frac{\bar{c}_i(x, P_k/t) \Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}, \tag{11}$$

where A_k and P_k are the weights and roots of the Gaussian quadrature scheme tabulated in the book of [Stroud and Secrest \(1966\)](#).

Finally, it is important to recall that the solution of problem (1) given by Eq. (11), is analytical, in the sense of no approximation is made along its derivation, except for the Laplace numerical inversion and round-off error. Regarding the issue of Laplace numerical inversion, it is important to mention, that this approach is exact if the transformed function is a polynomial of degree $2M-1$ in the $1/s$ variable. Furthermore, we must point out that we specialize this application, without loss of generality for an eddy diffusivity coefficient depending only on the z variable.

3. Boundary-layer parameterization

In terms of the convective scaling parameters the vertical eddy diffusivity can be formulated as ([Degrazia et al., 1997](#)):

$$\frac{K_z}{w_* h} = 0.22 \left(\frac{z}{h} \right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1/3} \left[1 - \exp \left(- \frac{4z}{h} \right) - 0.0003 \exp \left(\frac{8z}{h} \right) \right]. \tag{12}$$

The wind speed profile can be described by a power law expressed as follows ([Panofsky and Dutton, 1988](#)):

$$\frac{U_z}{U_1} = \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \tag{13}$$

where U_z and U_1 are the mean wind speeds horizontal to heights z and z_1 and n is an exponent that is related to the intensity of turbulence ([Irwin, 1979](#)).

4. Numerical simulations

Firstly, we evaluated the performance of the model with the boundary layer parameterization proposed, using the Copenhagen data set ([Gryning and Lyck, 1984](#)). The Copenhagen data set is

composed of tracer SF₆ data from dispersion experiments carried out in northern Copenhagen. The tracer was released without buoyancy from a tower at a height of 115 m and was collected at ground-level positions in up to three crosswind arcs of tracer sampling units. The sampling units were positioned 2–6 km far from the point of release. We used the values of the crosswind integrated concentrations normalized with the tracer release rate from Gryning et al. (1987). Tracer releases typically started up 1 h before the tracer sampling and stopped at the end of the sampling period. The site was mainly residential with a roughness length of 0.6 m. Generally the distributed data set contains hourly mean values of concentrations and meteorological data. However, in this work, we used data with a greater time resolution. In particular, we used 20 min averaged measured concentrations and 10 min averaged values for meteorological data. In such manner, in this work, the variables (L, u_*, w_*) in the Copenhagen data set are dynamical variables (except the variable h). For details of the experimental data see the work of Tirabassi and Rizza (1997). Tables 1–3 report the friction velocity, the Monin–Obukhov length and boundary layer height (only one value for each run), respectively, used in the simulations. To calculate w_* , the relation $w_*/u_* = (-h/kL)^{1/3}$ was used.

In Fig. 1, we plot the nondimensional crosswind integrated concentration ($C^* = cUh/Q$) as a function of nondimensional source distance ($X = xw_*/Uh$) for four different times ($t = 500, 1000, 1500, 2000$ s) considering nondimensional source height $H_s = 0.25h$ and different quadrature points.

Table 1
Friction velocity ($m\ s^{-1}$) for the different runs and time steps

Run time	1	2	3	4	5	7	8	9
1	0.36	0.68	0.46	0.56	0.58	0.48	0.65	0.72
2	0.37	0.67	0.45	0.51	0.52	0.48	0.79	0.73
3	0.40	0.81	0.47	0.37	0.51	0.57	0.67	0.60
4	0.43	0.68	0.39	0.44	0.58	0.62	0.67	0.59
5	0.35	0.75	0.39	0.48	0.59	0.53	0.68	0.65
6	0.34	0.74	0.40	0.48	0.52	0.65	0.65	0.71
7	0.42	0.76	0.40	0.39	0.52	0.63	0.68	0.73
8	0.43	0.82	0.41	0.40	0.45	0.65	0.67	0.73
9	0.40	0.76	0.31	0.39	0.44	0.66	0.73	0.73
10	0.37	0.73	0.34	0.39	0.44	0.62	0.73	0.66
11	0.35	0.69	0.39	0.39	0.44	0.52	0.75	0.67
12	0.36	0.66	0.40	0.39	0.43	0.62	0.69	0.74

Every time step corresponds at 10 min.

Table 2
Monin–Obukhov length (m) for the different runs and time steps

Run time	1	2	3	4	5	7	8	9
1	-26	-178	-152	-75	-492	-71	-71	-793
2	-23	-227	-194	-42	-215	-80	-85	-471
3	-83	-311	-106	-23	-368	-64	-47	-202
4	-42	-160	-101	-32	-735	-111	-49	-366
5	-36	-203	-129	-71	-366	-177	-45	-633
6	-42	-286	-70	-80	-273	-67	-63	-13 588
7	-47	-155	-83	-83	-273	-87	-41	-593
8	-38	-228	-60	-101	-262	-71	-47	-471
9	-83	-184	-106	-129	-395	-56	-70	-389
10	-21	-389	-42	-129	-395	-111	-64	-375
11	-32	-133	-101	-129	-395	-215	-52	-262
12	-29	-375	-70	-129	-759	-123	-39	-252

Every time step corresponds at 10 min.

Table 3
Boundary layer height for the different runs

Run	1	2	3	4	5	7	8	9
h (m)	1980	1920	1120	390	820	1850	810	2090

It can be noticed in the book of Stroud-Secrest (1966), that the modulus of the real part of the root of the Gaussian quadrature scheme for the Laplace transform inversion, increases with M (the order of approximation). Bearing in mind that the solution for the Laplace transformed concentration has exponential terms, we readily observed from numerical simulation the appearing of overflow for the positive argument of the exponential and underflow for the negative argument when M assumes values larger than 8. It is important to underline that the calculations were performed in a microcomputer PC with double precision (32 bits). Therefore, to avoid the overflow and underflow we restrict the values of M to values less than eight. With this assumption, we are confident to stress that we get results with good accuracy under statistical point of view. Regarding this comment, we may clearly observe that the curves for concentration in Fig. 1, especially for small time present a nonphysical oscillatory behavior for $M > 4$, we mean $M = 8$. Given a closer look to Figs. 1a and b, we promptly notice that nonstationary solution, as expected, converges to the stationary solution for $M = 2$ and 4. Therefore from now we adopt the value $M = 4$ in formula (11) in order to eliminate this drawback. We are aware

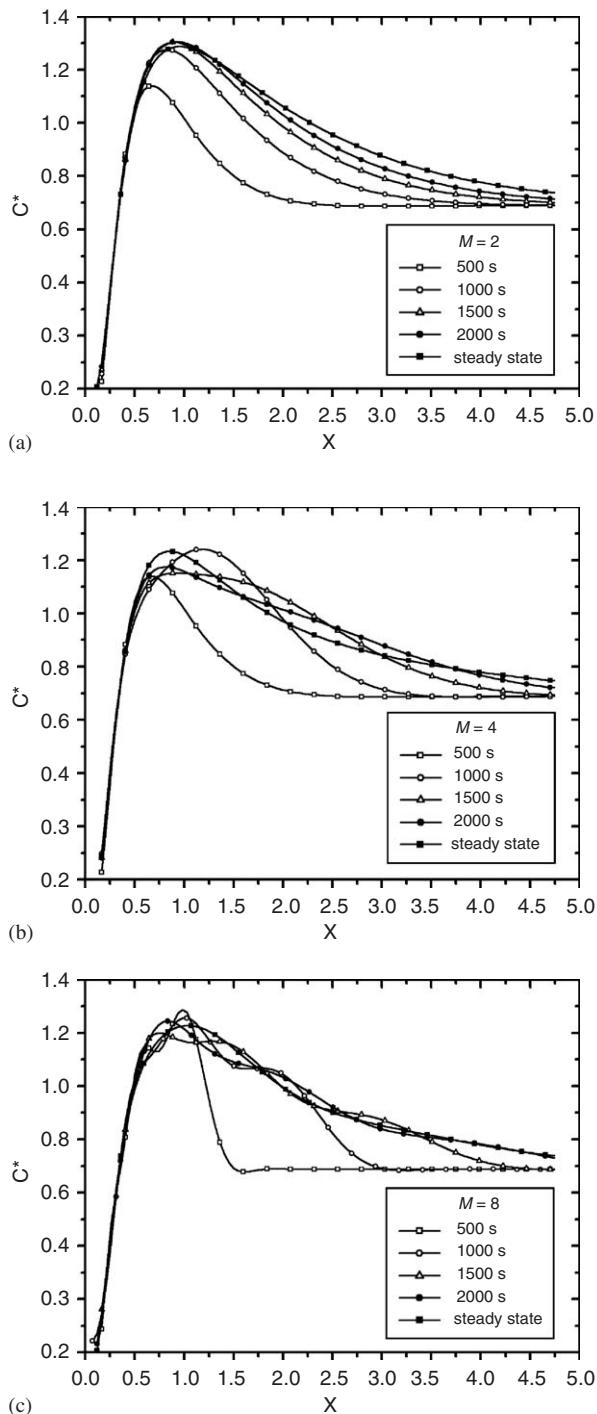


Fig. 1. Nondimensional crosswind integrated concentration as a function of nondimensional source distance for four different times and quadrature points: (a) $M = 2$; (b) $M = 4$; (c) $M = 8$ ($C^* = cUh/Q$; $H_s = 0.25h$; $X = xw_*/Uh$).

that in this work we disregard the task of controlling the round-off error, which certainly explain the reasonable numerical convergence of the results

achieved, when increasing M from 2 to 8. However, it is important to mention that the objective of this work is to show the aptness of the discussed method; we mean the GILTT and Laplace transform technique, to solve the 2D, time-dependent advection–diffusion equation. So far, we are confident to affirm, after reading the works of Valkó and Abate (2004) and Abate and Valkó (2004), that we can improve the accuracy of our results to reliable degree, applying the multi-precision Laplace transform inversion, expecting by this procedure proposed to mitigate the round-off error effect. This affirmative is bolstered by the authors' analysis regarding the performance of the numerical Laplace transform inversion technique.

To illustrate the asymmetry of the turbulent flow, in Fig. 2, we display numerical results, respectively, for the nondimensional concentration as a function of nondimensional source distance as well concentration isolines for different vertical wind speed ($W = -0.5, 0, 0.5$ and $H_s = 0.25h$). As expected, the plume descends and impinges on the surface for the negative value of the W wind speed, as a consequence of the prevalence of downdrafts. These characteristics agree qualitatively well with the laboratory results of Willis and Deardorff (1976, 1978, 1981). At this point, it is important to mention that somehow the updraft and downdraft plume behavior is consistent with the results plotted in these figures, despite the assumption that the W wind speed is constant.

In Fig. 3, we show the numerical convergence of the proposed solution for the concentration at $X = 2$ with the increasing the numbers of eigenvalues (N). From this figure, we promptly observe that with $N = 140$ we reach results with an accuracy of two significant digits. In Fig. 4, we show the observed and predicted scatter diagram of ground-level crosswind concentrations using the GILTT approach for $W = 0$. Regarding this issue, it is important to point out that the model reproduces very well the observed concentration.

In Table 4, we report statistical comparisons with other methods for the Copenhagen experiment: the ADMM model of Moreira et al. (2005b) was obtained by a Laplace transform technique with numerical inversion considering the PBL as a multilayer system where in each layer the eddy diffusivity and wind are constants. The another one, is the M4PUFF model (Tirabassi and Rizza, 1997) based on a general technique for solving the K -equation, using the truncated Gram–Charlier

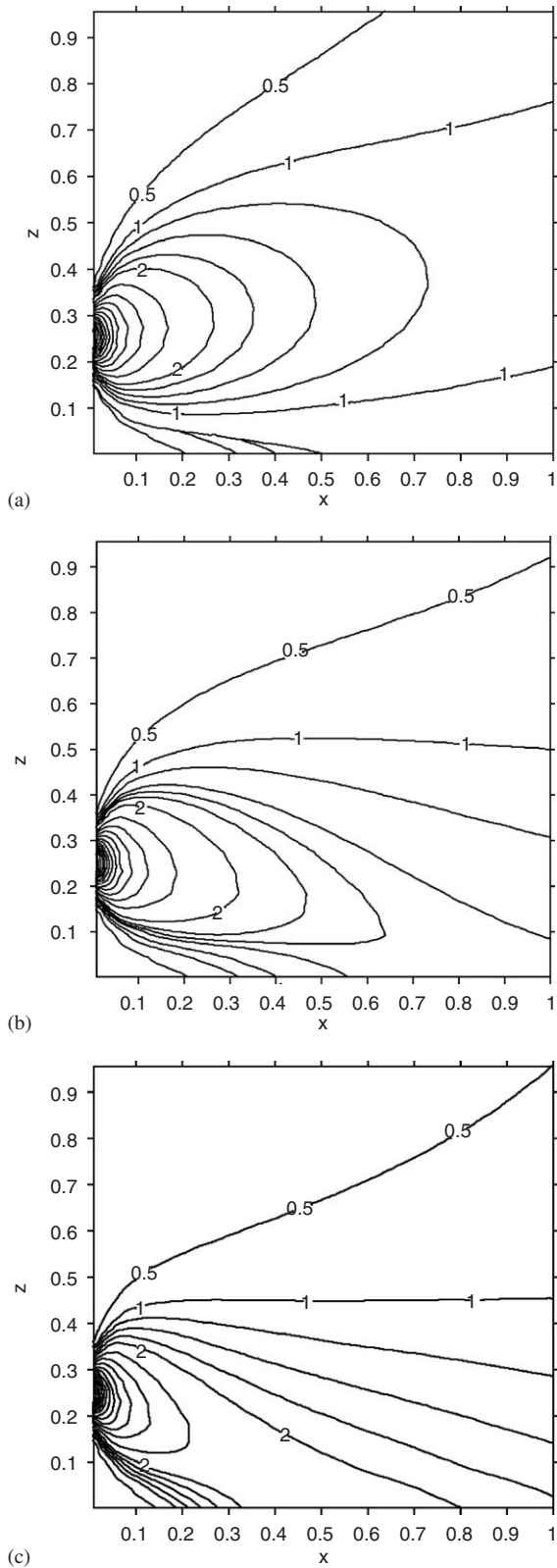


Fig. 2. Isolines of the concentration (cUh/Q ; $Z = z/h$; $X = xw_s/Uh$) predicted for different vertical wind speed ($W = -0.5, 0, 0.5$), $H_s = 0.25h$ and steady-state condition.

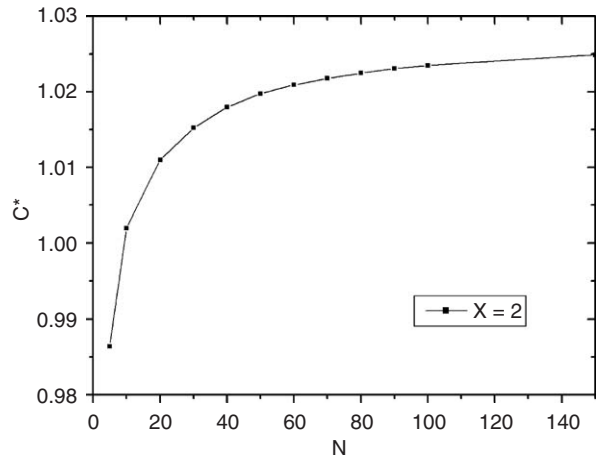


Fig. 3. Convergence of the new model for the steady-state case with nondimensional source distance $X = 2$ ($H_s = 0.25h$; $M = 4$).

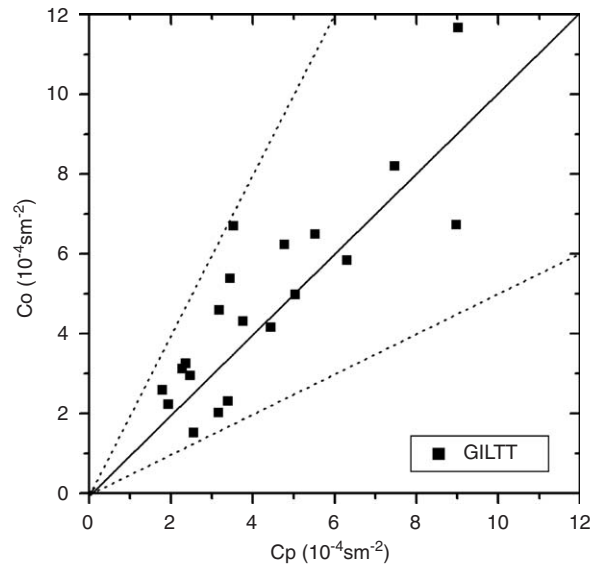


Fig. 4. Copenhagen experiment. Observed (C_o) and predicted (C_p) scatter plot of crosswind ground-level concentration. Data between dotted lines correspond to ratio $C_o/C_p \in [0.5, 2]$.

Table 4
Statistical evaluations of models results

Model	nmse	r	fa2	fb	fs
1	0.09	0.85	1.00	0.11	0.13
2	0.21	0.74	0.90	0.10	0.45
3	0.15	0.81	0.95	0.18	0.38

Model 1 is the GILTT method, 2 the puff model and 3 the ADMM model.

Table 5
External parameters for LES simulations

Mesh gridpoints height	Domain size (km)	Geostrophic wind (m s^{-1})	Surface heat flux ($\text{m s}^{-1} \text{K}$)	Initial inversion
(N_x, N_y, N_z) (64, 64, 64)	L_x, L_y, L_z (5, 5, 2)	(U_g, V_g) (10, 0)	Q_* 0.24	$(z_i)_0$ 1000

expansion (type A) of the concentration field and a finite set equations for the corresponding moments. Analyzing the statistical indices (Hanna, 1989) in Table 1 we notice that these models simulates satisfactorily the observed concentrations, regarding the normalized mean square error (nmse), fractional bias (fb) and fractional standard deviation (fs) values relatively near to zero and r (correlation coefficient) and factor of two (fa2) relatively near to 1. A more detailed inspection of the Table 4 permits to stress that the GILTT results presents the best values for nmse, r and fa2.

4.1. GILTT solution with the wind field simulated by large eddy simulation

Bearing in mind that in this work, our aim is to show the feasibility of the proposed model to simulate pollutant dispersion in atmosphere for more realistic problem, we are now in position to specialize the application of this methodology for a problem with the wind speeds evaluated by large eddy simulation (LES) with a grid of 64×64 . In order to apply the GILTT method with the discret data supplied by LES we perform a polynomial interpolation of the wind field ($U(x,z)$ and $W(x,z)$) in z variable and take the average in x variable. We simulate a dispersion experiment in a convective turbulent regime to test the GILTT-algorithm. According to the work of Nieuwstadt and de Valk (1987), we generating a quasi-stationary PBL turbulent field using the LES model. Then we incorporate the pollutant in the simulation domain and we study its evolution solving the corresponding diffusion equation. By this procedure, it is possible to study simultaneously the evolution of turbulence and concentrations fields.

It is well known that the turbulence within the PBL is generated by two main forcing mechanisms: mechanical and thermal. The former is related to wind shear, and is governed by geostrophic wind. The latter is directly related to the surface heat flux and in general is responsible for the convective transport of momentum, heat and any other scalar.

Table 6
Micrometeorological parameters from LES simulations

u_* (m s^{-1})	w_* (m s^{-1})	h/L	h (m)
0.65	2.1	-12	1100

Following the work of Moeng and Sullivan (1994), we generate a PBL which has buoyancy-dominant flow with negligible shear effects close to the ground.

We perform the calculations in a rectangular domain arranged in such way that accommodates several updrafts at a given time. The box dimension is $5 \times 5 \text{ km}^2$ in the horizontal directions and 2 km in the vertical direction. The resolution is 64 grid points in each of the three coordinates. Simulations started from a laminar flow, with the geostrophic wind constant throughout the whole numerical domain. In order to have a strong capping inversion above the simulated PBL, the initial mean virtual potential temperature profile is 300 K below the initial PBL height, $(z_i)_0$ which increases 8 K across six Δz levels with a lapse rate of 3 K km^{-1} above it. The external parameters, like domain, grid size, geostrophic wind, surface heat flux and the initial capping inversion height are displayed in Table 5.

We obtain the quasi-stationary condition running the LES model for 4000 time steps (more than 4 h of real simulated time). In Table 6, we show the corresponding micrometeorological parameters. This represents the initial time, we mean $t = 0$, for the dispersion experiment.

In Fig. 5, we present the crosswind integrated normalized concentration $C^* = cUh/Q$ in terms of the nondimensional variables: $X = xw_*/Uh$ and $Z = z/h$. Analyzing the combined GILTT and LES results appearing in Fig. 5, we readily realize a fairly good agreement regarding the curve behavior for the grid size and polynomial interpolation considered, between our results and the ones encountered by Lamb (Lamb, 1978; Willis and Deardorff, 1976, 1978, 1981).

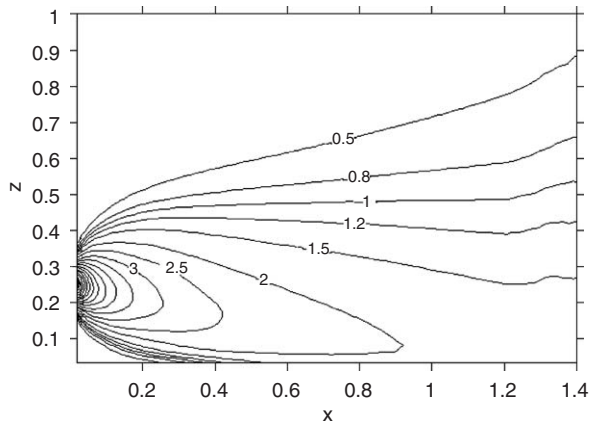


Fig. 5. Isolines of the concentration (cUh/Q ; $Z = z/h$; $X = xw_s/Uh$) predicted for source height $H_s = 0.25h$ with wind speeds from LES model.

5. Conclusions

We begin our final analysis of the proposed method, underlining that the reported solution is analytical, in the sense no approximation is made along the solution derivation except for the Laplace numerical inversion and round-off error. Furthermore, we have to notice that the results attained by the Gaussian quadrature scheme are exact when the transformed function is a polynomial of degree $(2M-1)$. In addition, it is well known that an analytical function can be approximated by polynomial, with the main feature: higher the degree of the polynomial, better the approximation. From this result it becomes possible to control the GILTT result accuracy by increasing the polynomial degree, we mean by increasing M . We are aware of the overflow and underflow effect appearing with the increasing M . We believe that we can eliminate this drawback using an extended arithmetic, we mean, by increasing the number significant digits (from 32 to 64, 128 and so on). To make clear the advantage of the GILTT method over numerical method, we need recall the Lax equivalence theorem (Kythe et al., 1997, p. 329), stating that the convergence of numerical schemes demand the fulfillment of the stability and consistency requirements. First all, the stability condition impose restriction to the numerical method regarding the issue of choosing the time and spatial variables step sizes and the integration is done by a step time marching procedure. Here appears the advantage of the GILTT approach. Due the analytical feature of the solution, the concentration can be evaluated at any time. As a

consequence, this method demands less computational effort. Finally, we must notice that the consistency can be shown not by numerical analysis, but by comparison with experimental data. Furthermore, we must emphasize the very good results attained, under statistical point of view, for the problem solved with wind field power law. On the other hand, the results obtained with the wind field calculated by the LES approach, are fairly good, taking the grid size and polynomial interpolation performed into account. Henceforth, we are confident to affirm that we reach our goal, because we show the aptness of the GILTT method, to solve more realistic problem. Moreover, the analytical feature and simplicity of the solution, reinforces our belief that the proposed method is a robust and promising method to simulate pollutant dispersion in atmosphere. In conclusion, we focus our future attention to the task of simulating pollutant dispersion in atmosphere by this methodology for the PBL growing condition, motivated by the lack of information and scarceness of work about this subject. Furthermore, we will continue pursuing the task of searching analytical solution. To this end, we focus our future attention to the issue of solving the 3D, time-dependent advection–diffusion equation, analytically, applying the GILTT method both in the z and x directions. By this procedure, we are certain to stress that we eliminate the drawback of the numerical inversion of the performed solution.

Acknowledgments

The authors thank CNPq and FAPERGS for the financial support of this work. We also thank Dr. Umberto Rizza for kind cooperation in the wind field simulation and the referees for helpful comments and suggestions.

References

- Abate, J., Valkó, P.P., 2004. Multi-precision Laplace transform inversion. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 60, 979–993.
- Cotta, R.M., 1993. *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*. CRC Press, Boca Raton, FL.
- Cotta, R., Mikhaylov, M., 1997. *Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation*. Wiley, Baffins Lane, Cinchester, England.
- Cotta, R.M., Unga, M.J., Mikhailov, M.D., 2003. Pollutant transport in finite fractured porous medium: integral transforms and lumped-differential formulations. *Annals of Nuclear Energy* 30, 261–285.

- Degrazia, G.A., Campos Velho, H.F., Carvalho, J.C., 1997. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. *Control and Atmospheric Physics*, 57–64.
- Gryning, S.E., Lyck, E., 1984. Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal of Climate Applied Meteorology* 23, 651–654.
- Gryning, S.E., Holtslag, A.M.M., Irwin, J., Sivertsen, B., 1987. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment* 21, 79–89.
- Hanna, S.R., 1989. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment* 23, 1385–1395.
- Irwin, J.S., 1979. A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. *Atmospheric Environment* 13, 191–194.
- Kythe, P.K., Puri, P., Schäferkotter, M.R., 1997. *Partial Differential Equations and Mathematics*. CRC Press, Boca Raton, FL.
- Lamb, R.G., 1978. A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in a convective planetary boundary layer. *Atmospheric Environment* 12, 1297–1304.
- Moeng, C.H., Sullivan, P.P., 1994. A comparison of shear and buoyancy driven planetary boundary layer flows. *Journal of Atmospheric Science* 51, 999–1022.
- Moreira, D.M., Vilhena, M.T., Tirabassi, T., Buske, D., Cotta, R., 2005a. Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method. *Atmospheric Environment* 39 (34), 6290–6295.
- Moreira, D.M., Rizza, U., Vilhena, M.T., Goulart, A., 2005b. Semi-analytical model for pollution dispersion in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment* 39 (14), 2689–2697.
- Nieuwstadt, F.T.M., de Valk, J.P.J.M.M., 1987. A large eddy simulation of buoyant and non-buoyant plume dispersion in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment* 21, 2573–2587.
- Panofsky, H.A., Dutton, J.A., 1988. *Atmospheric Turbulence*. Wiley, New York.
- Stroud, A.H., Secrest, D., 1966. *Gaussian Quadrature Formulas*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- Tirabassi, T., Rizza, U., 1997. Boundary layer parameterization for a non-Gaussian puff model. *Journal of Applied Meteorology* 36, 1031–1037.
- Valkó, P.P., Abate, J., 2004. Comparison of sequence accelerators for the Gaver method of numerical Laplace transform inversion. *Computers and Mathematics with Application* 48, 629–636.
- Willis, G.E., Deardorff, J.W., 1976. A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer. *Quarterly Journal of Royal Meteorology Society* 102, 427–445.
- Willis, G.E., Deardorff, J.W., 1978. A laboratory study of dispersion from an elevated source within a modelled convective planetary boundary layer. *Atmospheric Environment* 12, 1305–1311.
- Willis, G.E., Deardorff, J.W., 1981. A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convective mixed layer. *Atmospheric Environment* 15, 109–117.
- Wortmann, S., Vilhena, M.T., Moreira, D.M., Buske, D., 2005. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment* 39 (12), 2187–2194.

APÊNDICE IV

An analytical air pollution model for warm sources

Artigo publicado nos anais do 11th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering (ENCIT 2006) que se realizou na cidade de Curitiba no período de 05 a 08 de dezembro de 2006.

AN ANALYTICAL AIR POLLUTION MODEL FOR WARM SOURCES

Daniela Buske

Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - PROMEC
Sarmiento Leite, 425, 3º andar, CEP: 90046-900, Porto Alegre, RS, Brasil – Bolsista CNPq / CAPES
buske@mecanica.ufrgs.br

Marco Túlio de Vilhena

Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - PROMEC
Sarmiento Leite, 425, 3º andar, CEP: 90046-900, Porto Alegre, RS, Brasil
vilhena@mat.ufrgs.br

Davidson Martins Moreira

Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - PROMEC
Sarmiento Leite, 425, 3º andar, CEP: 90046-900, Porto Alegre, RS, Brasil
davidson@mecanica.ufrgs.br

Tiziano Tirabassi

Istituto ISAC of CNR, Bologna, Italy – Bolsista CAPES
t.tirabassi@isac.cnr.it

Abstract. *In this work we present the GILTT method for the solution of the transient two-dimensional advection-diffusion equation incorporating the plume rise effect (warm source) using the approach proposed by Briggs (1975). A correct estimation of buoyant plume rise is one of the basic requirements for the determination of ground-level concentrations of airborne pollutant emitted by industrial stacks. This improvement turns out a more operative model. To investigate the performances of the model with the plume rise effect, we report numerical simulations of the ground-level centerline concentrations compared with the observed concentrations measured during the Kinkaid experiment.*

Keywords: *GILTT, Analytical Solution, Advection-Diffusion equation, Atmospheric Dispersion, Warm Sources.*

1. Introduction

Eulerian approach for modelling the statistical properties of the concentrations of contaminants in a turbulent flow as the Planetary Boundary Layer (PBL) is widely used in the field of air pollution studies. Despite well known limits, the K-closure is largely used in several atmospheric conditions because it describes the diffusive transport in an Eulerian framework where almost all measurements are Eulerian in character, it produces results that agree with experimental data as well as any more complex model, and it is not computationally expensive as higher order closures are.

The advection-diffusion equation has been widely applied in operational atmospheric dispersion models to predict ground-level concentrations due to low and tall stacks emissions. Analytical solutions of equations are of fundamental importance in understanding and describing physical phenomena, since they are able to take into account all the parameters of a problem, and investigate their influence.

In the last years (Tirabassi, 2003) special attention has been devoted to the task of searching analytical solutions for the advection-diffusion equation. Recently, the Generalized Integral Laplace Transform Technique (GILTT method) has been applied for the simulation of pollutant dispersion in the atmosphere by solving analytically the two-dimensional diffusion-advection equation assuming non-homogeneous conditions. (Moreira et al., 2006). We applied the above approach in this paper. The main steps of this method comprehend: reduction of the time-dependent problem to a stationary by the applications of the Laplace transform technique, construction of an auxiliary Sturm-Liouville problem associated to the stationary problem, expansion of the contaminant concentration in a series in terms of the obtained eigenfunctions, replacement of this expansion in the original problem. Finally, taking moment, we come out with a set of ordinary differential equations which are then solved analytically by the Laplace transform technique. The time-dependent concentration is obtained by inverting numerically the solution of the stationary problem by the Gaussian quadrature scheme.

In this work we step forward incorporating the plume rise effect (warm source) in the model using the approach proposed by Briggs (1975). A correct estimation of buoyant plume rise is one of the basic requirements for the determination of ground-level concentrations of airborne pollutant emitted by actual industrial stacks. This improvement turns out a more operative model. To investigate the influence of the plume rise effect, we report numerical simulations of the ground-

level crosswind integrated centerline concentrations compared with the observed concentrations measured during the Kinkaid experiment (Hanna and Paine, 1989).

To reach this goal, we outline the paper as follows: in section 2, we report the derivation of the GILTT solution for the transient two-dimensional advection-diffusion equation. In section 3 the turbulent parameterisations assumed in this work are presented. In section 4, the plume rise approach is presented. The numerical results attained by the analytical method are reported as well the comparison with experimental data are presented in section 5, and finally in section 6, the conclusions.

2. The GILTT method

Let us consider the crosswind integrated time dependent advection-diffusion equation with advection in the x direction (as usual, the along-wind diffusion is neglected because considered little in respect to the advection):

$$\frac{\partial c(x,z,t)}{\partial t} + U \frac{\partial c(x,z,t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x,z,t)}{\partial z} \right), \quad (1)$$

where c denotes the crosswind integrated concentration, K_z is the vertical eddy diffusivity and U is the component longitudinal of the wind speed. Equation (1) is subjected to the boundary conditions of zero flux at the ground and PBL top, and a source with emission rate Q at height H_s :

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

$$Uc(0,z,t) = Q \delta(z - H_s) \quad \text{at } x = 0 \quad (1b)$$

and also assume that at the beginning of the pollutant releasing the dispersion region is not polluted, we mean:

$$c(x,z,0) = 0 \quad \text{at } t = 0, \quad (1c)$$

where h is the PBL height. In the sequel we consider that K_z , the wind speed U depend only on the variable z .

Using the Laplace Transform technique, transforming t into s and c into C , we have:

$$U \frac{\partial C(x,z,s)}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 C(x,z,s)}{\partial z^2} + K_z' \frac{\partial C(x,z,s)}{\partial z} - sC(x,z,s). \quad (2)$$

Now we are in position to solve the stationary problem (2) by the GILTT approach. Firstly, we expand the pollutant concentration in the series:

$$C(x,z,r) = \sum_{i=0}^N \bar{c}_i(x,r) \zeta_i(z), \quad (3)$$

where $\zeta_i(z)$ and λ_i are the respective eigenfunctions ($\zeta_i(z) = \cos(\lambda_i z)$) and eigenvalues ($\lambda_i = \frac{i\pi}{h}$ for $i = 0, 1, 2, 3, \dots$) of

a associated Sturm-Liouville problem. Following the procedure adopted in Wortmann et al. (2005) and Moreira et al. (2005), we replace the above ansatz in Eq. (2) and by taking moments we get:

$$\sum_{i=0}^N \left[\bar{c}_i'(x,r) \int_0^h U \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz + \lambda_i^2 \bar{c}_i(x,r) \int_0^h K_z \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz - \bar{c}_i(x,r) \int_0^h K_z' \zeta_i'(z) \zeta_j(z) dz + r \bar{c}_i(x,r) \int_0^h \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz \right] = 0. \quad (4)$$

Rewriting Eq. (4) in matrix fashion, we obtain:

$$Y'(x,r) + FY(x,r) = 0, \quad (5)$$

where $Y(x, r)$ is the column vector whose components are $\bar{c}_i(x, r)$ and the matrix F is defined like $F = B^{-1}E$. The matrices B and E are respectively given by:

$$b_{i,j} = \int_0^h U \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz \quad (6a)$$

and

$$e_{i,j} = -\int_0^h K'_z \zeta'_i(z) \zeta_j(z) dz + \lambda_i^2 \int_0^h K_z \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz + r \int_0^h \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz \quad (6b)$$

The transformed problem represented by the Eq. (5) is solved by the Laplace Transform technique and diagonalization and his solution is (Wortmann et al., 2005; Moreira et al., 2005):

$$Y(x, r) = X.G(x, r).\xi \quad (7)$$

where ξ is the integration constant vector, G is the diagonal matrix with elements have the form $e^{-d_i x}$, X is the eigenfunction matrix and d_i are the eigenvalues of the matrix F . Therefore, the transformed solution given by Eq. (3) is well determined.

Finally, the time dependent concentration is obtained by inverting numerically the transformed concentration $C(x, z, r)$ by a Gaussian Quadrature scheme:

$$c(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \sum_{i=0}^N \bar{c}_i(x, \frac{P_k}{t}) \zeta_i(z) \quad (8)$$

where A_k and P_k are the weights and roots of the Gaussian quadrature integration scheme and are tabulated in the book by Stroud and Secrest (1966).

It is important to recall that the solution of problem (1) given by equation (8), is analytical, in the sense that no approximation is made along its derivation, except for the Laplace numerical inversion and round-off error. Regarding the issue of Laplace numerical inversion, it is important to mention, that this approach is exact if the transformed function is a polynomial of degree $2M-1$ in the $1/s$ variable. Furthermore, we must point out that we specialize this application, without loss of generality for an eddy diffusivity coefficient depending only on the z variable.

3. Turbulent Parameterizations

In the atmospheric diffusion problems the choice of a turbulent parameterization represents a fundamental decision for the pollutants dispersion modeling. From a physical point of view the turbulence parameterization is an approximation to the nature in the sense that we are putting in mathematical models an approximated relation that in principle can be used as a surrogate for the natural true unknown term. The reliability of each model strongly depends on the way as turbulent parameters are calculated and related to the current understanding of the PBL (Mangia *et al.*, 2002).

The lateral dispersion parameter σ_y is important to calculate the concentration in the ground-level centerline concentration:

$$C(x, 0, 0) = \frac{c(x, 0)}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \quad (9)$$

where in this study the ground-level cross-wind integrated concentration in the Eq. (9) is calculated employing the GILTT model (Eq. (8)).

The lateral dispersion parameter σ_y for a CBL derived by Degrazia et al. (1998) presents the following form:

$$\frac{\sigma_y^2}{z_i^2} = \frac{0.21}{\pi} \int_0^\infty \sin^2(2.26\psi^{1/3} Xn') \frac{dn'}{(1+n')^{5/3} n'^2} \quad (10)$$

where X is a nondimensional distance ($X = xw_*/Uz_i$), w_* is the convective velocity scale and z_i is the top of the PBL.

The Eq. (10) contain the unknown function ψ , the molecular dissipation of turbulent velocity is a leading destruction terms in equations for the budget of second-order moments, and according Højstrup (1982), has the form:

$$\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \left(\frac{z}{-L} \right)^{-2/3} + 0.75 \right]^{1/2}, \quad (11)$$

where L is the length of Monin-Obukhov.

In terms of the convective scaling parameters the vertical eddy diffusivity can be formulated as (Degrazia *et al.*, 1997):

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right]. \quad (12)$$

The wind speed profile used has been parameterized following the similarity theory of Monin-Obukhov and “OML” model (Berkowicz *et al.*, 1986):

$$U = \frac{u_*}{k} \left[\ln(z/z_0) - \Psi_m(z/L) + \Psi_m(z_0/L) \right], \quad \text{if } z \leq z_b, \quad (13)$$

$$U = U(z_b), \quad \text{if } z > z_b, \quad (14)$$

where $z_b = \min[L, 0.1z_i]$, and Ψ_m is a stability function given by (Paulson, 1970).

Thus, in this study we introduce the vertical eddy diffusivity (Eq. (12)) and wind profile (Eq. (13) and (14)) in the GILTT model (Eq. (8)) to calculate the ground-level crosswind integrated concentration. Finally, these crosswind integrated concentration and the lateral dispersion parameter (Eq. (10)) will be introduced into Eq. (9) to simulate the ground-level centerline concentrations of buoyant emissions released from an elevated continuous source point in an unstable PBL.

4. Plume rise

A correct estimation of buoyant plume rise is one of the basic requirements for the determination of ground level concentrations of airborne pollutant emitted by industrial stacks. In fact, maximum ground level concentration is roughly inversely proportional to the square of the final height h_e . For this reason, in many simple dispersion models, stack gases are assumed to be emitted from a virtual source located at height h_e along the vertical above the stack. The effective plume height h_e (elevation of plume centerline relative to ground level) results from the sum of stack height H_s and plume rise Δh :

$$h_e = H_s + \Delta h. \quad (15)$$

Some formula provide the plume rise as a function of the distance, but most of them provide a constant value (final plume rise) that the plume reaches at a large downwind distance. These formula contain height depending atmospheric variables normally specified at the stack outlet height.

Several studies and review works have provided semiempirical formula for evaluating Δh (e.g., Briggs, 1975; Stern, 1976; Hanna *et al.*, 1982; and many others). Others researchers have provided more complex and comprehensive descriptions of several physical interactions between the plume and the ambient air (e.g., Golay, 1982; Netterville, 1990). Relevant and exhaustive review papers on the plume rise subject can be found in the literature, for instance, Briggs (1975) and Weil (1988). In this work, we are utilizing the formula of Briggs (1975) applied by Moreira (2000).

Briggs (1975) made a distinction between neutral and unstable conditions accounting for the effects of ambient turbulence on the plume rise. While self-generated turbulence affects the entrainment process near the source, ambient turbulence (with both small and large scale eddies) becomes important further downwind. Small scale eddies, are responsible for the increase of the plume growth rate beyond that given by self-induced turbulence. The breakup model (Briggs, 1975; Weil, 1988) assumes that plume rise finishes when ambient turbulence “breaks up” the self-generated structure of the plume, causing a vigorous mixing, and, consequently, gradually loses buoyancy and momentum and eventually level off. Thus, this process leads to an asymptotic rise. According to Briggs, the plume breakup occurs when the ambient rate of dissipation of turbulent kinetic energy, ϵ_a , exceeds the one of the plume ϵ . Large scale eddies

(updrafts and downdrafts in the convective boundary layer (CBL)) may transport plume segments up and down, thereby dispersing the plume by vertical meandering and pushing some of them to the surface. When this happens, the time averaged ground level concentration is more dependent on how many times, during the averaging period, the plume touches the ground than on the height of the asymptotic rise. As a consequence, in the CBL case, the leading parameter is assumed to be the surface sensible heat flux, which plays the major role in the development of updrafts and downdrafts.

In strong convection ($z_i/L > 10$) the model “breaks up” has a final behavior given for:

$$\Delta h = 4.3 \left(\frac{F}{Uw_*^2} \right)^{3/5} z_i^{2/5}, \quad (16)$$

where the rate of ambient dissipation is assumed to be $0.1 \frac{w_*^3}{z_i}$. The buoyancy parameter F is given for:

$$F = gV_i r_i^2 \frac{(T_i - T_a)}{T_i}, \quad (17)$$

where V_i and T_i are the vertical velocity and temperature, respectively, in the exit of the chimney, T_a is the ambient temperature, g the acceleration of the gravity and r_i is the radius of the source. The model defines a “touchdown” for moderate convective conditions predicts the behavior of the plume for:

$$\Delta h = 1.0 \left(\frac{F}{Uw_d^2} \right) \left(1 + \frac{2H_s}{\Delta h} \right)^2, \quad (18)$$

where w_d is the medium speed of the downdrafts, considered as $w_d = 0.4w_*$. The resulting equation is iteratively solved for Δh . In neutral stability, the “breaks up” model predicts the following behavior:

$$\Delta h = 1.3 \frac{F}{Uu_*^2} \left(1 + \frac{H_s}{\Delta h} \right)^{2/3}. \quad (19)$$

In this work, the penetration of the plume is not considered due to the boundary conditions of the K-model. Then, if the plume is completely prey, Weil (1979) suggests that the restriction geometric limit for Δh is:

$$\Delta h = 0.62(z_i - H_s). \quad (20)$$

In certain cases, Briggs (1975) recommends to use the formulae that provides the minimum plume rise; this result is “the most conservative”, since it gives rise to the maximum values of concentration expected at the ground, thus limiting the risk of a possible underestimation. Then, the formulas can be summarized as it proceeds:

$$\Delta h = \min(\text{Eqs. 16, 18, 19, 20}). \quad (21)$$

5. Experimental data and Results

The performance of the GILTT model has been evaluated against experimental ground level concentration using experimental data from dispersion experiments carried out in Kinkaid, Illinois, USA. The Kincaid field campaign (Bowne and Londergan, 1981) concerns an elevated release in a flat farmland with some lakes. During the experiment, SF₆ was released from 187 tall stacks and recorded on a network consisting of roughly 200 samplers positioned in arcs from 0.5 to 50 km downwind of the source. The data set includes the meteorological parameters as friction velocity, Obukhov-Monin length and height of boundary layer. The measured concentration levels is frequently irregular, with high and low concentrations occurring intermittently along same arc, moreover there are frequent gaps in the monitoring arcs. For the above reasons a variable has been assigned as a quality factor in order to indicate the degree of readability of data (Olesen, 1995). The quality indicator (from 0 to 3) has been assigned. Here, only the data with quality factor 3 were considered. A complete description of the experiment is found in the work of Hanna and Paine (1989) relatively only convective condition (for $z_i/L > 10$). The meteorological parameters were derived using

preprocessing methods. Observed mixing heights were determined by interpretation of radiosonde data. The distributed dataset contains hourly mean values of concentrations and meteorological data. The time dependence in the model was evaluated with hourly average concentration (time resolution of 10 min) in the sampling period.

Figure 1 shows the observed and predicted scatter diagram of ground-level centerline concentrations using the GILTT model for the Kinkaid experiment. In this respect, it is important to note that the GILTT model reproduce fairly well the observed concentration.

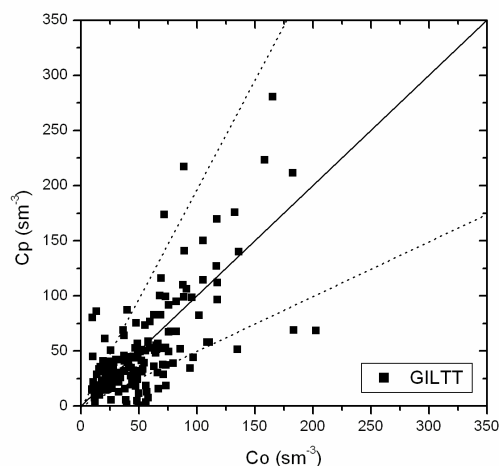


Figure 1. Observed (C_o) and predicted (C_p) crosswind ground-level integrated concentration scatter diagram for the GILTT model. Dotted lines indicate a factor of two.

The datasets were applied subsequently to the following statistical indices (Hanna, 1989):

$$\text{NMSE (normalized mean square error)} = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p},$$

$$\text{FA2 = fraction of data (\%)} \text{ for } 0.5 \leq (C_p / C_o) \leq 2$$

$$\text{R (correlation coefficient)} = \overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})} / \sigma_o \sigma_p,$$

$$\text{FB (fractional bias)} = \overline{C_o} - \overline{C_p} / 0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p}),$$

$$\text{FS (fractional standard deviations)} = (\sigma_o - \sigma_p) / 0.5(\sigma_o + \sigma_p)$$

where subscripts o and p refer to observed and predicted quantities, respectively, σ the standard deviation and an overbar indicates an average.

The results of the statistical indices for the GILTT model are compared with those obtained from a Gaussian model (Moreira et al., 2004) and are shown in Tab. 1. The statistical indices point out that a good agreement is obtained between the Gaussian and GILTT model, although the statistical indices indicate that the GILTT reproduces more adequately the observed ground-level centerline concentrations (in particular fit the Kinkaid data set, where data are more numerous and difficult to be model by dispersion models).

Table 1. Results of statistical indices used to evaluate the model performance.

Model	NMSE	R	FA2	FB	FS
GILTT	0.40	0.69	0.75	0.05	-0.22
Gaussian	0.54	0.61	0.74	0.33	0.20

6. Conclusion

In this work we present numerical simulations of pollutants diffusion released from a buoyant source, by the GILTT model. In the model we consider the dispersion parameters and eddy diffusivities described in terms of the energy-containing eddies.

The statistical analysis of the results shows a good agreement between the results of the proposed approach with the experimental data of the Kinkaid experiment and the Gaussian results. We promptly realize also that the GILTT might yield better results than Gaussian (that shows good results either) approach. Bearing in mind that in Gaussian model the turbulence is assumed homogeneous and constant dispersion parameters, we are confident that

this fact explains the better performance of the GILTT model. Indeed, in the GILTT approach we consider the parameterization derived by Degrazia et al. (1997, 1998) for nonhomogeneous turbulence having a dependence on the vertical distance z . Now, we would like to stress that from above discussion, the GILTT model is a robust method, under computational point of view, to simulate the pollutant dispersion in the PBL. This argument is reinforced by the comparable computation effort between the GILTT and Gaussian solutions besides their analytical features. Finally, we will focus our future attention in the solution of the GILTT incorporating simple chemical pollutant reactions as source term, in order to make this solution an operational model to air quality simulation.

7. Acknowledgement

The authors thank to CNPq and CAPES for the partial financial support of this work.

8. References

- Berkowicz, R.R., Olesen, H.R. and Torp U., 1986, "The Danish Gaussian air pollution model (OML). Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications", Air Pollution modeling and its application. Edited by C. De Wispelaere, F.A. Schiermeier and N.V. Gillani, Plenum Publishing Corporation, pp. 453-480.
- Briggs, G.A., 1975, "Plume Rise Predictions, Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses", D.A. Haugen ed., Amer. Meteor. Soc., Boston, MA, pp. 59-111.
- 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. Atmos. Phys.*, pp. 57-64.
- Degrazia, G.A., Mangia, C. and Rizza U., 1998, "A comparison between different methods to estimate the lateral dispersion parameter under convective conditions", *J. Appl. Meteor.*, Vol. 37, pp. 227-231.
- Golay, M.W., 1982, "Numerical modeling of buoyant plumes in a turbulent stratified atmosphere", *Atmos. Environ.*, Vol. 16, pp. 2373-2381.
- Hanna, S.R., Briggs, G.A. and Jr. Hosker, R.P., 1982, "Handbook on atmospheric diffusion", Prepared for the Office of Health and Environmental Research, Office of Energy Research, U.S. Department of Energy, DOE/TIC 11223, J.S. Smith, Publication Editor.
- Hanna, S.R., 1989, "Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods", *Atmos. Environ.*, Vol. 23, pp. 1385-1395.
- Hanna, S.R. and R.J. Paine, 1989. "Híbrido Plume Dispersion Model (HPDM) development and evaluation", *J. Appl. Meteorology*, Vol. 28, pp. 206-224.
- Højstrup, J., 1982, "Velocity spectra in the unstable boundary layer", *J. Atmos. Sci.*, Vol. 39, pp. 2239-2248.
- Mangia, C., Moreira, D.M., Schipa, I., Degrazia, G.A., Tirabassi, T. and Rizza, U., 2002, "Evaluation of a new eddy diffusivity parameterization from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions", *Atmos. Environ.*, Vol. 36, pp. 67-76.
- Moreira, D.M., 2000, "Modelo Euleriano semi-analítico de difusão turbulenta de contaminantes", Ph.D. thesis. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil, 88 pp. In Portuguese.
- Moreira, D.M., Santos, D.P., Carvalho, J.C., Vilhena, M.T., Degrazia, G.A. and Tirabassi, T., 2004, "A solution of the steady K-diffusion equation for ABL dispersion in inhomogeneous turbulence with plume rise", *Revista Brasileira de Meteorologia*, Vol. 19, No. 2, pp. 113-122.
- Moreira, D.M., Vilhena, M.T., Tirabassi, T., Buske, D. and Cotta, R., 2005, "Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method", *Atmos. Environ.*, Vol. 39, No. 34, pp. 6290-6295.
- Moreira, D.M., Vilhena, M.T., Buske, D. And Tirabassi, T., 2006, "The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL", *Atmos. Environ.*, Vol. 40, pp. 3186-3194.
- Netterville, D.D.J., 1990, "Plume rise, entrainment and dispersion in turbulent winds", *Atmos. Environ.*, Vol. 24, pp. 1061-1081.
- Paulson, C.A., 1970, "The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in unstable atmospheric surface layer", *J. Appl. Meteor.*, Vol. 9, pp.857-861.
- Stern, A.C., 1976, "Air pollution" , Vol. I. 3rd Edition. Academic Press, New York, USA.
- Stroud, A.H. and Secrest, D., 1966, "Gaussian Quadrature Formulas", Englewood Cliffs, N.J., Prentice Hall, Inc.
- Weil, J.C., 1979, "Assessment of plume rise and dispersion models using LIDAR data, PPSP-MP-24", Prepared by Environmental Center, Martin Marietta Corporation, for Maryland Department of Natural Resources.
- Weil, J.C., 1988. "Plume Rise", In: *Lectures on Air Pollution Modeling*. A. Venkatram and J.C. Wyngaard, Eds. Amer. Meteor. Soc., Boston, pp. 119-166.
- Wortmann, S., Vilhena, M.T., Moreira, D.M. and Buske, D., 2005, "A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL", *Atmos. Environ.*, Vol. 39, No. 12, pp. 2187-2194.
- Olesen H.R., 1995, "Datasets and protocol for model validation", *Int. J. Environment and Pollution*, Vol. 5, pp.693-701.
- Bowne N.E. and Londergan R.J., 1989, "Overview, result and conclusions for the EPRI plume model validation and development project: plane site", EPRI report EA-3074

6. Copyright Notice

The authors are the only responsible for the printed material included in his paper.

APÊNDICE V

An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure

Artigo publicado na revista *Environmental Fluid Mechanics*, volume 7, páginas 43-54, no ano de 2007.

An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure

D. Buske · M. T. Vilhena · D. M. Moreira ·
T. Tirabassi

Received: 27 June 2006 / Accepted: 7 November 2006 /
Published online: 9 December 2006
© Springer Science+Business Media B.V. 2006

Abstract Atmospheric air pollution turbulent fluxes can be assumed to be proportional to the mean concentration gradient. This assumption, along with the equation of continuity, leads to the advection-diffusion equation. Moreover, large eddies are able to mix scalar quantities in a manner that is counter to the local gradient. We present a general solution of a two-dimension steady state advection-diffusion equation, considering non-local turbulence closure using the General Integral Laplace Transform Technique. We show some examples of applications of the new solution with different vertical diffusion parameterisations.

Keywords Air pollution · Advection-diffusion equation · Analytical solution · Countergradient · Non-local · Turbulence closure

1 Introduction

Eulerian approach for modelling the statistical properties of the concentrations of contaminants in a turbulent flow as the Planetary Boundary Layer (PBL) is widely used in the field of air pollution studies. Within this frame, the diffusion equation that describes the crosswind-integrated steady-state concentrations arising from a continuous point source can be written as:

$$u(z) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = - \frac{\partial w'c'}{\partial z} + S, \quad (1)$$

D. Buske · M. T. Vilhena · D. M. Moreira
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - PROMEC, Porto Alegre, RS, Brazil

T. Tirabassi
Institute of mathematics, PPGMAP/UFRGS, Porto Alegre, RS, Brazil

Present Address:
T. Tirabassi (✉)
ISAC-CNR, Via Gobetti, 101, 40129 Bologna, Italy
e-mail: t.tirabassi@isac.cnr.it

where \bar{c} is the crosswind-integrated concentration, u is mean horizontal wind speed, $\overline{w'c'}$ is vertical turbulent contaminant flux, and S is the sink/source term, while molecular diffusion has been neglected. Moreover, the along-wind diffusion was neglected because considered little in respect to the advection. One of the most widely used closures for Eq. 1 is based on the gradient transport hypothesis which, in analogy to molecular diffusion, assumes that turbulence causes a net movement of material down the gradient of material concentration at a rate which is proportional to the magnitude of the gradient [31]:

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (2)$$

where K_z is the vertical eddy diffusivity which must be evaluated using empirical data.

The simplicity of the K -theory of turbulent diffusion has led to the widespread use of this theory as mathematical basis for simulating pollutant dispersion (open country, urban, photochemical pollution, etc.). But K -closure has its own limits. In contrast to molecular diffusion, turbulent diffusion is scale-dependent. This means that the rate of diffusion of a cloud of material generally depends on the cloud dimensions and the intensity of turbulence. As the cloud grows, larger eddies are incorporated in the expansion process, so that a progressively larger fraction of turbulent kinetic energy is available for the cloud expansion.

Another problem is that the down-gradient transport hypothesis is inconsistent with observed features of turbulent diffusion in the upper portion of the mixed layer, at convective cases where countergradient material fluxes are known to occur [10]. Because countergradient fluxes are thought to be indicative of boundary layer scale eddies, as opposed to small scale ones, such fluxes are often called non-local fluxes. Local K -theory is a method for parameterizing the effects of turbulent mixing based on how small eddies will mix quantities along a local gradient of the transported quantity.

Already some decades ago it was noted that in the upper part of convectively driven boundary layers, the flux of potential temperature is counter to the gradient of the mean potential temperature profile [8, 13, 29]. The mean potential temperature gradient and the flux change sign at different levels introducing a certain region in the convective boundary layer where they have the same sign. This was in contrast with the common view in first order turbulent closure that turbulent diffusion is down gradient. In order to describe diffusion also in these regions, Ertel [13] and Deardoff [8, 9] proposed to modify the usual applied flux-gradient relationship in K -theory approach according to:

$$\overline{w'c'} = -K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right), \quad (3)$$

where γ represents the countergradient term.

In the last years, special attention has been devoted to the task of searching analytical solutions for the advection-diffusion equation in order to simulate the pollutant dispersion in the PBL. Presently, analytical solutions of the advection-diffusion equation are usually obtained mostly for stationary conditions and by making strong assumptions about the eddy diffusivity coefficients and wind speed profiles. Recently a steady state solution was presented for general profile of wind and eddy diffusivities [25, 33].

Here we present a general solution of two-dimensional steady state advection-diffusion Eq. 1, considering non-local turbulence closure using the General Integral Transform Technique (GITT), a well-known hybrid method that had solved a wide class of direct and inverse problems mainly in the area of Heat Transfer and Fluid Mechanics is used [1,3–6,21,24,27]. The main steps of this method include the construction of the auxiliary Sturm–Liouville problem associated to the original problem, the determination of the integral transform technique in a series, using as basis the eigenfunction of the solved Sturm–Liouville problem, the replacement of this expansion in the original problem and taking moments. This procedure leads to a set of ordinary differential equation, which is classically solved by numerical methods. By contrast, the present authors analytically solved the GITT transformed problem employing the Laplace Transform technique without any approximation along its derivation. This method has been coined as GILTT approach.

2 The GILTT method and the non-local closure

Many schemes and parameterizations for countergradient term have been developed [7,14,17–19,30,34–36]. In this paper we use the parameterization proposed by van Dop and Verver [32].

Applying the above parameterization to Eq. 2 we obtain:

$$\left(1 + \left(\frac{S_k \sigma_w T_l}{2}\right) \frac{\partial}{\partial z}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \tag{4}$$

where σ_w is the vertical turbulent velocity standard deviation and T_l is the Lagrangian time scale and S_k is the Skewness of the vertical turbulent velocity (w'), that is $S_k = \overline{w'^3} / (\overline{w'^2})^{3/2}$. The second term in the left hand side of Eq. 4 represents the non-local countergradient term.

In this work, Eq. 4 is substituted in Eq. 1, leading to:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right), \tag{5}$$

where $\beta = 0.5 S_k \sigma_w T_l u$, for $0 < z < z_{TOP}$ and $x > 0$, subject to the usual boundary conditions at the ground and at the PBL top and a continuous source is assumed with rate of constant emission Q at the source height H_s :

$$\bar{c}(0, z) = \frac{Q}{u} \delta(z - H_s) \quad \text{at } x = 0, \tag{6}$$

where δ is the Dirac delta function and z_{TOP} is the unstable PBL height.

The solution of the advection-diffusion equation for the case when $S_k = 0$ (or $\beta = 0$) was obtained in the works of Wortmann et al. [33] and Moreira et al. [23]. It is observed that the second term on the right hand side of Eq. 5 is a diffusive term, where β has an eddy diffusivity (m^2/s) dimension.

To solve problem 5 by the GILTT method we recast Eq. 5 as:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + K'_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \beta \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z \partial x} - \beta' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}, \tag{7}$$

where “ ‘ ” is the symbol of derivative in z .

Following the works of Wortmann et al. [33] and Moreira et al. [23], we pose that the solution of problem 7 has the form:

$$c(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}, \tag{8}$$

where $\Psi_i(z)$ are the eigenfunctions ($\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$) and λ_i the eigenvalues ($\lambda_i = \frac{i\pi}{z_{TOP}}$ for $i = 0, 1, 2, 3, \dots$), obtained from the solution of the Sturm–Liouville problem given by:

$$\Psi'_i(z) + \lambda_i^2 \Psi_i(z) = 0 \quad \text{at } 0 < z < z_{TOP} \tag{9}$$

$$\Psi'_i(z) = 0 \quad \text{at } z = 0, z_{TOP} \tag{10}$$

Substituting Eq. 8 into Eq. 9 we obtain:

$$\begin{aligned} u \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}} &= K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\Psi'_i(z)}{N_i^{1/2}} + K'_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\Psi'_i(z)}{N_i^{1/2}} \\ &- \beta \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}} - \beta' \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}, \end{aligned} \tag{11}$$

where ' and '' are used to indicate derivatives of first and second order, respectively.

Taking moments in Eq. 11 we promptly have that:

$$\begin{aligned} - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \int_0^{z_{TOP}} u\Psi_i\Psi_j dz &- \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\lambda_i^2}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \int_0^{z_{TOP}} K_z\Psi_i\Psi_j dz \\ + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \int_0^{z_{TOP}} K'_z\Psi'_i\Psi_j dz &- \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \int_0^{z_{TOP}} \beta\Psi'_i\Psi_j dz \\ - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \int_0^{z_{TOP}} \beta'\Psi_i\Psi_j dz &= 0. \end{aligned} \tag{12}$$

Rewriting Eq. 12 in matrix fashion, we obtain:

$$Y'(x) + FY(x) = 0. \tag{13}$$

where $Y(x)$ is the column vector whose components are $\bar{c}_i(x)$ and the matrix F is defined like $F = B^{-1}E$.

The entries of matrices B and E are, respectively, given by:

$$b_{i,j} = \frac{1}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \left[\int_0^{z_{TOP}} u\Psi_i\Psi_j dz + \int_0^{z_{TOP}} \beta\Psi'_i\Psi_j dz + \int_0^{z_{TOP}} \beta'\Psi_i\Psi_j dz \right] \tag{14}$$

and

$$e_{i,j} = \frac{1}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \left[\int_0^{z_{TOP}} K'_z\Psi'_i\Psi_j dz - \lambda_i^2 \int_0^{z_{TOP}} K_z\Psi_i\Psi_j dz \right]. \tag{15}$$

For the boundary condition of Eq. 5, using the same arguments, we have that:

$$\int_0^{z_{TOP}} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(0)u\Psi_i\Psi_j}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz = \int_0^{z_{TOP}} \frac{Q\delta(z - H_s)\Psi_j}{N_j^{1/2}} dz. \tag{16}$$

Using the generalized delta function integration property, we get the following transformed boundary condition:

$$c_i(0) = \frac{Q\Psi_j(H_s)}{N_j^{1/2}} A^{-1}, \tag{17a}$$

where A is the matrix given by:

$$a_{ij} = \int_0^{z_{TOP}} \frac{u\Psi_i\Psi_j}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz \tag{17b}$$

The transformed problem represented by the Eq. 13 is solved by the Laplace Transform technique and diagonalization [23,33] and has the well-known solution:

$$Y(x) = XG(x)\xi, \tag{18}$$

where ξ is the integration constant vector, $G(x)$ is the diagonal matrix with elements are $e^{-d_i x}$, X is the eigenfunction matrix and d_i are the eigenvalues of the matrix F (for more details see the paper of Wortmann et al. [33] at pp. 2173–2174).

Therefore, the transformed solution given by Eq. 13 is well determined and is analytical except for the round-off error.

3 Examples of application of the solution with experimental data

In order to use the above solution we have to select a wind and eddy coefficient vertical profiles. In the atmospheric diffusion problems the choice of a turbulent parameterization represents a fundamental decision for pollutant dispersion modeling. The reliability of each model strongly depends on the way the turbulent parameters are calculated and is related to the current understanding of the PBL [22].

3.1 Boundary layer parameterization for the analytical solution

The literature reports many, greatly varied formulae, for the calculation of the vertical turbulent diffusion coefficient [31]. As examples of applications of our new solution we tested the following vertical diffusion parameterisations.

3.1.1 Formula of Degrazia

Employed throughout the PBL [11]

$$K_z = 0.22w_*z_{TOP} (z/z_{TOP})^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_{TOP}}\right)^{1/3} \times \left[1 - \exp\left(-4\frac{z}{z_{TOP}}\right) - 0.0003 \exp\left(8\frac{z}{z_{TOP}}\right)\right], \tag{19}$$

where w_* is the convective velocity scale.

3.1.2 Similarity formulation

Employed only within the Surfer Layer and considered constant above it [26].

$$K_z = \frac{ku_*z}{\Phi_h(z/L)}, \quad (20)$$

where u_* is the friction velocity, L is Monin–Obukhov length and k is the von Karman constant ($k \approx 0.4$). The function Φ_h is calculated with the formulae of Dyer [12]:

$$\Phi_h = \left(1 - 16\frac{z}{L}\right)^{-1/2} \quad (21)$$

3.1.3 Formula of Troen and Mahrt

Employed throughout the PBL [28].

$$K_z = kw_*z \left(1 - \frac{z}{z_{\text{TOP}}}\right) \quad (22)$$

3.2 Wind parameterisation

The wind speed profile can be described by a power law expressed as follows [26]:

$$\frac{\bar{u}_z}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^n, \quad (23)$$

where \bar{u}_z and \bar{u}_1 are the mean wind velocity at the heights z and z_1 , while n is an exponent that is related to the intensity of turbulence [20].

3.3 Experimental data sets and results

The parameterisations of the model have been evaluated using two experimental datasets with different emissions and meteorological scenarios. The Copenhagen field campaign [15] took place in the suburbs of Copenhagen in 1978. A SF_6 tracer was released without buoyancy from a tower at a height of 115 m and collected at ground-level on arcs located 2,000, 4,000, and 6,000 m from the release point. The site was mainly residential with a roughness length, z_0 , of 0.6 m. The releases typically started up before the sampling and stopped at the end of the sampling period, which is a total sampling time of 1 h and for the experiments considered it was mostly before noon. The meteorological conditions during the dispersion experiments ranged from moderately unstable to convective.

The Prairie Grass data set (see [2]) is composed of dispersion data from a field experiment conducted in an open country (z_0 was 0.008 m) during the summer of 1956, in O'Neill, Nebraska. Sulfur dioxide was released from a continuous point source at a height of 0.46 m and collected at different distances from the source. Here, we use only experiments ranged from moderately unstable to convective conditions and data collected at 5 arcs, 50, 100, 200, 400, and 800 m from the source and the estimates of the surface layer parameter u_* (friction velocity) and L (Monin–Obukhov length) reported by Nieuwstadt [25], as derived from the wind and temperature profiles measured along 16-m masts.

We have evaluated the performances of the solutions using the above data sets with the PBL parameterizations presented and putting in Eq. 5 the skewness S_k equal to 1, as suggested by van Dop and Verver [32] as a fit to experimental data. The infinite convergent series in 12 can be truncated when the convergence is under a prefixed value. In our case we utilized 30 terms with an error of 0.5%.

In Fig. 1 the scatter plotted of observed data during Copenhagen experiment and computer ones are presented for the parameterization of Degrazia et al. [11], Panofsky and Dutton [26] and Pleim and Chang [28]. While in Fig. 2 the same results are presented for the Prairie Grass experiment.

Tables 1 and 2, for Copenhagen and Prairie Grass experiments, respectively, present some performance measurements, obtained using the statistical evaluation procedure described by Hanna [16] and defined in the following way:

$$\text{Normalized mean square error (NMSE)} = \overline{(C_o - C_p)^2} / \bar{C}_o \bar{C}_p$$

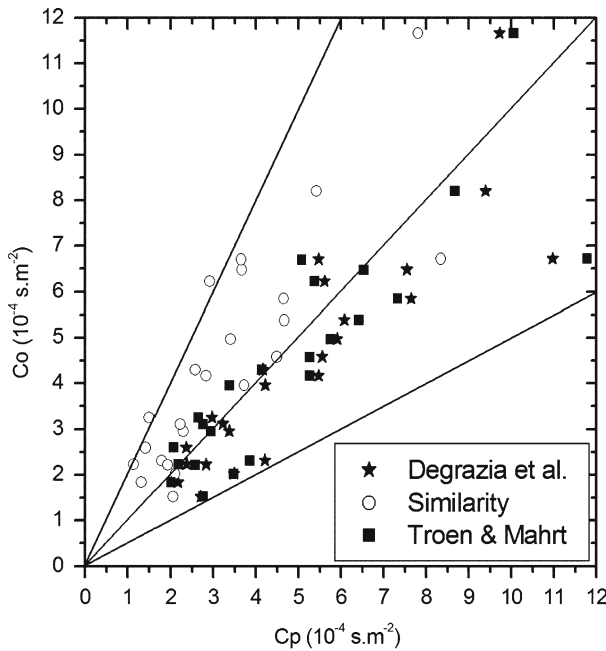


Fig. 1 Scatter plotted of observed (C_o) and computed (C_p) data for the Copenhagen experiment. The data between two external lines are in a factor of 2

Table 1 Statistical evaluation of performances for Copenhagen data set

Parameterisation	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Degrazia et al.	0.08	0.88	1.00	-0.13	-0.03
Similarity	0.21	0.85	0.91	0.30	0.24
Troen & Mahrt	0.09	0.86	1.00	-0.08	-0.08

Table 2 Statistical evaluation of performances for Prairie Grass data set

Parameterisation	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Degrazia et al.	0.64	0.83	0.68	0.31	0.46
Similarity	0.74	0.75	0.80	0.09	−0.14
Troen & Mahrt	1.20	0.82	0.67	0.55	0.69

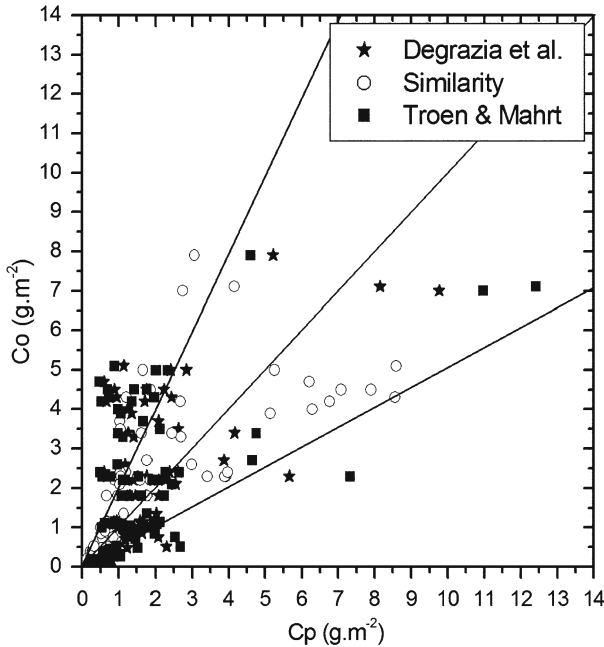


Fig. 2 Scatter plotted of observed (C_o) and computed (C_p) data for the Prairie Grass experiment. The data between two external lines are in a factor of 2

$$\text{Correlation coefficient (COR)} = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}$$

$$\text{Factor of 2 (FA2)} = C_p / C_o \in [0.5, 2]$$

$$\text{Fractional bias (FB)} = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})}{0.5 (\overline{C_o} + \overline{C_p})}$$

The statistical index FB indicates weather the predicted quantities underestimate or overestimate the observed ones. The statistical index NMSE represents the quadratic error of the predicted quantities in relation to the observed ones. Best results are indicated by values nearest zero in NMSE, FB, and FS, and nearest 1 in R and FA2.

Moreover, Figs. 3 shows an example of the concentrations in function to the distance from the source for the three parameterizations with and without the counter-gradient term for a run of Prairie Grass data set. In particular the experiment was characterized by a wind velocity at 10 m height of 5.1 m/s, a friction velocity of 0.37 m/s and a Monin–Obukhov length of -10 m. The experimental data are showed in the figure also. It is possible to see that the influence of counter-gradient term is confined near the source only.

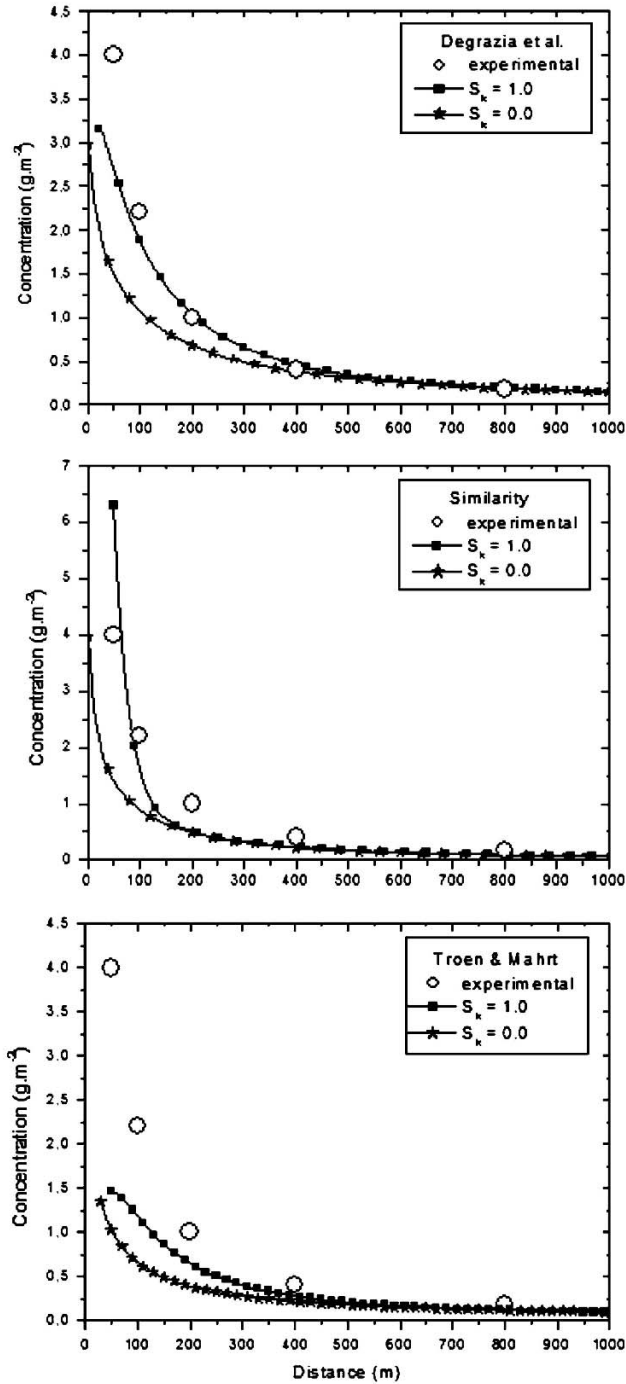


Fig. 3 Concentration in function to the distance from the source for three parameterisations with ($S_k = 1$) and without ($S_k = 0$) the countergradient term for a run of Prairie Grass data set

4 Conclusions

Turbulent mixing plays a critical role in the evolution and structure of the PBL. The scale on which the turbulent mixing takes place includes eddies that cannot be resolved. Local K -theory is a method for parameterizing the effects of turbulent mixing based on how eddies will mix quantities along a local gradient of the transported quantity. Field projects found that large eddies were able to mix air pollution in a manner that was counter to the local gradient. In order to account for this counter gradient flux, a new eddy coefficient was defined, and a positive parameter (γ) was introduced.

Analytical solutions of equations are of fundamental importance in understanding and describing physical phenomena, since they are able to take into account all the parameters of a problem, and investigate their influence and it easy to obtain the asymptotic behavior of the solution, which is usually difficult to generate through numerical calculations.

The aim of this work is to extends the analytical solution presented by Moreira et al. [23] to an eddy diffusivity with a counter gradient flux. In fact, we have presented a new exact general solution of the two-dimension steady state advection diffusion equation considering non-local turbulence closure, which can be applied for describing turbulent dispersion of many scalar quantities, such as air pollution, radioactive material, heat and so on. In order to show the performances of the solution in actual scenarios, we introduced some parameterisations of the PBL and compared the values predicted by the solutions with data collected during two well-known experiments: the Prairie Grass and the Copenhagen experiments. The analysis of the results shows a reasonably good agreement between the computed values against the experimental ones and for Prairie Grass data set best results are obtained with the similarity approach, while in the case of Copenhagen data also Degrazia et al. [11] parameterization work well.

The differences among the experimental data do not depend on the solution of the diffusion equation, but on the equation itself, which is only a model of reality and on the parameterisation used. Also this results show that, when using models, while they are rather sophisticated instruments that ultimately reflect the current state of knowledge on turbulent transport in the atmosphere, the results they provide are subject to a considerable margin of error.

This is due to various factors, including in particular the uncertainty of the intrinsic variability of the atmosphere. Models, in fact, provide values expressed as an average, i.e. a mean value obtained by the repeated performance of many experiments, while the measured concentrations are a single value of the sample to which the ensemble average provided by models refer. This is a general characteristic of the theory of atmospheric turbulence and is a consequence of the statistical approach used in attempting to parameterise the chaotic character of the measured data.

For the above considerations, an analytical solution can be useful in evaluating the performances of numerical method (that solve numerically the advection diffusion equation) that could compare their results, not only against experimental data but, in an easy way, with the solution itself in order to check numerical errors without the uncertainties presented above.

References

1. Alves LS, Cotta, RM, Pontes J (2002) Stability analysis of natural convection in porous cavities through integral transforms. *Int J Heat Mass Transfer* 45:1185–1195
2. Barad ML (1958) Project prairie grass: a field program in diffusion, *Geophys. Research Paper No. 59 (II) TR-58-235*, Air Force Cambridge Research Centre, USA
3. Cheroto S, Mikhailov MD, Kakaça, S, Cotta RM (1999) Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms. *Int J Therm Sci* 38:613–621
4. Cotta RM, (1993) *Integral transforms in computational heat and fluid flow*, CRC Press, Boca Raton
5. Cotta R, Mikhaylov M (1997) *Heat conduction lumped analysis, integral transforms, symbolic computation*. Wiley Baffins Lane, Chichester, England
6. Cotta RM, Ungs MJ, Mikhailov MD (2003) Contaminant transport in finite fractured porous medium: integral transforms and lumped-differential formulations. *Ann Nucl Energy* 30: 261–285
7. De Roode SR, Jonker HJJ, Duynkerke PG, Stevens B (2004) Countergradient fluxes of conserved variables in the clear convective and stratocumulus-topped boundary layer: the role of the entrainment flux. *Boundary-Layer Met* 112:179–196
8. Deardoff JW (1966) The countergradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. *J Atmos Sci* 23:503–506
9. Deardoff JW (1972) Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. *J Atmos Sci* 29:91–115
10. Deardoff JW, Willis GE (1975) A parameterization of diffusion into the mixed layer. *J App Meteorol* 14:1451–1458
11. Degrazia GA, Campos Velho HF, Carvalho JC (1997) Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. *Contrib Atmos Phys* 71:57–64
12. Dyer AJ (1974) A Review of flux-profile relationship. *Bound.-Layer Meteorol* 7:363–372
13. Ertel H (1942) Der vertikale turbulenz-wärmestrom in der atmosphäre. *Meteorol Z* 59:250–253
14. Fiedler BH, Moeng CH (1985) A practical integral closure model for mean vertical transport of a scalar in a convective boundary layer. *J Atmos Sci* 42(4):359–363
15. Gryning SE, Lyck E (1984) Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *J Climate Appl Meteorol* 23:651–654
16. Hanna SR (1989) Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmos Environ* 23:1385–1395
17. Hamba F (1993) A modified K model for chemically reactive species in the planetary boundary layer. *J Geophys Res* 98(3):5173–5182
18. Holtslag A, Moeng CH (1991) Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. *J Atmos Sci* 48:1690–1698
19. Holtslag A, Boville BA (1993) Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model. *J Climate* 6:1825–1842
20. Irwin JS (1979) A theoretical variation of the wind profile power-low exponent as a function of surface roughness and stability, *Atmos Environ* 13:191–194
21. Magno RN, Macêdo EN, Quaresma JN (2002) Solutions for the internal Boundary Layer equations in simultaneously developing flow as power-law fluids within parallel plates channels. *Chem Eng J* 87:339–350
22. Mangia C, Moreira DM, Schipa I, Degrazia GA, Tirabassi T, Rizza U (2002) Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions. *Atmos Environ* 36:67–76
23. Moreira DM, Vilhena MT, Tirabassi T, Buske D, Cotta RM (2005) Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method. *Atmos Environ* 39(34):6290–6295
24. Neto HL, Quaresma JN, Cotta RM (2002) Natural convection in three-dimensional porous cavities: integral transform method. *Int J Heat Mass Transfer* 45:3013–3032
25. Nieuwstadt FTM (1980) Application of mixed-layer similarity to the observed dispersion from a ground level source. *J Appl Meteorol* 19:157–162
26. Panofsky HA, Dutton JA (1988) *Atmospheric turbulence*. Wiley, New York
27. Pereira LM, Guerrero JS, Brazão N, Cotta RM (2002) Compressible flow and heat transfer in ultracentrifuges hybrid analysis via integral transforms. *Int J Heat Mass Transfer* 45:99–112
28. Pleim JE, Chang JS (1992) A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer. *Atmos Environ* 26A:965–981

29. Priestly CHB, Swinbank WC (1947) Vertical transport of heat by turbulence in the atmosphere. *Proc R Soc Lond A* 189:543–561
30. Robson RE, Mayocchi CL (1994) A simple model of countergradient flow. *Phys Fluids* 6(6):1952–1954
31. Seinfeld JH, Pandis SN (1997) *Atmospheric chemistry and physics*. Wiley, New York
32. van Dop H, Verver G (2001) Countergradient transport revisited. *J. Atmos Sci* 58:2240–2247
33. Wortmann S, Vilhena MT, Moreira DM, Buske D (2005) A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmos Environ* 39:2171–2178
34. Wyngaard JC, Brost RA (1984) Top-down bottom-up diffusion of a scalar in the convective boundary layer. *J Atmos Sci* 41:102–112
35. Wyngaard JC, Weil JC (1991) Transport asymmetry in skewed turbulence. *Phys Fluids* A3: 155–162
36. Zilitinkevich S, Gryanik VM, Lykossov VN, Mironov DV (1999) Third-order transport and non-local turbulence closures for convective boundary layers. *J Atmos Sci* 56:3463–3477

APÊNDICE VI

Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer

Short Communication publicado na revista Atmospheric Environment, volume 41, páginas 5496-5501, no ano de 2007.

Short communication

Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer

Daniela Buske^{a,c}, Marco T. Vilhena^a, Davidson M. Moreira^{a,b,*}, Tiziano Tirabassi^c

^aUFRGS-PROMEC, Porto Alegre, Brazil

^bUFPEL/UNIPAMPA, Bagé, Brazil

^cInstitute ISAC of CNR, Bologna, Italy

Received 15 November 2006; received in revised form 17 April 2007; accepted 24 April 2007

Abstract

The present study proposes a steady-state mathematical model for dispersion of contaminants in low winds that takes into account the along-wind diffusion, but it does not consider the variable wind direction typical of low wind. The solution of the advection–diffusion equation for these conditions is obtained applying the generalized integral Laplace transform technique (GILTT) method and the eddy diffusivities are functions of distance from the source. The performance of the model was evaluated against the field experiments at the Idaho National Engineering Laboratory, the Lilleström dataset and during convective conditions at the Indian Institute of Technology.

© 2007 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: Low winds; Advection–diffusion equation; Air pollution modeling; GILTT method; Analytical solution

1. Introduction

The importance of dispersion modeling in low wind conditions lies in the fact that such conditions occur frequently and are crucial for air pollution episodes. The classical approach based on conventional models, such as Gaussian puff/plume or the K-theory with suitable assumptions, are known to work reasonably well during most meteorological regimes, except for weak and variable wind conditions. Various attempts have been made in literature to explain dispersion in the presence of low wind conditions by relaxing some of the limitations (Seinfeld and Pandis, 1998; Arya, 1995; Sharan and Gopalakrishnan, 2003).

Several models have been developed to describe dispersion processes under low wind conditions. Here, we present the generalized integral Laplace transform technique (GILTT) method that is an analytical series solution of the advection–diffusion equation. We enhanced the model to describe the dispersion of contaminants in low winds, taking into account the along-wind diffusion.

2. Diffusion model

The cross-wind integration of the steady state advection–diffusion equation leads to

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

*Corresponding author.

E-mail address: davidson@mecanica.ufrgs.br (D.M. Moreira).

where c represents the pollutant concentration, u is the horizontal component of the wind speed, K_x and K_z are the along-wind and vertical eddy diffusivities, respectively, and are dependent on the horizontal (x) and vertical (z) variables. Moreover, it is subjected to the boundary conditions of zero flux at the ground, planetary boundary layer (PBL) top (h) and $\partial c(x, z)/\partial x = 0$ at $x = L$, where L is far away from the source, and a Q rate source emission at plume height H_s .

Following the works of Wortmann et al. (2005) and Moreira et al. (2005a), we pose that the solution of the problem (1) has the form

$$c(x, z) = \sum_{i=0}^N \bar{c}_i(x) \Psi_i(z), \quad (2)$$

where $\Psi_i(z)$ are the eigenfunctions ($\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$) and λ_i the eigenvalues ($\lambda_i = (i\pi)/h$ for $i = 0, 1, 2, 3, \dots$) of the associated Sturm–Liouville problem.

Rewriting Eq. (1) using the chain rule, replacing the above equation, taking inner-product with the eigenfunctions and rewriting this in matrix fashion, we obtain

$$B(x)Y''(x) + D(x)Y'(x) + E(x)Y(x) = 0, \quad (3)$$

where $Y(x)$ is the column vector whose components are $\bar{c}_i(x)$ and the entries of matrices B , D and E are, respectively, given by

$$b_{i,j} = \int_0^h K_x(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz, \quad (4)$$

$$d_{i,j} = - \int_0^h u(z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \int_0^h K'_x(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz, \quad (5)$$

$$e_{i,j} = \int_0^h K'_z(x, z) \Psi'_i(z) \Psi_j(z) dz - \lambda_i^2 \int_0^h K_z(x, z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz. \quad (6)$$

Assuming $K_x \rightarrow 0$, we obtain the solutions of Moreira et al. (2005a) and Wortmann et al. (2005).

Indeed, to solve Eq. (3) by the Laplace transform technique, likewise the work of Moreira et al. (2005a), firstly we perform a stepwise approximation of the entries of the matrices $B(x)$, $D(x)$ and $E(x)$ by taking average values for the eddy diffusivity and its derivative in the x variable for each sub-domain. It turns out that problem (3) simplifies to a set of ordinary differential equations

in which B , D and E are matrices with constant components for every sub-domain. Henceforth, the previous solution obtained by Wortmann et al. (2005) can be applied in a straightforward manner. So, we can recast Eq. (3) as

$$Y''(x) + FY'(x) + GY(x) = 0, \quad (7)$$

where the matrices F and G are defined, respectively, like $F = B^{-1}D$, $G = B^{-1}E$.

Applying the order reduction to Eq. (7), we come out with the result

$$Z'(x) + HZ(x) = 0, \quad (8)$$

subjected to the boundary conditions

$$Z_1(0) = Q\Psi_j(H_s)A^{-1} \quad \text{and} \quad Z_2(L) = 0. \quad (8a)$$

Here, $Z(x)$ is the vector $Z(x) = \text{col}(Z_1(x), Z_2(x))$,

$$A = a_{i,j} = \int_0^h u(z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz$$

and the matrix H has the block form

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix}.$$

In order to make possible the application of the Laplace transform technique to problem (8) defined over a finite domain ($0 \leq x \leq L$), let us define the auxiliary problem

$$Z'(x) + HZ(x) = 0 \quad (9)$$

subject to the boundary condition

$$Z(0) = W_0 \quad (9a)$$

and boundness of the vector Z at infinity. Here, W_0 is the vector $W_0 = \text{col}(W_1, W_2)$ and only the subvector W_1 is known. Comparing problems (9) and (8), we promptly realize that the solution of problem (8) actually coincides with the solution of problem (9) when we restrict the solution to the domain $0 \leq x \leq L$. To fulfill this constrain, we must apply the condition $Z(L) = 0$. We are now in a position to solve problem (8). For this, we initially apply the Laplace transform technique to problem (9) and then perform the diagonalization of the matrix H . This procedure allows us to perform the Laplace inversion, yielding the solution

$$Z(x) = X \exp(Dx)X^{-1}Z(0) = M(x)\xi, \quad (10)$$

where $M(x) = X \exp(Dx)$ and $\xi = X^{-1}Z(0)$. By the choice of a new arbitrary constant vector ξ , we

avoid the inversion of X . To this point, we must notice that all components of the arbitrary constant vector ξ are unknown.

Here, X is the matrix of eigenvectors of matrix H and D is a diagonal matrix of the respective eigenvalues. As mentioned, to construct the solution of problem (8), we need to apply the condition $Z_2(L) = 0$ and also $Z_1(0) = Q\Psi_j(H_s)A^{-1}$ because of the new constant vector definition (ξ). For this, we recast the solution given by Eq. (10) as

$$\begin{pmatrix} Z_1(x) \\ Z_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(x) & M_{12}(x) \\ M_{21}(x) & M_{22}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

To determine the unknown vector ξ , we solve the following linear system, resulting from the application of the boundary conditions (8a) to the solution appearing in Eq. (11), namely

$$\begin{pmatrix} M_{11}(0) & M_{12}(0) \\ M_{21}(L) & M_{22}(L) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_1(0) \\ Z_2(L) \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Once the constant vector is obtained, the solution for pollutant concentration given by Eq. (2) is well determined. We realize that in this work, for the first time, the GILTT transform equation reduces to a linear second-order matrix differential equation. In fact, in all previous work (Wortmann et al., 2005; Moreira et al., 2005a), the GILTT transform equations consist of linear first-order matrix differential equations. The solution is two-dimensional, so in order to calculate the three-dimensional concentration $C(x, y, z)$, lateral diffusion needs to be included. We assume that the plume has a Gaussian concentration distribution in the lateral, then

$$C(x, y, z) = c(x, z) \frac{e^{(-y^2/2\sigma_y^2)}}{\sqrt{2\pi\sigma_y}}, \quad (13)$$

where $c(x, z)$ is computed from Eq. (2).

3. Experimental data and model evaluation

Before the evaluation against experimental data, the solution was checked against a simpler existing solution considering an infinite PBL height with wind and eddy diffusivity constant in space (Seinfeld and Pandis, 1998). Our solution showed the same results as that of the simpler one.

The PBL turbulence parameterizations, used to evaluate the performance of the model, are presented in detail in Moreira et al. (2005a, b).

Three datasets were utilized. The Idaho National Engineering Laboratory (INEL) diffusion experiments were conducted under stable conditions for surface based releases with light winds over flat, even terrain (Sagendorf and Dickson, 1974). Arcs were laid out at radii of 100, 200 and 400 m from the emission point. The receptor height was 0.78 m. The tracer SF₆ was released at a height of 1.5 m. The roughness length utilized was $z_0 = 0.005$ m by Brusasca et al. (1992) and Sharan and Yadav (1998). The detailed meteorological data utilized can be found in Moreira et al. (2005b).

Fig. 1a shows the observed and predicted scatter diagram of centerline concentrations (that is the centerline concentrations at the elevation of 0.78 m), while Fig. 1b shows the observed and predicted scatter diagram of centerline concentrations only for $u < 1$ m s⁻¹.

Tables 1 and 2 show the performance of the K-model for the stable case compared with other models. The results obtained with the GILTT method are compared with the ADMM model which is obtained applying the Laplace transform technique, considering the PBL as a multilayer system (Moreira et al., 2005b). The other models are based on the common Gaussian approach described in Sagendorf and Dickson (1974). In Model M-1, the stability class is determined by the average temperature gradient during the test period. Both σ_z and σ_y are determined from a single stability class using the curves from Turner (1970). The second method M-2 is the split sigma approach. In this method, σ_z is determined by the temperature gradient as in the standard method, but σ_y is based on a stability class determined by the standard deviation of azimuth angle over the test period. The third procedure M-3 is similar to the standard method, except that the values of dispersion parameters are developed at the INEL. The final approach M-4 is based on the segmented plume method (Zannetti, 1990), that is a simple way to account for plume meander is to divide each test into small intervals and make separate calculations for each interval.

Analysing the statistical indices (Hanna, 1989) in Table 1, it is possible to notice that the model simulates satisfactorily the observed concentrations, with normalised mean square error (NMSE), fractional bias (FB) and fractional standard deviation

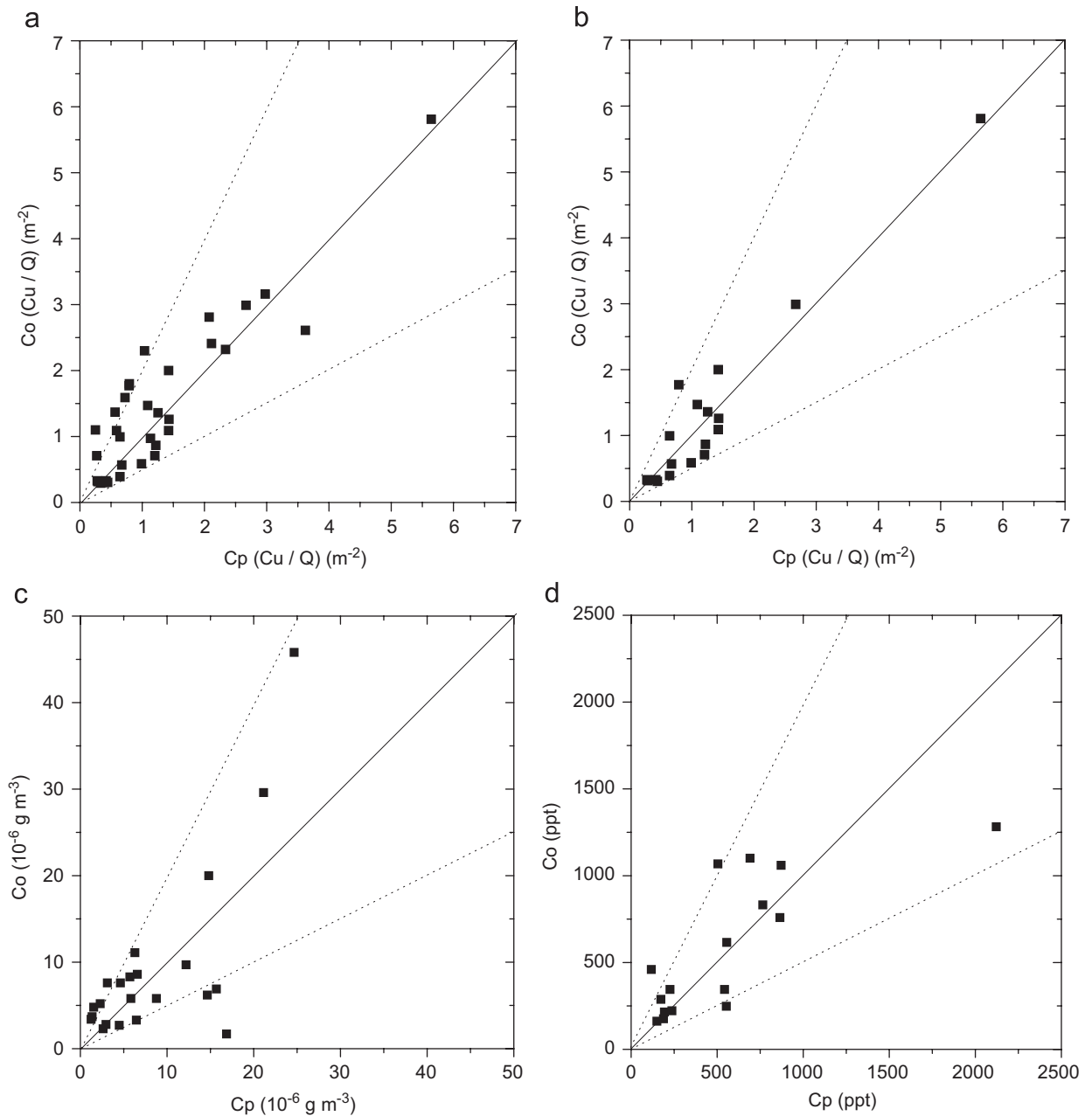


Fig. 1. Observed (Co) and predicted (Cp) scatter diagram of near ground-level concentrations using the solution for: (a) INEL experiment; (b) INEL experiment only for $u < 1 \text{ m s}^{-1}$; (c) Lilleström dataset; (d) IIT dataset. Data between dot lines correspond to a factor of two.

(FS) values relatively near to zero and correlation coefficient (COR) and factor 2 (FA2) relatively near to one. The main test of the model performance is shown in Table 2, which presents the results of the simulations considering the experiments where wind velocity is smaller than 1 m s^{-1} . We can observe that the K-model presents a better performance when

considering all experiments and for wind speed smaller than 1 m s^{-1} (Table 2). Moreover, it is possible to see that, in the case of low wind scenarios, the model that takes into account the along-wind diffusion presents the best results, although we have to outline that lesser the data considered, more is the statistical uncertainty of the indices.

Table 1

Statistical evaluation for all experiments considering other models for the stable case (INEL dataset)

Models	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT	0.15	0.90	0.79	0.14	0.01
ADMM	0.25	0.79	0.79	0.02	0.08
M-1	5.81	0.58	0.00	−1.45	−1.25
M-2	0.60	0.71	0.70	−0.31	−0.41
M-3	0.55	0.44	0.73	−0.04	0.17
M-4	0.43	0.63	0.76	0.14	0.38

Table 2

Statistical evaluation considering other models only for $u < 1 \text{ m s}^{-1}$ (at 2 m level) for the stable case

Models	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT (with K_x)	0.09	0.96	0.94	0.03	0.08
GILTT (without K_x)	0.33	0.83	0.72	−0.26	0.04
ADMM	0.21	0.85	0.92	−0.02	0.21
M-1	6.72	0.54	0.00	−1.51	−1.15
M-2	0.33	0.82	0.72	−0.25	−0.03
M-3	1.02	0.21	0.56	−0.16	0.29
M-4	0.72	0.53	0.67	0.06	0.59

Moreover, the solution with the above parameterization was applied to the well-known Lilleström dataset (Siversten and Böhler, 1985). In this experiment, SF₆ was used as the tracer. Release height was 36 m; the tracer was sampled near ground-level in arcs at 160 and 900 m from the source. Data were collected in flat residential area, in extreme meteorological conditions: low wind, snow covered terrain and −20 °C air temperature.

In Table 3, the results of the simulations for the Lilleström dataset are presented. In Fig. 1c, the scatter diagram for the Lilleström dataset is shown. Considering that “Lilleström data represent a challenge which has not been satisfactorily mastered by any model” (Olesen, 1995), the results presented are very satisfactory.

The performance of the GILTT model for the unstable case was evaluated against experimental ground-level concentration using SF₆ data from dispersion experiments in low wind conditions carried out by the Indian Institute of Technology (IIT Delhi), described in Sharan et al. (1996a, b, 2002). The pollutant was released without buoyancy of a height of 1 m and the concentrations of SF₆ were observed near the ground level (0.5 m). The release rate of SF₆ tracer varied from 30 to

Table 3

Statistical evaluation of model results for the stable case of Lilleström

Models	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT	0.62	0.74	0.64	0.10	0.41

Table 4

Statistical evaluation of model results for the unstable case of IIT dataset

Models	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT	0.29	0.77	0.81	0.05	−0.25
ADMM	0.35	0.76	0.81	−0.01	−0.33
Arya (1995)	13.86	0.77	0.00	1.68	1.59
Sharan et al. (1996a)	7.11	0.76	0.00	1.49	1.32
Sharan et al. (2002)	0.37	0.91	0.75	0.45	0.40

50 ml min^{−1}. The sampling period for each run was 30 min. The samplers were located on arcs of 50 m and 100 m radii. The detailed meteorological data utilized can be found in Moreira et al. (2005b).

Fig. 1d shows the observed and predicted scatter diagram of near ground-level centerline concentrations using the GILTT approach. We can observe that the observed ground-level centerline concentration is reproduced fairly well. Table 4 shows the performance of the GILTT approach compared with other models for the unstable experiments. The model of Arya (1995) is obtained by the numerical integration of the Gaussian puff solution using dispersion parameters based on convective similarity scaling. The results obtained with this approach reveal a further under-prediction of concentration. The same happens with the model of Sharan et al. (1996a). Better results are obtained by the model of Sharan et al. (2002) that is an improvement of the previous one (Sharan et al., 1996a), where the friction velocity is used instead of the convective velocity.

4. Conclusions

The aim of this work is to extend the analytical solution presented by Moreira et al. (2005a) to low wind conditions. In fact, we have presented a new exact general solution of the two-dimensional steady-state advection–diffusion equation which can be applied for describing turbulent dispersion of many scalar quantities, such as air pollution,

radioactive material, heat and so on with low wind conditions. Besides advection along the mean wind, the model takes into account the longitudinal diffusion.

In order to show the performances of the solution in actual scenarios, we introduced some parameterizations of the PBL and compared the values predicted by the solution with data collected during well-known experiments. In spite of some limitations of the INEL experimental dataset, we were able to obtain a reasonable agreement between the observed concentrations and those calculated from the GILTT technique. Moreover, the best results are obtained with the wind velocity smaller than 1 m s^{-1} . In this last case, we obtained the best results of the model with $K_x \neq 0$ in respect to the model with $K_x = 0$. The present study reinforces that, the inclusion of the longitudinal diffusion and eddy diffusivities depending on the source distance, important in low wind conditions, improves the description of the turbulent transport process of atmospheric pollutants.

The solution described in this study has two practical limitations: (i) it does not give the concentration field in the region upstream of the source, although the upstream diffusion may be expected near the source under low wind convective conditions (Arya, 1995); (ii) it does not consider the variable wind direction typical of low wind.

Acknowledgements

The authors thank to Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) and the project “Laboratório LaRIA” for the partial financial support of this work.

References

- Arya, P., 1995. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. *Journal of Applied Meteorology* 34, 1112–1122.
- Brusasca, G., Tinarelli, G., Anfossi, D., 1992. Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions. *Atmospheric Environment* 26A, 707–723.
- Hanna, S.R., 1989. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment* 23, 1385–1395.
- Moreira, D.M., Vilhena, M.T., Tirabassi, T., Buske, D., Cotta, R.M., 2005a. Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method. *Atmospheric Environment* 39 (34), 6290–6295.
- Moreira, D.M., Tirabassi, T., Carvalho, J.C., 2005b. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. *Atmospheric Environment* 39 (20), 3643–3650.
- Olesen, H.R., 1995. Datasets and protocol for model validation. *International Journal of Environment and Pollution* 5, 693–701.
- Sagendorf, J.F., Dickson, C.R., 1974. Diffusion under low wind-speed, inversion conditions, U.S. National Oceanic and Atmospheric Administration Technical Memorandum ERL ARL-52.
- Seinfeld, J.H., Pandis, S.N., 1998. *Atmospheric Chemistry and Physics*. Wiley, New York.
- Sharan, M., Gopalakrishnan, S.G., 2003. Mathematical modeling of diffusion and transport of pollutants in the atmospheric boundary layer. *PAGEOPH* 160, 357–394.
- Sharan, M., Yadav, A.K., 1998. Simulation of experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model. *Atmospheric Environment* 32, 3481–3492.
- Sharan, M., Singh, M.P., Yadav, A.K., 1996a. A mathematical model for the atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. *Atmospheric Environment* 30 (7), 1137–1145.
- Sharan, M., Singh, M.P., Yadav, A.K., Agarwal, P., Nigam, S., 1996b. A mathematical model for dispersion of air pollutants in low wind conditions. *Atmospheric Environment* 30 (8), 1209–1220.
- Sharan, M., Yadav, A.K., Modani, M., 2002. Simulation of short-range diffusion experiment in low wind convective conditions. *Atmospheric Environment* 36, 1901–1906.
- Siversten B., Böhler T., 1985. Verification of dispersion estimates using tracer data. NILU Report TR 19/85, The Norwegian Institute for Air Research, Lilleström, Norway.
- Turner D.B., 1970. Workbook of atmospheric dispersion estimates. EPA, Research Triangle Park, NC, USA. U.S.EPA Ref. AP-26 (NTIS PB 191-482).
- Wortmann, S., Vilhena, M.T., Moreira, D.M., Buske, D., 2005. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment* 39, 2171–2178.
- Zannetti, P., 1990. *Air Pollution Modelling*. Computational Mechanics Publications, Southampton, 444pp.

APÊNDICE VII

A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL

Artigo publicado na revista Atmospheric Environment, volume 39, páginas 2171-2178, no ano de 2005.

A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL

S. Wortmann^a, M.T. Vilhena^a, D.M. Moreira^{b,*}, D. Buske^a

^aUniversidade Federal do Rio Grande do Sul, PROMEC, Porto Alegre, RS, Brasil

^bULBRA, Universidade Luterana do Brasil, Environmental Engineering, Engenharia Ambiental, Rua Miguel Tostes, 101 Predio 11-Sala 230, Bairro Sao Luis-Canoas, RS 92420-280, Brasil

Received 13 September 2004; received in revised form 22 December 2004; accepted 7 January 2005

Abstract

In this work, we present a new analytical approach for the solution of the advection–diffusion equation to simulate the pollutant dispersion in the planetary boundary layer. In this method the advection–diffusion equation after transformation by a generalized integral transform is solved by the Laplace transform technique with analytical inversion and is seen to be non-Gaussian. No approximation is made in this so that an exact solution is obtained except for the round-off error. The present model has been evaluated in moderately unstable conditions using the Copenhagen experiment. The performance of the model is discussed qualitatively as well as quantitatively. The proposed model has performed very well with the data from the diffusion experiment considered.

© 2005 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: GITT; Laplace transform; Atmospheric dispersion; Analytical solution; Advection–diffusion equation; Planetary boundary layer

1. Introduction

In the last years, special attention has been devoted to the task of searching analytical solutions for the advection–diffusion equation in order to simulate the pollutant dispersion in the planetary boundary layer (PBL). Presently, analytical solutions of the advection–diffusion equation are usually obtained just for stationary conditions and by making strong assumptions about the eddy diffusivity coefficients (K) and wind speed profiles (U). They are assumed as constant throughout the whole PBL or follow a power law (van Ulden, 1978; Pasquill and Smith, 1983; Seinfeld, 1986;

Tirabassi et al., 1986; Sharan et al., 1996). Despite the fact that the U and K profiles are not physically realistic, these solutions are widely used for regulatory applications, because they can give, in general, a qualitative description of diffusion processes within the PBL and the computer codes do not need prohibitive computational resources. Furthermore, these classes of solutions, having the influence parameters explicitly expressed in a mathematical closed form, allow in general a deep sensitivity analysis over model parameters.

In the framework of a semi-analytical solution, for sake of illustration, we mention the work of Moreira et al. (1999) which solves the advection–diffusion equation by the Laplace transform technique with numerical inversion. For more details see the works of Vilhena et al. (1998) and Degrazia et al. (2001). Focusing our attention in this direction, in this work we take a step

*Corresponding author. Tel.: +55 51 477 9285;
fax: +55 51 477 1313.

E-mail address: davidson@ulbra.tche.br (D.M. Moreira).

forward, reporting an analytical solution for the advection–diffusion equation applying the generalized integral transform technique (GITT approach) (Cotta and Mikhaylov, 1997). In addition, we solve the resulting transformed ordinary differential equation, also analytically, by the Laplace transform technique. At this point, it is relevant to underline the meaning of analicity, i.e. no approximation is made in deriving the solution. Therefore, we have a certain confidence that the analytical solution is an exact solution except for round-off error. The main feature of the GITT method (Cotta and Mikhaylov, 1997) involves the following steps: solution of an associated Sturm–Liouville problem, expansion of the pollutant concentration in a series in terms of the given eigenfunction, replacement of this expansion in the advection–diffusion equation and, finally, taking moments. This procedure leads to a set of differential ordinary equations, named the transformed equations. These equations are then solved, following the idea of Wortmann (2003), by the application the Laplace transform technique. In our knowledge the novelty of this approach consists in the use, for the first time, of the Laplace transform technique to solve analytically the GITT transformed advection–diffusion equation. Therefore, we call this technique the Generalized integral Laplace transform technique (GILTT). Indeed, we may affirm that with this procedure, the GILTT method becomes an analytical approach in the sense that it solves analytically the advection–diffusion equation. We outline the results as follows: in Section 2, we describe in detail the derivation of the GILTT solution for the two-dimensional advection–diffusion equation; in Section 3, the turbulent parameterization assumed in this work is presented; in Section 4, the numerical results given by the new analytical method are announced and also the comparison with experimental data; finally, in Section 5, the principal aspects of these method and conclusions are discussed.

2. The model and the GILTT solution

Considering a Cartesian coordinate system in which the x -axis coincides with the direction of the average wind and z is the vertical axis, the time-dependent advection–diffusion equation can be written as (Blackadar, 1997):

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + U \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right), \quad (1)$$

where \bar{C} denotes the average concentration, U is the mean wind speed in the x direction and K_x , K_y and K_z are the eddy diffusivities. The crosswind integration of

Eq. (1) (in stationary conditions and neglecting the longitudinal diffusion) leads to

$$U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (2)$$

subject to the boundary conditions of zero flux at the ground and PBL top, and a source with emission rate Q at height H_s :

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{at } z = 0, h \quad (3)$$

$$Uc(0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{at } x = 0, \quad (4)$$

where now c represents the average crosswind-integrated concentration and h is the unstable boundary layer height.

The diffusive term in Eq. (2) is rewritten using the chain rule. This procedure was used by Wortmann (2003) and allows a simplification of the auxiliary problem, whose choice is made as customary in the use of GITT due to Cotta and Mikhaylov (1997). Then, we can write

$$U \frac{\partial c}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial z}. \quad (5)$$

The formal application of GITT begins with the choice of the problem of associated eigenvalue (also known in the literature as the auxiliary problem) and their respective boundary conditions:

$$\Psi_i''(z) + \lambda_i^2 \Psi_i(z) = 0 \quad \text{at } 0 < z < h, \quad (6a)$$

$$\Psi_i'(z) = 0 \quad \text{at } z = 0, h. \quad (6b)$$

The solution is $\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$, where λ_i are the positive roots of the expression $\sin(\lambda_i h) = 0$. Then, $\lambda_0 = 0$ and $\lambda_i = i\pi/h$. It is observed that the functions $\Psi_i(z)$ and λ_i , known respectively, as the eigenfunctions and eigenvalues associated with the problem of Sturm–Liouville, satisfy the following orthonormality condition:

$$\frac{1}{N_m^{1/2} N_n^{1/2}} \int_v \Psi_m(z) \Psi_n(z) dz = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n, \end{cases}$$

where N_m is given by

$$N_m = \int_v \Psi_m^2(z) dz. \quad (7)$$

Following the formalism of GITT, the first step is to expand the variable $c(x, z)$ into the following form:

$$c(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}. \quad (8)$$

Substituting Eq. (8) into Eq. (5) we obtain

$$U \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}} = K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z}\right) \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\Psi'_i(z)}{N_i^{1/2}}, \quad (9)$$

where ' and '' are used to indicate derivatives of first and second order, respectively.

The next step is to apply the operator $\int_0^h (\Psi_j(z))/(N_j^{1/2}) dz$ in Eq. (9) and use Eq. (6) to observe that $\Psi_i = -\lambda_i^2 \Psi_i$. Recall that $\Psi_i = \Psi_i(z)$, $U = U(z)$ and $K_z = K_z(z)$. Then,

$$\begin{aligned} & - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h U \Psi_i \Psi_j dz \\ & - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \lambda_i^2}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h K_z \Psi_i \Psi_j dz \\ & + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h \left(\frac{\partial K_z}{\partial z}\right) \Psi'_i \Psi_j dz = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Now, taking

$$Y(x) = \{\bar{c}_i(x)\}, \quad F = -B^{-1}.E, \quad B = \{b_{ij}\},$$

where

$$b_{ij} = \int_0^h U \Psi_i \Psi_j dz$$

$$E = \{e_{ij}\}$$

$$e_{ij} = \int_0^h \frac{\partial K_z}{\partial z} \Psi'_i \Psi_j dz - \lambda_i^2 \int_0^h K_z \Psi_i \Psi_j dz.$$

Eq. (10) in matrix notation becomes

$$Y'(x) + FY(x) = 0. \quad (11)$$

So for the boundary condition of Eq. (4)

$$Uc(0, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(0)\Psi_i}{N_i^{1/2}}$$

and applying the operator

$$\int_0^h \frac{\Psi_j}{N_j^{1/2}} dz$$

results in

$$\int_0^h \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(0)U\Psi_i\Psi_j}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz = \int_0^h \frac{Q\delta(z-H_s)\Psi_j}{N_j^{1/2}} dz.$$

Then, using Eq. (6) and performing the due substitutions and integrations the boundary conditions are

$$c_0(0) = \frac{Q\Psi_0(H_s)\sqrt{h}}{\int_0^h U(z)\Psi_0^2(z) dz} \quad \text{for } i = 0,$$

$$c_i(0) = \frac{Q\Psi_i(H_s)\sqrt{h/2}}{\int_0^h U(z)\Psi_i^2(z) dz} \quad \text{for } i \neq 0.$$

The transformed problem represented by Eq. (11) can be solved by the Laplace transform technique and diagonalization (Segatto and Vilhena, 1999; Wortmann, 2003). First, transforming x into s and Y into \bar{Y} the equation becomes

$$s\bar{Y}(s) - Y(0) + F\bar{Y}(s) = 0, \quad (12)$$

where the overbar represents the transformed potential.

The matrix F is decomposed into eigenvectors and eigenvalues as

$$F = XDX^{-1}, \quad (13)$$

where X is the matrix of the eigenvectors and D is the diagonal matrix of the eigenvalues of F . This procedure is valid when the eigenvalues of the matrix F are different and not null.

Then, Eq. (12) becomes

$$s\bar{Y}(s) - Y(0) + XDX^{-1}\bar{Y}(s) = 0 \quad (14a)$$

or

$$(sI + XDX^{-1})\bar{Y}(s) = Y(0), \quad (14b)$$

where I is the matrix identity. Given that $XX^{-1} = I$, we can write

$$X(sI + D)X^{-1}\bar{Y}(s) = Y(0). \quad (15)$$

Multiply both sides of Eq. (15) for X^{-1} and $(sI + D)^{-1}$ we obtain

$$\bar{Y}(s) = X(sI + D)^{-1}X^{-1}Y(0). \quad (16)$$

An alternative procedure for the inversion of the matrix X is suggested by Segatto and Vilhena (1999). Firstly, one determines the vector ξ ($\xi = X^{-1}Y(0)$). Substituting in Eq. (13) the result is

$$\bar{Y}(s) = X(sI + D)^{-1}\xi, \quad (17)$$

where ξ is found solving the equation $X\xi = Y(0)$, and calculating using the LU decomposition, whose computational cost is less than that of inversion of matrix. The elements of the matrix $(sI + D)$ have the form $\{s + d_i\}$, where d_i are the eigenvalues of the matrix F given in Eq. (11). It is known that the inverse of a diagonal matrix is the inverse of their elements. In other words, the elements of $(sI + D)^{-1}$ are $1/s + d_i$ whose transformed inverse of Laplace is $e^{-d_i x}$. $G(x)$ being the diagonal

matrix with elements $e^{-d_i x}$ the final solution is given by

$$Y(x) = XG(x)\xi. \tag{18}$$

Then the form of the inverse is given by

$$c(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}, \tag{19}$$

where $\Psi_i(z)$ is obtained from the problem of Sturm–Liouville given by Eq. (6) and $\bar{c}_i(x, z)$ comes from the solution of the transformed problem given by Eq. (11). Notice that the crosswind-integrated concentration represented by (19) is not Gaussian.

3. Turbulent parameterization

In the atmospheric diffusion problems the choice of a turbulent parameterization represents a fundamental decision for pollutant dispersion modeling. From a physical point of view the turbulence parameterization is an approximation in the sense that we are putting in the mathematical models an approximated relation that in principle can be used as a surrogate for the natural but unknown term. The reliability of each model strongly depends on the way the turbulent parameters are calculated and is related to the current understanding of the PBL (Mangia et al., 2002).

The eddy diffusivity was obtained from the time-dependent equation derived by Batchelor (1949) and written here as

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin(2\pi n t / \beta_i)}{n} dn \tag{20}$$

with $\alpha = x, y, z$ and $i = u, v, w$, where $F_i^E(n)$ is the Eulerian spectrum of energy normalized by the Eulerian velocity variance σ_i^2 ; β_i is defined as the ratio of the Lagrangian to the Eulerian integral time scales; n is the frequency, and t is the travel time.

The asymptotic behavior of Eq. (20) for large diffusion travel times is

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(0)}{4}. \tag{21}$$

In terms of the convective scaling parameters the vertical eddy diffusivity derived from Eq. (21) can be formulated as (Degrazia et al., 1997)

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]. \tag{22}$$

Thus, in this study we introduce the vertical eddy diffusivity (Eq. (22)) in the model (Eq. (19)) to calculate the ground-level crosswind-integrated concentration.

4. Experimental data and evaluation of the model

The performance of the present model has been evaluated against experimental crosswind ground-level concentrations using tracer SF₆ data from dispersion experiments carried out in the northern part of Copenhagen, which is described in Gryning et al. (1987). The tracer was released without buoyancy from a tower at a height of 115 m, and collected at ground-level positions at a maximum of three crosswind arcs of tracer sampling units. The sampling units were positioned 2–6 km from the point of release. Tracer releases typically started 1 h before the start of tracer sampling and stopped at the end of the sampling period; the average sampling time was 1 h. The site was mainly residential with a roughness length of the 0.6 m.

The wind speed profile used in Eq. (19) has been parameterized following the similarity theory of Monin–Obukhov and OML model (Berkowicz et al., 1986):

$$U = \frac{u_*}{k} [\ln(z/z_0) - \Psi_m(z/L) + \Psi_m(z_0/L)] \quad \text{if } z \leq z_b, \tag{23}$$

$$U = U(z_b) \quad \text{if } z > z_b, \tag{24}$$

where $z_b = \min[|L|, 0.1z_i]$ and Ψ_m is a stability function given by (Paulson, 1970).

Fig. 1 shows the observed and predicted scatter diagram of ground-level crosswind concentrations using the approach (19) with vertical eddy diffusivity given by Eq. (22). In this respect, it is important to note that the

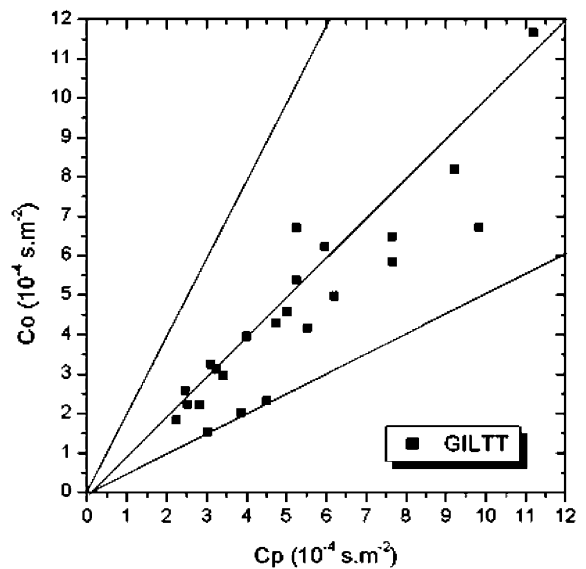


Fig. 1. Observed (C_o) and predicted (C_p) crosswind ground-level-integrated concentration, normalized with emission (c/Q), scatter diagram for the new model. Lines indicate a factor of two.

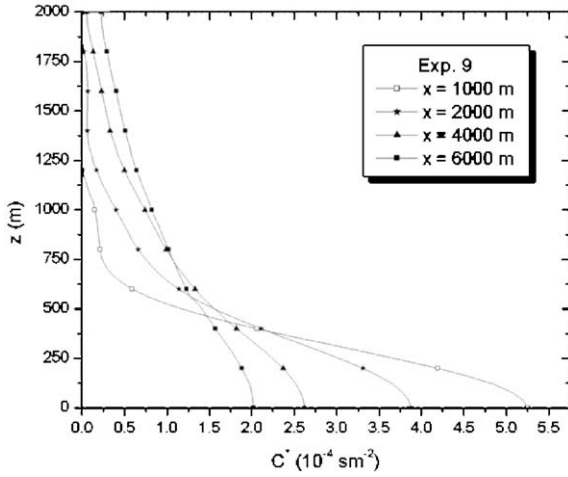


Fig. 2. Vertical profile of concentration ($C^* = c/Q$) for various downstream distances considering the experiment 9 of Copenhagen: $x = 1000, 2000, 4000$ and 6000 m .

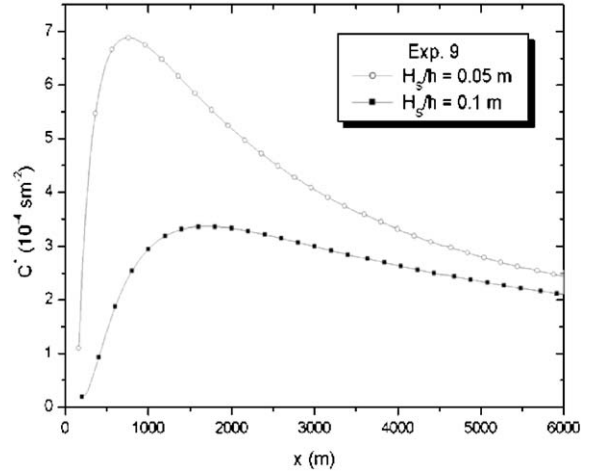


Fig. 3. Crosswind-integrated concentration as a function of source distance for two different non-dimensional source height ($H_s/h = 0.05$ and $H_s/h = 0.1$).

model reproduced fairly well the observed concentration. Fig. 2 shows the vertical profile of concentration ($C^* = c/Q$) at various downstream distances ($x = 1000 \text{ m}$, $x = 2000 \text{ m}$, $x = 4000 \text{ m}$ and $x = 6000 \text{ m}$) considering experiment 9 of Copenhagen. The traditional behavior is verified presenting larger values of concentration for short distances, which become smaller with an increase in the downstream distance. Furthermore, with increase of the distance, the tendency is to obtain a homogeneous profile concentration. Fig. 3 shows the ground-level crosswind-integrated concentration as a function of source distance for two different non-dimensional source heights ($H_s/h = 0.05$ and $H_s/h = 0.1$). For the non-dimensional height $H_s/h = 0.05$, an accentuated peak is verified in an area close to the source. With the increase of the non-dimensional source height there is observed a decrease of the peak and a different location of the same. We can observe from these figures that Eq. (19) represents a formula appropriate for the description of dispersion in the near and intermediate fields of an elevated source. Fig. 4 shows the convergence test for the ground-level concentration considering experiment 9 of Copenhagen. We observed promptly the convergence of the results of ground-level concentration of the new model with the increase of the eigenvalues m .

The datasets were applied subsequently to the following statistical indices (Hanna, 1989)

$$\text{Normalized mean square error : NMSE} = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p},$$

$$\text{Fraction of data(\%)} \text{ for } 0.5 : \text{FA2} = \leq (C_p / C_o) \leq 2,$$

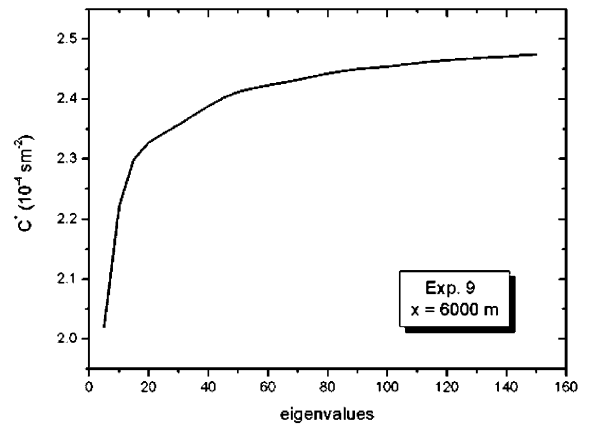


Fig. 4. Convergence of the new model for the experiment 9 of Copenhagen.

$$\text{Correlation coefficient : } R = \overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})} / \sigma_o \sigma_p,$$

$$\text{Fractional bias : } \text{FB} = \overline{C_o} - \overline{C_p} / 0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p}),$$

$$\text{Fractional standard deviations : } \text{FS} = (\sigma_o - \sigma_p) / 0.5(\sigma_o + \sigma_p),$$

where subscripts o and p refer to observed and predicted quantities, respectively, and an overbar indicates an average. The statistical index FB indicates whether the predicted quantities underestimate or overestimate the observed ones. The statistical index NMSE represents the quadratic error of the predicted quantities in relation to the observed ones. Best results are indicated by values nearest zero in NMSE, FB and FS, and nearest 1 in R and FA2.

Table 1

Observed and modeled ground-level crosswind-integrated concentration c/Q at different distances from the source with the convergence test (function of the number of eigenvalues m) of the new model

Eigenvalues (m)	c/Q $x = 1000$ m	c/Q $x = 2100$ m	c/Q $x = 4200$ m	c/Q $x = 6000$ m
5	5.24523	3.77650	2.53846	2.02018
10	6.54669	4.52964	2.87986	2.22102
15	6.80983	4.77731	3.00683	2.29864
20	6.59255	4.81429	3.05062	2.32740
25	6.26806	4.79521	3.07094	2.34311
30	6.04033	4.79312	3.09077	2.35691
35	5.95982	4.82469	3.11634	2.37293
40	5.97581	4.87491	3.14332	2.38848
45	6.00569	4.92085	3.16687	2.40212
50	5.99133	4.94799	3.18343	2.41179
55	5.92299	4.95580	3.19385	2.41844
60	5.82961	4.95386	3.20071	2.42307
65	5.75052	4.95366	3.20732	2.42750
70	5.70892	4.96159	3.21516	2.43227
75	5.70144	4.97672	3.22422	2.43755
80	5.70592	4.99324	3.23299	2.44250
85	5.69878	5.00527	3.24028	2.44674
90	5.66981	5.01049	3.24550	2.44989
95	5.62580	5.01096	3.24932	2.45238
100	5.58308	5.01102	3.25273	2.45458
105	5.55543	5.01420	3.25667	2.45701
110	5.54561	5.02116	3.26125	2.45966
115	5.54519	5.02983	3.26607	2.46240
120	5.54159	5.03711	3.27034	2.46483
125	5.52667	5.04112	3.27370	2.46684
130	5.50138	5.04212	3.27619	2.46839
135	5.47390	5.04224	3.27837	2.46979
140	5.45332	5.04373	3.28074	2.47124
145	5.44361	5.04755	3.28357	2.47291
150	5.44151	5.04779	3.28666	2.47466
C (observed)	—	4.58	3.11	2.59

Table 1 shows the behavior of the results as a function of the number of eigenvalues m of the pollutant concentration normalized by the emission rate (c/Q) for different distances of the source. It is verified that the solution converges presenting good agreement with the experimental results.

Table 2 shows the statistical analysis of the new model compared with other models considering the moderately unstable experiments of Copenhagen. The ADMM model of Vilhena et al. (1998) was obtained by a Laplace transform technique with numerical inversion considering the PBL as a multi-layer system where in each layer the eddy diffusivity and wind are constants. The second one is the KAPPA-G model (Tirabassi et al., 1986) in which both wind and eddy diffusivity follow a power law profile. The KAPPA-G model is based on the Demuth (1978) solution of the advection–diffusion equation that use Bessel functions and modified Bessel function of the first kind and order. The statistical indices point out that a good agreement is obtained

Table 2

Statistical evaluation of models results for ground-level concentration

Models	NMSE	COR	FA2	FB	FS
New model	0.06	0.92	1.00	−0.14	−0.02
ADMM	0.07	0.90	1.00	0.06	0.23
KAPPA-G	0.21	0.84	0.96	0.29	0.48

between experimental data and the new model. Analysing the statistical indices in Table 2 it is possible to notice that the new model simulates satisfactorily the observed concentrations, with NMSE, FB and FS values relatively near zero, R relatively near to 1 and FA2 equal to 1. The ADMM model present similar results. Both models present better performance than the KAPPA-G model.

In the previous paragraph, an attempt has been made to validate the new model with the available data in the

Copenhagen experiment for ground-level crosswind-integrated concentrations. It has been found that the present model simulated well the observations. However, the data sets used are primarily from a tall stack in moderately unstable conditions. Thus, the model needs to be further validated with the availability of diffusion data from other experiments that include all stability conditions.

5. Conclusions

To better understand the importance of researching analytical solutions of the advection–diffusion equation in order to simulate the pollutant dispersion in the PBL, we must look for the possible sources of error either in the modeling or in the numerical simulation of the pollutant concentration. Regarding the first item, we need to recall that the discussed advection–diffusion equation is a mathematical description of the physical phenomena of pollutant dispersion in the PBL, assuming the K-theory model (first-order closure) for the turbulence, wind velocity as well considering the eddy diffusivity proposed by Degrazia et al. (1997) depending on height z . Besides these uncertainties and also the incomplete understanding of the turbulence phenomena, we have also to take into account the error inherent in the mathematical method adopted to solve the advection–diffusion equation. Here appears the relevance of the analytical solution. Indeed, bearing in mind the exactness of the analytical solution, we may state that the pollutant concentration calculation by this kind of solution is free of error except for the round-off error. Therefore, the error in this work is essentially restricted to the uncertainties posed in the model. Now we are in a position to comment on some additional advantages of the analytical solution. First of all, it is now possible to control, by the methodology proposed, the accuracy of the results by regulating the number terms in the series solution summation. This assertion is bolstered by the results given in Table 1. Indeed, increasing the number of the summation terms in the series solution, we observe an increasing coincidence of the number of significant digits between the solutions with number of terms summation differing by unity. Furthermore, taking a closer look at the results given in Table 2 we promptly realize that as expected, a very good agreement, from a statistical point of view, is achieved between the semi-analytical (Laplace transform technique) and analytical (GILTT approach) results when compared with experimental data. Finally, from the above discussion, in the future we intend to focus our attention on the issue of modeling improvement. We propose, initially to look for other stability and turbulence parameterizations as well in taking into consideration the ground level geometry using confor-

mal transformation. We intend to solve the three-dimensional advection–diffusion equation by this methodology. We hope our discussions have shown the aptness of the proposed analytical method to solve more realistic physical problems of pollutant dispersion in the PBL.

Acknowledgments

The authors thank CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) and FAPERGS (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul) for the partial financial support of this work. We thank Prof. M. Thompson for reading the paper and his comments.

References

- Batchelor, G.K., 1949. Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis. *Australian Journal of Science Research* 2, 437–450.
- Berkowicz, R.R., Olesen, H.R., Torp, U., 1986. The Danish Gaussian air pollution model (OML). Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. In: De Wispelare, C., Schiermeirier, F.A., Gillani, N.V. (Eds.), *Air Pollution Modeling and its Application*. Plenum Publishing Corporation, pp. 453–480.
- Blackadar, A.K., 1997. *Turbulence and Diffusion in the Atmosphere: Lectures in Environmental Sciences*. Springer, Berlin.
- Cotta, R., Mikhaylov, M., 1997. *Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation*. Wiley, Baffins Lane, Winchester, England.
- Degrazia, G.A., Campos Velho, H.F., Carvalho, J.C., 1997. Non-local exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. *Control Atmospheric Physics*, 57–64.
- Degrazia, G.A., Moreira, D.M., Vilhena, M.T., 2001. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology* 40, 1233–1240.
- Demuth, C.A., 1978. Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. *Atmospheric Environment* 12, 1255–1258.
- Gryning, S., Holtslag, A., Irwing, J., Silversten, B., 1987. Applied dispersion modeling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment* 21, 79–89.
- Hanna, S.R., 1989. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment* 23, 1385–1395.
- Mangia, C., Moreira, D.M., Schipa, I., Degrazia, G.A., Tirabassi, T., Rizza, U., 2002. Evaluation of a new eddy diffusivity parameterization from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. *Atmospheric Environment* 36, 67–76.

- Moreira, D.M., Degrazia, G.A., Vilhena, M.T., 1999. Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model. *Nuovo Cimento* 22C, 685–691.
- Pasquill, F., Smith, F.B., 1983. *Atmospheric Diffusion*. Wiley, New York.
- Paulson, C.A., 1970. The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in unstable atmospheric surface layer. *Journal of Applied Meteorology* 9, 857–861.
- Segatto, C.F., Vilhena, M.T., 1999. The state of art of the LTS_N method, *Proceedings of Mathematics and Computational, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, Madrid, pp. 1618–1631.
- Seinfeld, J.H., 1986. *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*. Wiley, New York.
- Sharan, M., Singh, M.P., Yadav, A.K., 1996. Mathematical model for atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. *Atmospheric Environment* 30, 1137–1145.
- Tirabassi, T., Tagliazucca, M., Zannetti, P., 1986. KAPPA-G, a non-Gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements. *JAPCA* 36, 592–596.
- van Ulden, A.P., 1978. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. *Atmospheric Environment* 12, 2125–2129.
- Vilhena, M.T., Rizza, U., Degrazia, G.A., Mangia, C., Moreira, D.M., Tirabassi, T., 1998. An analytical air pollution model: development and evaluation. *Contribution to Atmospheric Physics* 71, 315–320.
- Wortmann, S., 2003. *Formulação semi-analítica para a equação transformada resultante da aplicação da GITT em problemas difusivos-advectivos*. Ph.D. Thesis, Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil, 94pp.

Erratum

Erratum to “A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL” [Atmos. Environ. 39 (2005) 2171–2178]

S. Wortmann^a, M.T. Vilhena^a, D.M. Moreira^{b,*}, D. Buske^a

^aUniversidade Federal do Rio Grande Do Sul, PROMEC, Porto Alegre, RS, Brazil

^bULBRA, Universidade Luterana do Brasil, Environmental Engineering, Engenharia Ambiental, Rua Miguel Tostes, 101 Predio 11-Sala 230, Bairro Sao Luis-Canoas, RS 92420-280, Brazil

The publisher regrets that the incorrect results were published on p. 2173, vol. 39, the correct information is reproduced below.

... results in

$$\int_0^h \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(0) U \Psi_i \Psi_j}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} dz = \int_0^h \frac{Q \delta(z - H_s)}{N_j^{1/2}} dz.$$

Then, using Eq. (6) and performing the due substitutions and integrations the boundary conditions are

$$c_i(0) = \frac{Q \Psi_j(H_s) A^{-1}}{N_j^{1/2}},$$

where A^{-1} is the inverse matrix of A given by

$$a_{i,j} = \int_0^h \frac{U \Psi_i \Psi_j}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} dz.$$

The transformed problem represented by Eq. (11) can be solved by the Laplace Transform technique and diagonalization (Segatto et al., 1999; Wortmann, 2003). First, transforming x into s and Y into \bar{Y} the equation becomes

$$s \bar{Y}(s) - Y(0) + F \bar{Y}(s) = 0, \quad (12)$$

where the overbar represents the transformed potential. ...

DOI of original article: [10.1016/j.atmosenv.2005.01.003](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2005.01.003)

*Corresponding author. Tel.: +55 51 477 9258; fax: +55 51 477 1313.

E-mail address: Davidson@ulbra.tche.br (D.M. Moreira).

APÊNDICE VIII

Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method

Artigo publicado na revista Atmospheric Environment, volume 39, numero 34, páginas 6290-6295, no ano de 2005.

Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method

D.M. Moreira^{a,*}, M.T. Vilhena^b, T. Tirabassi^c, D. Buske^b, R. Cotta^d

^aUniversidade Luterana do Brasil–ULBRA, Rua Miguel Tostes, PPGEAM, 101 Prédio 11-Sala 230, CEP 92420-280, Bairro São Luís, Canoas, RS, Brazil

^bUniversidade Federal do Rio Grande do Sul, PROMEC, Porto Alegre, Brazil

^cInstitute ISAC, CNR, Bologna, Italy

^dUniversidade Federal do Rio de Janeiro, Engenharia Mecânica, Rio de Janeiro, Brazil

Received 4 March 2005; received in revised form 20 June 2005; accepted 2 July 2005

Abstract

In this work we present the GILTT method for the solution of the advection–diffusion equation utilizing an eddy diffusivity depending on source distance. With this new approach, where no approximation is made along the solution derivation so that it is an exact solution except for the round-off error due to the stepwise approximation of the eddy diffusivity in the x variable, it is possible to simulate the pollutant dispersion in the Planetary Boundary Layer. The present study reinforces that the inclusion of the memory effect, important in near regions from an elevated continuous point source, improves the description of the turbulent transport process of atmospheric pollutants.

© 2005 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords: GILTT; Laplace transform; Atmospheric dispersion; Analytical solution; Advection–diffusion equation; Planetary boundary layer

1. Introduction

The Eulerian approach for modelling the statistical properties of the concentrations of contaminants in a turbulent flow as the Planetary Boundary Layer (PBL) is widely used in the field of air pollution studies. Within this frame, the advection–diffusion equation that describes the crosswind integrated concentrations arising from continuous point source can be written as

$$U(z) \frac{\partial c}{\partial x} = - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + Q, \quad (1)$$

where c is the crosswind-integrated concentration, $U(z)$ is the mean horizontal wind speed, $\overline{w'c'}$ is the vertical turbulent contaminant flux and Q is the sink/source term. Molecular diffusion has been neglected and a steady-state condition assumed. Moreover, as usual, the along-wind diffusion is neglected because it is considered less with respect to the advection.

One of the most widely used closures for Eq. (1) is based on the gradient transport hypothesis which, in analogy to molecular diffusion, assumes that turbulence causes a net movement of material down the gradient of material concentration at a rate which is proportional to the magnitude of the gradient (Pasquill and Smith, 1983):

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial c}{\partial z}, \quad (2)$$

*Corresponding author. Tel.: +55 (51) 477 9285;

fax: +55 (51) 477 1313.

E-mail address: davidson@ulbra.tche.br (D.M. Moreira).

where K_z is the vertical eddy diffusivity which must be evaluated using empirical data.

The simplicity of the K -theory of turbulent diffusion has led to the widespread use of this theory as mathematical basis for simulating urban photochemical pollution. Higher-order closure, physically more realistic, are still impractical because it is computationally expensive for most photochemical models which include several equations simulating the chemical reactions among the multitude of pollutant species.

Moreover, we have to consider that K -closure has its own limits. In contrast to molecular diffusion, turbulent diffusion is scale dependent. This means that the rate of diffusion of a cloud of material generally depends on the cloud dimensions and the intensity of turbulence. As the cloud grows, larger eddies are incorporated in the expansion process, so that a progressively larger fraction of turbulent kinetic energy is available for the cloud expansion. However, eddies much larger than the cloud itself are relatively unimportant in its expansion. So, the gradient-transfer theory works well when the dimension of dispersed material is much larger than the size of turbulent eddies involved in the diffusion process, i.e. for ground-level releases and for large travel times. Strictly speaking, one should introduce a diffusion coefficient function not only of atmospheric stability and release height, but also of travel time or distance from source.

In fact, in statistical diffusion theory, Taylor (1921) pointed out that turbulent diffusion differs in the near and far regions from a continuous point source. In proximity of the source, fluid particles retain their memory of their initial turbulent environment. For long travel times, this memory is lost, and air pollution follow only the local properties of turbulence (Batchelor, 1949).

In the last years (Tirabassi, 2003) special attention has been devoted to the task of searching analytical solutions for the advection–diffusion Equation (1). Recently, a general solution (Wortmann et al., 2005) of two-dimensional steady-state advection–diffusion equation using the General Integral Transform Technique (GITT), a well-known hybrid method that had solved a wide class of direct and inverse problems mainly in the area of Heat Transfer and Fluid Mechanics (Cotta, 1993; Cotta and Mikhaylov, 1997; Cheroto et al., 1999; Alves et al., 2002; Magno et al., 2002; Neto et al., 2002; Pereira et al., 2002 and Cotta et al., 2003), was presented. The main steps of this method include the construction of the auxiliary Sturm–Liouville problem associated to the original problem, the determination of the integral transform technique in a series, using the eigenfunction of the solved Sturm–Liouville problem as basis, the replacement of this expansion in the original problem and taking moments. This procedure leads to a set of ordinary differential equations, which is classically solved by numerical methods. In contrast, the present authors, analytically

solved the GITT transformed problem employing the Laplace Transform technique without any approximation along its derivation. This method (Wortmann et al., 2005) has been coined as GILTT approach (Generalised Integral Laplace Transform Technique).

The aim of this work is to extend the analytical solution presented by Wortmann et al. (2005) to an eddy diffusivity depending on source distance. For this purpose we use the turbulent parameterisation proposed by Degrazia et al. (2001), where the exchange coefficients are functions of distance (travel time). Moreover, comparing the evaluated results with experimental data, we evaluate the improvements in performances that are possible to obtain using the inclusion of the memory effect in turbulent transport processes.

The paper is outlined as follows: in Section 2, we report the derivation of the GILTT solution for the two-dimensional advection–diffusion equation. In Section 3, the turbulent parameterisation assumed in this work is presented. In Section 4, the numerical results attained by the new analytical method as well the comparison with experimental data are reported, and finally, in Section 5, we have the conclusions.

2. The GILTT method

From Eqs. (1) and (2) we have

$$U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right). \quad (3)$$

Moreover, we introduce the usual boundary conditions of zero flux at the ground and PBL top, and a source with an emission rate Q at height H_s :

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{at } z = 0, h, \quad (4a)$$

$$Uc(0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{at } x = 0, \quad (4b)$$

where h is the unstable boundary layer height, U is the wind speed in the x direction and K_z is the vertical eddy diffusivity.

To solve problem (3) by the GILTT method we rewrite Eq. (3) as

$$U \frac{\partial c}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \frac{\partial c}{\partial z} \quad (5)$$

and we construct the following associated Sturm–Liouville problem (Wortmann et al., 2005):

$$\Psi_i''(z) + \lambda_i^2 \Psi_i(z) = 0 \quad \text{at } 0 < z < h, \quad (6a)$$

$$\Psi_i'(z) = 0 \quad \text{at } z = 0, h \quad (6b)$$

which has the well-known solution:

$$\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z), \quad (7)$$

where the eigenvalues λ_i are given by $\lambda_i = i\pi/h$ for $i = 0, 1, 2, 3, \dots$. Furthermore, the eigenfunctions $\Psi_i(z)$ satisfy the ensuing orthonormality condition:

$$\frac{1}{N_m^{1/2} N_n^{1/2}} \int_v \Psi_m(z) \Psi_n(z) dv = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}, \quad (8)$$

where N_m is expressed by

$$N_m = \int_v \Psi_m^2(z) dv. \quad (9)$$

Having solved the Sturm–Liouville problem (8), we are in position to construct the GILTT transform formula, which has the form

$$c(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}. \quad (10)$$

Now, replacing the above ansatz in Eq. (5) we have

$$U \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x) \Psi_i(z)}{N_i^{1/2}} = K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi''_i(z)}{N_i^{1/2}} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \Psi'_i(z)}{N_i^{1/2}}. \quad (11)$$

Here we adopt the prime notation for the first derivative and double prime notation for the second derivative. Multiplying Eq. (11) by $\Psi_j(z)/N_j^{1/2}$ and integrating from z equals zero to h , we read:

$$\begin{aligned} & - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}'_i(x)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h U \Psi_i \Psi_j dz \\ & - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x) \lambda_i^2}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h K_z \Psi_i \Psi_j dz \\ & + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} \int_0^h \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \Psi'_i \Psi_j dz = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

for $i = 0, 1, 2, \dots, N$. Here the novelty regarding the work of Wortmann et al. (2005) appears. Indeed, in this work by the GILTT approach, Eq. (12) reduces to an ordinary differential equation with variable coefficients, because the eddy diffusivity depends on the x variable. Therefore, rewriting Eq. (12) in matrix fashion, we read

$$Y'(x) + F(x)Y(x) = 0, \quad (13)$$

where $Y(x)$ is the column vector whose components are $\bar{c}_i(x)$ and the matrix F is defined like $F = B^{-1}E$. Here the entries of matrices B and E are, respectively, given by

$$b_{i,j} = \int_0^h U \Psi_i \Psi_j dz \quad (14)$$

and

$$e_{i,j} = \int_0^h \frac{\partial K_z}{\partial z} \Psi'_i \Psi_j dz - \lambda_i^2 \int_0^h K_z \Psi_i \Psi_j dz. \quad (15)$$

Therefore, we may say that we extend this methodol-

ogy for the solution of a more general linear ordinary differential equation having the entries of the matrix F varying with the x variable. Indeed, to solve Eq. (13) by the Laplace transform technique, likewise the work of Moreira et al. (2005), we perform a stepwise approximation of the entries of the matrix $F(x)$ by taking average values for the eddy diffusivity and its derivative in the x variable for each sub-domain. It turns out that problem (13) simplified to

$$Y'(x) + FY(x) = 0. \quad (16)$$

Now F is a matrix with constant components for each of the sub-domain considered. Henceforth the previous solution obtained by Wortmann et al. (2005) can be applied in a straightforward manner.

Transforming the boundary condition (4b) by a similar procedure, we mean, multiplying the boundary condition (4b) by $\Psi_j(z)/N_j^{1/2}$ and integrating from z equals zero to h , we obtain

$$\int_0^h \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(0) U \Psi_i \Psi_j}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} dz = \int_0^h \frac{Q \delta(z - H_s) \Psi_j}{N_j^{1/2}} dz. \quad (17)$$

Using the orthonormality property of the eigenfunctions, and the integration property of the generalised delta function, we get the following transformed boundary condition:

$$c_i(0) = \frac{Q \Psi_j(H_s)}{N_j^{1/2}} A^{-1}, \quad (18a)$$

where A is the matrix given by

$$a_{i,j} = \int_0^h \frac{U \Psi_i \Psi_j}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} dz \quad (18b)$$

and, for U constant,

$$c_0(0) = \frac{Q \Psi_0(H_s)}{U \sqrt{h}} \quad \text{for } i = 0, \quad (19a)$$

$$c_i(0) = \frac{Q \Psi_i(H_s)}{U \sqrt{h/2}} \quad \text{for } i \neq 0 \quad (19b)$$

for i ranging from 1 to N . The transformed problem represented by Eq. (16) can be solved by the Laplace Transform technique and diagonalisation (Segatto and Vilhena, 1999.; Wortmann, 2003). First, transforming x into s and Y into \bar{Y} the equation becomes

$$s \bar{Y}(s) - Y(0) + F \bar{Y}(s) = 0, \quad (20)$$

where the overbar represents the transformed potential.

The matrix F is decomposed into eigenvectors and eigenvalues as

$$F = XDX^{-1}, \quad (21)$$

where X is the matrix of the eigenvectors and D is the diagonal matrix of the eigenvalues of F . This procedure

is valid when the eigenvalues of the matrix F are different and not null.

Then, Eq. (16) becomes:

$$s\bar{Y}(s) - Y(0) + XDX^{-1}\bar{Y}(s) = 0 \quad (22a)$$

or

$$(sI + XDX^{-1})\bar{Y}(s) = Y(0), \quad (22b)$$

where I is the matrix identity. Given that $XX^{-1} = I$, we can write

$$X(sI + D)X^{-1}\bar{Y}(s) = Y(0). \quad (23)$$

Multiplying both sides of Eq. (23) for X^{-1} and $(sI + D)^{-1}$ we obtain

$$\bar{Y}(s) = X(sI + D)^{-1}X^{-1}Y(0). \quad (24)$$

An alternative procedure for the inversion of the matrix X is suggested by Segatto and Vilhena (1999). Firstly, one determines the vector $\xi(X^{-1}Y(0))$. Substituting in Eq. (21) the result is

$$\bar{Y}(s) = X(sI + D)^{-1}\xi, \quad (25)$$

where ξ is found by solving the equation $X\xi = Y(0)$, and calculating using the LU decomposition, whose cost of computation is smaller than an inversion of matrix. The elements of the matrix $(sI + D)$ have the form $\{s + d_i\}$ where d_i are the eigenvalues of the matrix F given in Eq. (11). It is known that the inverse of a diagonal matrix is the inverse of their elements; in other words, the elements of $(sI + D)^{-1}$ are $1/(s + d_i)$ whose transformed inverse of Laplace is $e^{-d_i x}$. $G(x)$ being the diagonal matrix with elements $e^{-d_i x}$ the final solution is given by

$$Y(x) = XG(x)\xi. \quad (26)$$

Then the form of the inverse is given by

$$c(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_i(x)\Psi_i(z)}{N_i^{1/2}}, \quad (27)$$

where $\Psi_i(z)$ is obtained from the problem of Sturm–Liouville given by Eq. (6) and $\bar{c}_i(x)$ comes from the solution of the transformed problem given by Eq. (16). Therefore, we construct a solution for the two-dimensional steady-state advection–diffusion for the eddy diffusivity coefficient having a continuous dependence on z and piecewise dependence on x .

The justificative for the adopted approach stems from the simplicity resulting from the straightforward application of the formulation for concentration encountered by Wortmann et al. (2005). Furthermore, besides simplicity, no additional computational effort is required to evaluate the concentration, when the eddy diffusivity depends on x and z . We are aware that this procedure is an approximation, but it improves the results as shown later on.

3. Turbulent parameterisation

The vertical eddy diffusivity, for convective and moderately unstable conditions, described in terms of energy-containing eddies and function of the downwind distance X and the height z can be written as follows (Degrazia et al., 2001):

$$\frac{K_z}{w_*h} = 0.12\psi^{1/3} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right) \right]^{4/3},$$

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin[3.17\{1 - \exp(-4z/h) - 0.0003 \exp(8z/h)\}^{-2/3} \psi^{1/3} Xn']}{(1+n')^{5/3}} \times \frac{dn'}{n'}, \quad (28)$$

where X is a nondimensional distance $X = xw_*/Uh$, w_* is the convective velocity scale and h is the top of the CBL.

The dissipation function ψ according Højstrup (1982), has the following form

$$\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-2/3} + 0.75 \right]^{1/2}, \quad (29)$$

where L is the Monin–Obukhov length in the surface layer.

The formula, appropriate for far source distance, reads as (Degrazia et al., 2001):

$$\frac{K_z}{w_*h} = 0.19\psi^{1/3} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right) \right]^{4/3}. \quad (30)$$

For a given height, the K_z/w_*h as given by Eq. (28) is initially zero, increases with X at first linearly and then more slowly, and finally tends to a constant value that can be obtained from Eq. (30). Thus, in this study we introduce the vertical eddy diffusivities (28) and (30) in the new air pollution model to simulate the ground-level crosswind-integrated concentrations of contaminants released from an elevated continuous source in an unstable PBL.

4. Experimental data and evaluation of the model

The performance of the present model has been evaluated against experimental crosswind ground-level concentrations using tracer SF₆ data from dispersion experiments carried out in the northern part of Copenhagen, which is described in Gryning et al. (1987). The tracer was released without buoyancy from a tower at a height of 115 m, and collected at ground-level positions at a maximum of three crosswind arcs of tracer sampling units. The site was mainly residential with a roughness length of the 0.6 m. The wind speed profile used in the air pollution model has been parameterised following the similarity theory of

Monin–Obukhov and OML model (Berkowicz et al., 1986) where the stability function is given by (Paulson, 1970).

Fig. 1 shows the observed and predicted scatter diagram of crosswind ground-level concentrations using approach (27) with vertical eddy diffusivity given by Eqs. (28) and (30). In this respect, it is important to note that the model reproduced the observed concentration fairly well. We can observe from this figure that Eq. (28) represents a formula appropriate to describe dispersion in the near and intermediate fields of an elevated source.

Table 1 shows the statistical analysis (Hanna, 1989) of the new model compared with the ADMM model considering the moderately unstable experiments of Copenhagen. The ADMM model (Vilhena et al., 1998; Moreira et al., 1999, 2005; Degrazia et al., 2001; and Mangia et al., 2002) was obtained by a Laplace Transform technique with numerical inversion consider-

ing the PBL as a multilayer system where the eddy diffusivity and wind are constants in each layer. The main feature of this method relies on the following steps: stepwise approximation of the eddy diffusivity and wind speed, the Laplace transform application to the advection–diffusion equation in the x variable, semi-analytical solution of the set of linear ordinary equation resulting for the Laplace transform application and construction of the pollutant concentration by the Laplace transform inversion using the Gaussian quadrature scheme. The ADMM model, dividing the PBL in different layers, the contrary to the present model, uses a vertical discrete profile of K_z .

The statistical indices point out that a good agreement is obtained between experimental data and the new model. Analysing the statistical indices in Table 1 it is possible to notice that the new model simulate very well the observed concentrations, with $NMSE$, FB and FS values relatively near to zero, R relatively near to 1 and $FA2$ equal to 1. It is observed quickly that the simulations that use the eddy diffusivity depending of the source distance present the best results, mainly for the GILTT method.

5. Conclusions

The statistical analysis of the results shows a good agreement between the results of the proposed approach with the experimental ones and ADMM results. Furthermore, it is important to emphasise that the results obtained with the eddy diffusivity depending on the source distance (Eq. (28)) are better than the ones reached with asymptotic eddy diffusivity (Eq. (30)), valid only for the far field of an elevated source. The present analysis reinforces the previous work of the authors that the inclusion of the memory effect as modeled by Taylor’s theory, improves the description of the turbulent transport process of atmospheric effluent released by an elevated continuous point source.

Bearing in mind the exactness of the analytical solution, in the sense no approximation is made along its derivation, we are confident to point out that the

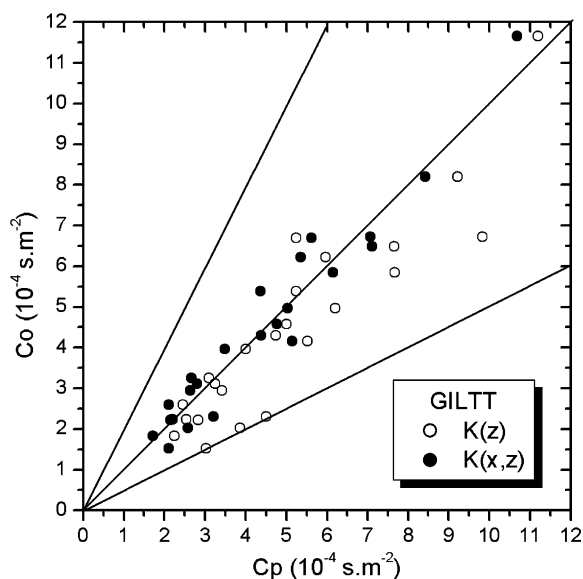


Fig. 1. Observed (C_o) and predicted (C_p) crosswind ground-level integrated concentration, normalised with emission (c/Q), scatter diagram for the new model with eddy diffusivities given by $K(z)$ and $K(x,z)$. Lines indicate a factor of two.

Table 1

Results of statistical indices used to evaluate the model performance, where subscripts o and p refer to observed and predicted quantities

			GILTT $K(z)$	GILTT $K(x,z)$	ADMM $K(z)$	ADMM $K(x,z)$
NMSE	Normalised mean square error	$\frac{(C_o - C_p)^2}{C_o C_p}$	0.07	0.02	0.16	0.06
FA2	Fraction of data (%) for	$0.5 \leq (C_p/C_o) \leq 2$	1.00	1.00	1.00	1.00
R	Correlation coefficient	$\frac{(C_o - \bar{C}_p)(C_p - \bar{C}_o)}{\sigma_o \sigma_p}$	0.90	0.97	0.89	0.89
FB	Fractional bias	$\frac{C_o - \bar{C}_p}{0.5(C_o - \bar{C}_p)}$	0.09	0.01	0.28	0.03
FS	Fractional standard deviations	$(\sigma_o - \sigma_p)/0.5(\sigma_o + \sigma_p)$	0.09	0.05	0.27	0.10

pollutant concentration calculation by this kind of solution is free of error except for the round-off error due the stepwise approximation of the eddy diffusivity in the x variable. Therefore, the error in this work is restricted to the uncertainties posed in the model. Besides, in this work the linear transformed problem is an ordinary differential equation with variable coefficients so that we extend this methodology in the solution of a more general linear ordinary differential equation. Taking a closer look at the results reported in Table 1 we realise, as expected, that a very good agreement, under statistical point of view, be achieved between the semi-analytical ADMM model and analytical (GILTT approach) results when compared with experimental data.

Finally, it is important to mention that the GILTT method and the eddy diffusivity, expressed by (Eq. (28)), depending on source distance and valid for a nonhomogeneous turbulence, are suitable for application in diffusion atmospheric problems.

Acknowledgments

The authors thank CNPq and FAPERGS for the financial support of this work.

References

- Alves, L.S., Cotta, R.M., Pontes, J., 2002. Stability analysis of natural convection in porous cavities through integral transforms. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45, 1185–1195.
- Batchelor, G.K., 1949. Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis. *Australian Journal of Science Research* 2, 437–450.
- Berkowicz, R.R., Olesen, H.R., Torp, U., 1986. The Danish Gaussian air pollution model (OML). In: De Wispelare, C., Schiermeier, F.A., Gillani, N.V. (Eds.), *Description, Test and Sensitivity Analysis in View of Regulatory Applications*. Air Pollution Modeling and its Application. Plenum Publishing Corporation, New York, pp. 453–480.
- Cheroto, S., Mikhailov, M.D., Kakaça, S., Cotta, R.M., 1999. Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms. *International Journal of Thermal Science* 38, 613–621.
- Cotta, R.M., 1993. *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*. CRC Press, Boca Raton.
- Cotta, R., Mikhaylov, M., 1997. *Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation*. Wiley, Baffins Lane, Chichester, England.
- Cotta, R.M., Unga, M.J., Mikhailov, M.D., 2003. Contaminant transport in finite fractured porous medium: integral transforms and lumped-differential formulations. *Annals of Nuclear Energy* 30, 261–285.
- Degrazia, G.A., Moreira, D.M., Vilhena, M.T., 2001. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Journal of Applied Meteorology* 40, 1233–1240.
- Gryning, S.E., Holtslag, A.M.M., Irwin, J., Sivertsen, B., 1987. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment* 21, 79–89.
- Hanna, S.R., 1989. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment* 23, 1385–1395.
- Højstrup, J., 1982. Velocity spectra in the unstable boundary layer. *Journal of Atmospheric Science* 39, 2239–2248.
- Magno, R.N., Macêdo, E.N., Quaresma, J.N., 2002. Solutions for the internal boundary layer equations in simultaneously developing flow as power-law fluids within parallel plates channels. *Chemical Engineering Journal* 87, 339–350.
- Mangia, C., Moreira, D.M., Schipa, I., Degrazia, G.A., Tirabassi, T., Rizza, U., 2002. Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. *Atmospheric Environment* 36, 67–76.
- Moreira, D.M., Degrazia, G.A., Vilhena, M.T., 1999. Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model. *Il Nuovo Cimento* 22C, 685–691.
- Moreira, D.M., Rizza, U., Vilhena, M.T., Goulart, A., 2005. Semi-analytical model for pollution dispersion in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment* 39 (14), 2689–2697.
- Neto, H.L., Quaresma, J.N., Cotta, R.M., 2002. Natural convection in three-dimensional porous cavities: integral transform method. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45, 3013–3032.
- Pasquill, F., Smith, F.B., 1983. *Atmospheric Diffusion*. Wiley, New York.
- Paulson, C.A., 1970. The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in unstable atmospheric surface layer. *Journal of Applied Meteorology* 9, 857–861.
- Pereira, L.M., Guerrero, J.S., Brazão, N., Cotta, R.M., 2002. Compressible flow and heat transfer in ultracentrifuges hybrid analysis via integral transforms. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45, 99–112.
- Segatto, C.F., Vilhena, M.T., 1999. The state of art of the LTSN method. In: *Proceedings of Mathematics and Computational, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, Madrid, pp. 1618–1631.
- Taylor, G.I., 1921. Diffusion by continuous movements. *Proceedings of the London Mathematical Society* 20, 196–212.
- Tirabassi, T., 2003. Operational advanced air pollution modeling. *PAGEOPH* 160, 5–16.
- Vilhena, M.T., Rizza, U., Degrazia, G.A., Mangia, C., Moreira, D.M., Tirabassi, T., 1998. An analytical air pollution model: development and evaluation. *Contributions to Atmospheric Physics* 71, 315–320.
- Wortmann, S., 2003. *Formulação semi-analítica para a equação transformada resultante da aplicação da GITT em problemas difusivos-advectivos*, Ph.D. Thesis. Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil, 94pp.
- Wortmann, S., Vilhena, M.T., Moreira, D.M., Buske, D., 2005. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment* 39 (12), 2187–2194.

APÊNDICE IX

Plume descriptors from an analytical solution of the advection-diffusion equation

Artigo apresentado e publicado nos anais da 11th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (Harmo 11) que se realizou na cidade de Cambridge na Inglaterra no período de 02 a 05 de julho de 2007.

PLUME DESCRIPTORS FROM AN ANALYTICAL SOLUTION OF THE ADVECTION-DIFFUSION EQUATION

A. Tiesi¹, D. Buske², C.P. Costa², T. Tirabassi¹,
D.M. Moreira³ and M.T. Vilhena²

¹Institute of Atmospheric Sciences and Climate (ISAC-CNR), Bologna, Italy

²Universidade Federal do Rio Grande do Sul (PROMEC), Porto Alegre, Brazil

³Universidade Federal de Pelotas (UNIPAMPA), Bagé, Brazil

INTRODUCTION

The vertical distribution for a point source plume is studied through the statistical descriptors derived from the analytical solution of the advection-diffusion equation. Traditionally operative modelling for dispersion has been performed adopting a Gaussian approach taking in account atmospheric turbulence assuming simple formulae for concentration distribution, where the parameterization depend simply on downwind distance as well as the meteorological state of ABL (Arya, 1999). Regarding the vertical dispersion the scheme performs adequately for short horizontal distances and for near ground sources only. Within this scheme the low source condition has the effect of the crude approximation of infinite height of the ABL. The Gaussian approach turns out to overestimate the centroid \bar{z} and the variance σ_z^2 when the horizontal distance from the source approaches to the length scale of the real ABL. On the other hand the predicted ground level concentration, regardless the ABL scenario, underestimate the experimental data (Irwin, 1983). In fact, although the ABL is assumed to have infinite height, its real vertical limit affects the behaviour of all evaluated quantities. Non-Gaussian approaches are proved to be more reliable, using more adequate parameterizations of the ABL dynamics (Lin and Hildemann, 1996; Brown and Arya; 1997, Tirabassi, 2003).

One of the central equations to describe the evolution of pollutants in the ABL is the Advection-Diffusion Equation (ADE), which is in most cases solved numerically. In the following is reported a study of the two-dimensional steady concentration distribution and its vertical symmetries obtained using the analytical approach GILTT (General Integral Laplace Transform Technique; Wortmann et al, 2005; Moreira et al., 2005). The analytical solution does not present restriction on the ABL parameterization, it is exact except for a round-off error.

THE GILTT SOLUTION

The stationary ADE solved in two-spatial dimensions is the following:

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

where $C(x, z)$ is the y cross-wind integrated steady state concentration. Boundary conditions impose zero flux at the ground ($z = 0$) and at the ABL height ($z = h$); the emission source is assumed to be point-like and placed at a height h_s above the ground:

$$u(z)c(x, z) = Q\delta(z - h_s); \quad \text{at } x = 0.$$

Here Q is the pollutant emission rate, $u(z)$ is the wind speed in the x direction and $K_z(z)$ is the vertical eddy diffusivity. The analytical method GILTT method consists in applying a series expansion to $C(x, z)$:

$$C(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(x) \psi_i(z),$$

where $\bar{c}_i(x)$ and $\psi_i(z)$ are the solutions of the transformed equation and Sturm-Liouville problem respectively. The resulting transformed equation is then solved, analytically, by applying the Laplace Transform. The infinite series can be truncated when the convergence is limited to a prefixed limit.

THE VERTICAL PLUME DESCRIPTORS

The statistical moments for the vertical distribution are defined as

$$\mu_1 = \frac{\int_0^h zC(x, z)dz}{\int_0^h C(x, z)dz}, \quad (2)$$

for the first moment, and the higher order as

$$\mu_m = \frac{\int_0^h (z - \mu_1)^m C(x, z)dz}{\int_0^h C(x, z)dz}; \quad m = 2, 3, 4. \quad (3)$$

The first two moments represent respectively the centroid and the variance ($\bar{z} = \mu_1$, $\sigma_z^2 = \mu_2$), and the remaining moments are used to define the dimensionless skewness Sk and the kurtosis Ku respectively ($Sk = \mu_3/\sigma^3$, $Ku = \mu_4/\sigma^4$). Finally the analytical expressions are:

$$\bar{z} = \frac{h}{\bar{c}_0(x)\pi^2} \sum_{i=1}^N \frac{\bar{c}_i(x)}{i^2} (\cos i\pi - 1) + \frac{h}{2}, \quad (4)$$

$$\sigma_z^2 = \frac{2h^2}{\bar{c}_0(x)\pi^2} \sum_{i=1}^N \frac{\bar{c}_i(x)}{i^2} \cos i\pi + \frac{h^2}{3} - \bar{z}^2, \quad (5)$$

$$Sk = \frac{3}{\bar{c}_0(x)\pi^2} \left(\frac{h}{\sigma_z}\right)^3 \sum_{i=1}^N \frac{\bar{c}_i(x)}{i^2} \left[\left(1 - \frac{2}{i^2\pi^2}\right) \cos(i\pi) + \frac{2}{i^2\pi^2} \right] + \frac{1}{4} \left(\frac{h}{\sigma_z}\right)^3 - \frac{3\bar{z}}{\sigma_z} - \left(\frac{\bar{z}}{\sigma_z}\right)^3, \quad (6)$$

$$Ku = \frac{4}{\bar{c}_0(x)\pi^2} \left(\frac{h}{\sigma_z}\right)^4 \sum_{i=1}^N \frac{\bar{c}_i(x)}{i^2} \left(1 - \frac{6}{i^2\pi^2}\right) \cos(i\pi) + \frac{1}{5} \left(\frac{h}{\sigma_z}\right)^4 - \frac{4\bar{z}Sk}{\sigma_z} - 6 \left(\frac{\bar{z}}{\sigma_z}\right)^2 - \left(\frac{\bar{z}}{\sigma_z}\right)^4. \quad (7)$$

It is worth to remind that the second moment is often evaluated in respect of the source height h_s , then substituting h_s in place of \bar{z} in the definition (3) and setting $m = 2$, we get

$$\sigma_s^2 = \frac{2h^2}{\bar{c}_0(x)\pi^2} \sum_{i=1}^N \frac{\bar{c}_i(x)}{i^2} \cos i\pi + \frac{h^2}{3} - 2h_s \bar{z} + h_s^2. \quad (8)$$

In the following results both expressions for variance will be used.

THE ABL PARAMETERIZATION

In atmospheric diffusion problems the choice of a turbulent parameterization represents a fundamental decision for the pollutants dispersion modelling. The reliability of each model strongly depends on the way turbulent parameters are determined and related to the current understanding of the ABL. We adopt the parameterizations suggested in Degrazia *et al.* (2000). In terms of the convective scaling parameters the vertical eddy diffusivity can be formulated as

$$K_z = 0.22w_*h \left(\frac{z}{h}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1/3} \left[1 - \exp\left(-4\frac{z}{h}\right) - 0.0003 \exp\left(8\frac{z}{h}\right) \right], \quad (9)$$

and for stable conditions as

$$K_z = \frac{0.3(1 - z/h)u_*z}{1 + 3.7z/\Lambda}, \quad (10)$$

where $\Lambda = L(1 - z/h)^{5/4}$, L is the Monin-Obukhov length, u_* and w_* are the velocity scales for the horizontal friction and vertical convection respectively. The wind speed profile adopted follows the power law expressed as (Panofsky and Dutton, 1988):

$$\frac{\bar{u}_z}{\bar{u}_{z_1}} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^n, \quad (11)$$

where \bar{u}_z and \bar{u}_{z_1} are the mean wind velocity at the heights z and z_1 , while n is an exponent related to turbulence. In fact this empirical wind profile matches well similarity profile in the Surface Layer, and on the contrary is valid in all the ABL. The exponent n depends on the Pasquill stability class and it is shown in Tab. 1.

Table 1 – Table summarizing the quantities used to set the ABL stability regimes identified with the six Pasquill stability classes (capital letters).

	A	B	C	D	E	F
\bar{u} (ms^{-1})	1.5	2.5	4	4.5	3.5	2.5
u_* (ms^{-1})	0.1	0.17	0.25	0.26	0.16	0.09
L_{MO}^{-1} (m^{-1})	-0.14	-0.09	-0.03	0	0.03	0.14
n	0.07	0.07	0.1	0.015	0.35	0.55

RESULTS

In Fig. 1 are reported the vertical descriptors versus x/h , for a weakly convective ABL regime and for six emissions heights h_s/h . For each curve the long distance values approach to a common asymptotic value, regardless the source height. The Sk and the Ku plots show a nearly Gaussian symmetry already at short distances, this is particularly manifest in the high source emissions. On the other hand low source curves manifest a strong terrain influence.

It is possible to see the dependence of the maximum ground concentration on the source height in Fig. 2. The Gaussian approach shows a dependence of C_{max} from the square of source height. The two curves $(h_s/h)^{(-1)}$ and $(h_s/h)^{(-2)}$ allow a qualitative comparison of the GILTT results with the Brown et al. (1997) non Gaussian results where is shown that at the ground level $C_{max} \propto h_s^{-\alpha}$ with $1 \leq \alpha \leq 2$.

In Fig. 3 is shown a comparison between the GILTT standard deviations and the Briggs empirical curves (Arya, 1999). Four different source height h_s/h are considered. The plots show that at short horizontal distances from the source there is a reasonable agreement between curves, at large out-sized discrepancies arise. An exception occur for the neutral case D, where the agreement reaches the best extent. It is known that empirical curves are drawn assuming Gaussian plume symmetry, furthermore these results depends on the choice of the ABL, which is set unlimited. This assumption is clearly unrealistic, nonetheless such empirical curves are extensively adopted when operative applications are concerned. A further remark regards the dependency on the source height h_s . Model results highlight their high susceptibility on σ_s , feature not really clear when looking at the empirical curves.

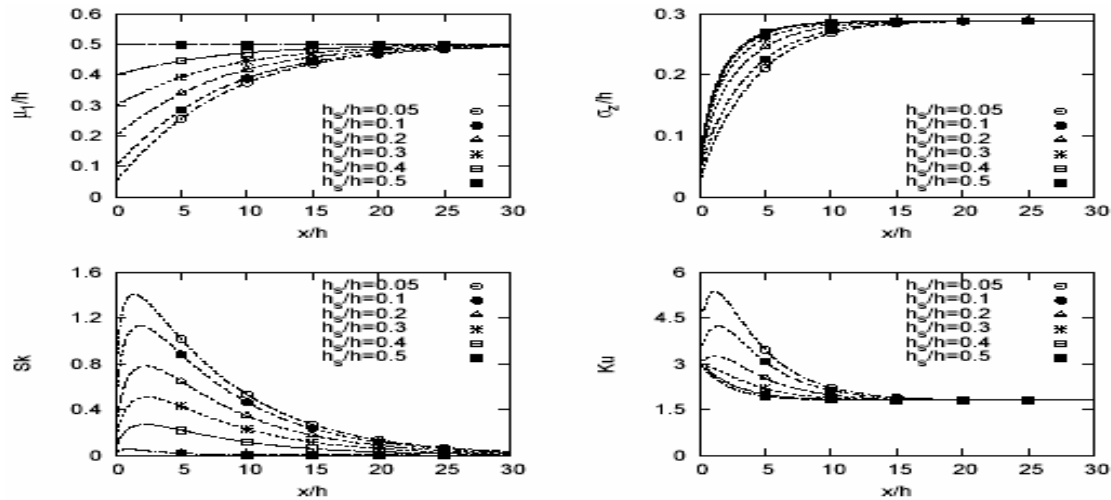


Figure 1 – Symmetries for the vertical distribution. Curves refer to six emission heights $h_s / h = 0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$, ABL regime is C (see Tab. 1).

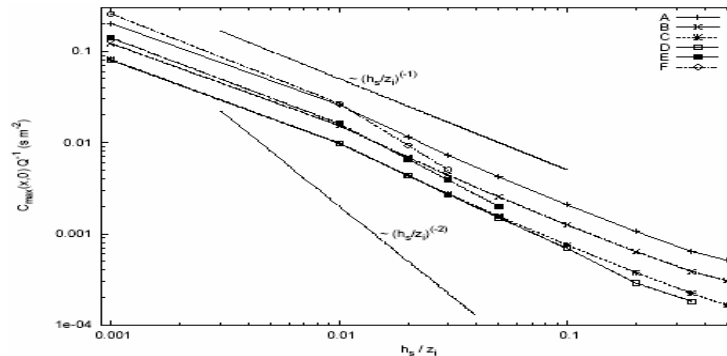


Figure 2 – Plots of $c_{\max}(x,0) \cdot Q^{-1}$ versus the dimensionless distance h_s/h . The two curves $\propto (h_s/h)^{-2}$ and $\propto (h_s/h)^{-1}$ are also shown.

CONCLUSIONS

Using an analytical solution of the two-dimensional steady ADE for a point source release, expressions for vertical plume symmetries have been derived. Moreover it was possible to easily evaluate the position and value of maximum ground concentration. Special emphasis has been devoted to \bar{z} and σ_z^2 (and σ_s^2) because of their great operative concern.

The behaviour of the plume vertical standard deviation was outlined and compared with some very popular empirical ones, used in many operative air pollution models. It was outlined a general discrepancy occurs. It is evident that empirical formulae for σ_s need to take into account the height of the source release h_s and the height of the ABL h . The formulae here presented can be useful for operative evaluation of atmospheric dispersion and a better understanding of advection-diffusion phenomena.

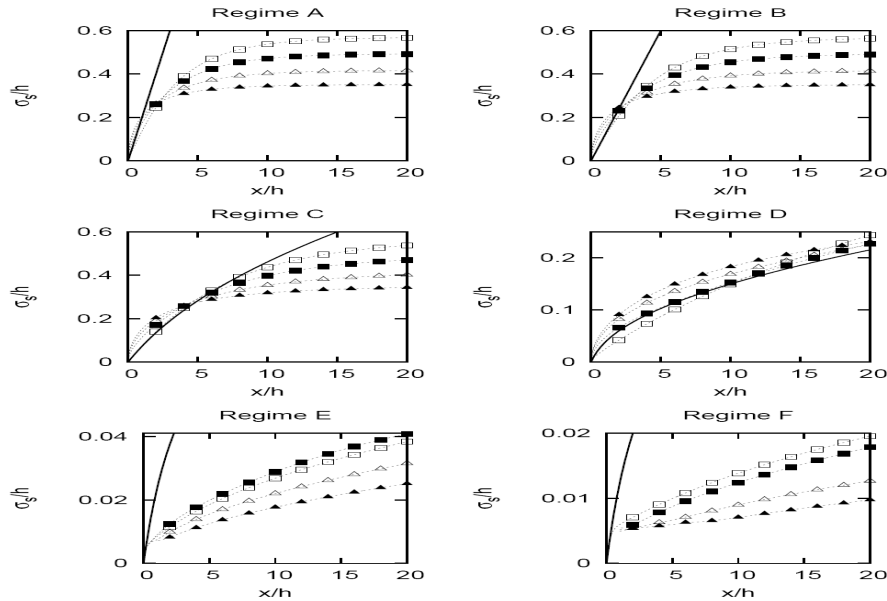


Figure 3 – Plots of σ_s/h for the six stability classes of the ABL. For each class the σ_s is evaluated for source height $h_s/h = 0.01$ (empty squares), 0.1 (black squares), 0.2 (empty triangles) and 0.3 (black triangles).

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors thank CNPq and CAPES and the project “Laboratorio LaRIA” for the partial financial support of this work.

REFERENCES

- Arya, S.P., 1999: Air Pollution Meteorology and Dispersion, Oxford University Press, UK.
- Brown, M.J., S.P. Arya and W.H. Snyder, 1997: Plume descriptors derived from a non-Gaussian concentration model. *Atmos. Env.*, **31**, 183-189.
- Degrazia, G.A., D. Anfossi, J.C. Carvalho, C. Mangia, T. Tirabassi, H.F.C. Velho, 2000: Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. *Atmos. Env.*, **34**, 3575-3583.
- Irwin, J.S., 1983: Estimating plume dispersion – a comparison of several sigma schemes. *J. Climate Appl. Meteorol.*, **22**, 92-114.
- Lin, J.S. and L.M. Hildemann, 1996: Analytical solutions of the atmospheric diffusion equation with multiple sources and height-dependent wind speed and eddy diffusivities. *Atmos. Env.*, **30**, 239-254.
- Moreira, D.M., M.T. Vilhena, T. Tirabassi, D. Buske and R.M. Cotta, 2005: Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method. *Atmos. Env.*, **39**, 6290-6295.
- Panofsky, H.A. and J.A. Dutton, 1984: Atmospheric Turbulence, John Wiley & Sons, New York, USA.
- Tirabassi, T., 2003: Operational advanced air pollution modelling. *Pure and Appl. Geoph.*, **160**, 5-16.
- Wortmann, S., M.T. Vilhena, D.M. Moreira, D. Buske, 2005: A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmos. Env.*, **39**, 2171-2178.

APÊNDICE X

An unsteady two-dimensional analytical solution for modeling air pollution dispersion and turbulent dry deposition

Artigo apresentado e publicado nos anais do 19th International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2007) que se realizou na cidade de Brasília no período de 05 a 09 de novembro de 2007.

AN UNSTEADY TWO-DIMENSIONAL ANALYTICAL SOLUTION FOR MODELING AIR POLLUTION DISPERSION AND TURBULENT DRY DEPOSITION

Daniela Buske, buske@mecanica.ufrgs.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - PROMEC - Porto Alegre, Brasil

Davidson Martins Moreira, davidson@mecanica.ufrgs.br

Universidade Federal de Pelotas, UNIPAMPA, Bagé, Brasil

Tiziano Tirabassi, t.tirabassi@isac.cnr.it

Institute ISAC of CNR, Bologna, Italy

Marco Túllio Vilhena, vilhena@mat.ufrgs.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - PROMEC - Porto Alegre, Brasil

***Abstract.** Dry deposition at the surface of air pollution from a ground-level or an elevated source can be considered in different ways. The deposition flux is usually parameterized in terms of deposition velocity, which is either specified empirically or estimated from appropriate theoretical relations. Using the gradient transport, dry deposition is included by specifying the deposition flux as the surface boundary condition. The advection-diffusion equation can be written in finite difference form, thus opening the door to a countless variety of numerical solutions. Analytical solutions of equations are of fundamental importance in understanding and describing physical phenomena. Analytical solutions (as opposed to numerical ones) explicitly take into account all the parameters of a problem, so that their influence can be reliably investigated and sensitivity analysis over model parameters may be easily performed. Moreover, numerical codes based on analytical expressions need less computational resources. In this work we present a general solution (i.e. for any wind and eddy diffusivity vertical profiles) for the unsteady two-dimensional advection-diffusion equation with dry deposition to the ground. The above solution is obtained applying Generalized Integral Laplace Transform Technique (GILTT). Moreover, we will report numerical simulations of the ground-level concentrations compared with an experimental data set.*

Keywords: GILTT, Dry Deposition, Advection-Diffusion Equation, Analytical Solution

1. INTRODUCTION

The advection-diffusion equation can be written in finite difference form, thus paving the way to a countless variety of numerical solutions. Using the gradient transport approach (K-theory), dry deposition is included by specifying the deposition flux as the surface boundary condition. Therefore, numerical solutions to the advection-diffusion equation with variable eddy diffusivities are used to take into account the effects of dry deposition as well as gravitational settling for heavier particles (Arya 1999).

Analytical solutions of equations are of fundamental importance in understanding and describing physical phenomena, since they are able to take into account all the parameters of a problem, and investigate their influence and it easy to obtain the asymptotic behavior of the solution, which is usually difficult to generate through numerical calculations. Moreover, when using models, while they are rather sophisticated instruments that ultimately reflect the current state of knowledge on turbulent transport in the atmosphere, the results they provide are subject to a considerable margin of error. This is due to various factors, including in particular the uncertainty of the intrinsic variability of the atmosphere. Models, in fact, provide values expressed as an average, i.e. a mean value obtained by the repeated performance of many experiments, while the measured concentrations are a single value of the sample to which the ensemble average provided by models refer. This is a general characteristic of the theory of atmospheric turbulence and is a consequence of the statistical approach used in attempting to parameterize the chaotic character of the measured data. An analytical solution can be useful in evaluating the performances of numerical model (that solve numerically the advection diffusion equation) that could compare their results, not only against experimental data but, in an easier way, with the solution itself in order to check numerical errors without the uncertainties presented above.

Many operative models (using and analytical formula for the air pollution concentration) adopt empirical algorithms for describing dry deposition. The Gaussian plume equation was modified to include source depletion models (Chamberlain 1953; Overcamp 1976) and surface depletion models algorithms (Horst 1977, 1984). The solution proposed by Smith (1962), Ermak (1977), Rao (1981) also retained the framework of invariant wind speed and eddies with height (as the Gaussian approach). More recently, analytical solutions of advection-diffusion equation with dry deposition at the ground have utilized height-dependent wind speed and eddy diffusivities (Horst and Slinn 1984; Koch 1989; Chrysikopoulos et al. 1992; Lin and Hildemann 1997). However, these solutions are restricted to the specific case

where the source is located at the ground level and/or with restrictions to the wind speed and eddy diffusivities vertical profiles.

In this work we step forward solving analytically the two-dimensional, unsteady advection-diffusion-deposition equation using the GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) method. For more details about the methodology see the works of Wortmann et al. (2005), Moreira et al. (2005) and Moreira et al. (2006).

The dry deposition is described with a boundary condition of non-zero flux to the ground and without any restriction to the above profiles and the source position. Indeed, for this type of problem, the eigenvalues and eigenfunctions of the auxiliary Sturm-Liouville problem must be determined assuming boundary conditions of third type, which encompass the contaminant deposition speed. At this point it is worth noting that the mentioned works (Wortmann et al. 2005; Moreira et al. 2005; Moreira et al. 2006) assume boundary conditions only of second type.

To validate the results obtained, numerical comparison is undertaken with available results in the literature.

2. THE ANALYTICAL SOLUTION

For a Cartesian coordinate system in which the x direction coincides with that of the average wind, the unsteady two-dimension advection-diffusion equation with dry deposition to the ground is written as:

$$\frac{\partial c^y(x, z, t)}{\partial t} + u(z) \frac{\partial c^y(x, z, t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(z) \frac{\partial c^y(x, z, t)}{\partial z} \right) \quad (1)$$

subjected to the boundary conditions:

$$K_z(z) \frac{\partial c^y(x, z, t)}{\partial z} = V_g C(x, z, t) \quad \text{at } z = 0 \quad (1a)$$

$$K_z(z) \frac{\partial c^y(x, z, t)}{\partial z} = 0 \quad \text{at } z = h \quad (1b)$$

a continuous source condition:

$$u(z) c^y(0, z, t) = Q \delta(z - H_s) \quad \text{at } x = 0 \quad (1c)$$

and the initial condition:

$$c^y(x, z, 0) = 0 \quad \text{at } t = 0 \quad (1d)$$

Here, c^y denotes the pollutant concentration, K_z is the turbulent eddy diffusivity coefficient assumed to be a function of the variable z , u is the mean wind oriented in the x direction and function of the variable z , V_g the deposition velocity, h is the height of PBL, Q the emission rate, H_s the height of the source and δ is the Dirac-Delta function.

Using the Laplace Transform technique, transforming t into r and c^y into C , the equation (1) becomes:

$$u(z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z(z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial z} \right) - rC(x, z, r) \quad (2)$$

To solve the problem by the GILTT method, Eq. (2) is rewritten as:

$$u(z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial x} = K_z(z) \frac{\partial^2 C(x, z, r)}{\partial z^2} + K'_z(z) \frac{\partial C(x, z, r)}{\partial z} - rC(x, z, r) \quad (3)$$

where it should be noted that the first term on the right hand side satisfies the following Sturm-Liouville problem:

$$\zeta''_i(z) + \lambda_i^2 \zeta_i(z) = 0 \quad \text{at } 0 < z < h \quad (4)$$

$$-K_z \zeta'_i(z) + V_g \zeta_i(z) = 0 \quad \text{at } z = 0 \quad (4a)$$

$$\zeta'_i(z) = 0 \quad \text{at } z = h \quad (4b)$$

The solution of problem (3) constitutes a well known set of orthogonal eigenfunctions $\zeta_i(z) = \cos(\lambda_i(h-z))$ whose eigenvalues fulfill the ensuing transcendental equation:

$$\lambda_i(z) \tan(\lambda_i(z)h) = H_1 \quad (4c)$$

where $H_1 = \frac{V_g}{K_z}$. The eigenvalues are calculated solving the transcendental equation by the Newton-Raphson method.

It is now possible to apply the GILTT approach. For this purpose, the pollutant concentration is expanded in the serie:

$$C(x, z, r) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(x, r) \zeta_i(z) \quad (5)$$

Replacing the above equation in Eq. (3) and taking moments, the following is obtained:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(x, r) \int_0^h K'_z(z) \Psi'_i(z) \Psi_j(z) dz - \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 \bar{c}_i(x, r) \int_0^h K_z(z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - \\ - \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}'_i(x, r) \int_0^h u(z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - \sum_{i=0}^{\infty} r \bar{c}_i(x, r) \int_0^h \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

The above equation can be written in matrix fashion as:

$$Y'(x, r) + F.Y(x, r) = 0 \quad (7)$$

where $Y(x, r)$ is the column vector whose components are $\bar{c}_i(x, r)$, the matrix F is defined as $F = B^{-1}E$ and the matrices B and E are given by:

$$b_{i,j} = - \int_0^h u(z) \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz \quad (8a)$$

and

$$e_{i,j} = \int_0^h K'_z(z) \Psi'_i(z) \Psi_j(z) dz - \lambda_i^2 \int_0^h K_z(z) \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - r \int_0^h \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz \quad (8b)$$

Following the procedure of Wortmann et al. (2005), Moreira et al. (2005) and Moreira et al. (2006), one obtains the following solution for problem (7):

$$Y(x, r) = X.G(x, r).\xi \quad (9)$$

where X is the eigenfunction matrix of F , G is the diagonal matrix whose entries have the form $e^{-d_i x}$, d_i are the eigenvalues of F and ξ the vector given by $\xi = X^{-1}Y(0)$. Knowing the coefficients of the concentration series expansion, the solution for pollutant concentration given by Eq. (5) is well determined:

$$C(x, z, r) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(x, r) \zeta_i(z) \quad (10)$$

where $\bar{c}_i(x, r)$ is the solution of the transformed problem given by Eq. (9), and $\zeta_i(z)$ comes from the solution of the Sturm-Liouville problem given in problem (4), where $\zeta_i(z) = \cos(\lambda_i(h-z))$.

Finally, the time-dependent concentration is obtained inverting numerically the transformed concentration $C(x, z, r)$ by the FT algorithm (Valkó and Abate, 2004; Abate and Valkó, 2004):

$$c(x, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \Psi_i(z) \left(\frac{r}{M} \left\{ \frac{1}{2} \bar{c}_i(x, r) e^{rt} + \sum_{k=1}^{M-1} \text{Re} \left[e^{rS(\theta_k)} \bar{c}_i(x, S(\theta_k)) (1 + i\sigma(\theta_k)) \right] \right\} \right) \quad (11)$$

where $S(\theta_k) = r\theta(\cot\theta + i)$, $-\pi < \theta < +\pi$, $\sigma(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot\theta_k - 1)\cot\theta_k$, $\theta_k = \frac{k\pi}{M}$ and r is a parameter based

on numerical experiments. To control the round-off error in the computation of (11), we specify the precision requirement: number of precision decimal digits = M . No approximations are made in the derivation of this solution and so, it is analytical except for the round-off error and numerical inversion of time. The infinite series given in Eq. (11) can be truncated when the convergence is under a prefixed value. In the present case, 60 terms were utilized with an error of 0.5%.

3. EXPERIMENTAL DATA AND PBL PARAMETERIZATION

In order to show an example of the application of the obtained solution (Eq. (10)), the dataset of the Hanford diffusion experiment was used. This experiment was conducted in May-June, 1983 on a semi-arid region of south eastern Washington on generally flat terrain. The detailed description of the experiment was provided by Doran and Horst (1985). Data were obtained from six dual-tracer releases located at 100, 200, 800, 1600 and 3200m from the source during moderately stable to near-neutral conditions. However, the deposition velocity was evaluated only for the last 3 distances. The release time was 30 min except in run five, when it was 22 min. The terrain roughness was 3cm.

Two tracers, one depositing and one non-depositing, were released simultaneously from a height of 2 m. Zinc sulfide (ZnS) was chosen for the depositing tracer, while sulfur hexafluoride (SF₆) was the non-depositing tracer. The lateral separation between the SF₆ and ZnS release points was less than 1 m. The near-surface release height and the atmospheric stability conditions were chosen to produce differences between the depositing and non-depositing tracer concentrations that could be easily measured. The data collected during the field tests were tabulated (as crosswind-integrated tracer concentration data) and presented in Doran et al. (1984). The meteorological data and crosswind-integrated tracer concentration data, normalized by the release rate Q , are listed in Tab. 1. Note that in Tab. 1, C_d and C_{nd} are, respectively, the crosswind-integrated concentrations of ZnS and SF₆ normalized by the emission rate Q . For more details about the way that the effective deposition velocities and wind speed are calculated, also about the way that the measurements were taken, see the work of Doran and Horst (1985).

In order to use the above solution (Eq. (10)), it was necessary to select wind and eddy coefficient vertical profiles. The reliability of each model strongly depends on the way that turbulent parameters are calculated and related to the current understanding of the PBL (Seinfeld and Pandis, 1997).

The vertical eddy diffusivity used in this work is given in Degrazia et al. (2000):

$$K_z = \frac{0.3(1-z/h)u_*z}{1+3.7z/\Lambda} \quad (12)$$

where z is the height, u_* is the vertical convective velocity scale, $\Lambda = L(1-z/h)^{5/4}$ and L is the Monin-Obukhov length.

The wind velocity profile was described by a power law expressed as follows (Panofsky and Dutton 1988):

$$\frac{u_z}{u_1} = \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (13)$$

where u_z and u_1 are the mean wind velocity at the heights z and z_1 , while n is an exponent that is related to the intensity of turbulence for rural terrain (Irwin 1979).

Table 1. Tracer and meteorological data for six dual-tracer releases. L (m), u_* (cm.s^{-1}) and h (m) are the Monin-Obukhov length scale, the friction velocity and the PBL height, respectively, u is the wind velocity and V_g the deposition velocity. Subscript d refers to depositing material and subscript nd refers to non-depositing material.

Exp.	Arc (m)	ZnS/ Q (s.m^{-2})	SF ₆ / Q (s.m^{-2})	u (m.s^{-1})	V_g (cm.s^{-1})	C_d/C_{nd}
$u_* = 40$	800	0.00224	0.00373	7.61	4.21	0.601
$L = 166$	1600	0.000982	0.00214	8.53	4.05	0.459
$h = 325$	3200	0.000586	0.00130	9.43	3.65	0.451
$u_* = 26$	800	0.00747	0.0129	3.23	1.93	0.579
$L = 44$	1600	0.00325	0.00908	3.59	1.80	0.358
$h = 135$	3200	0.00231	0.00722	3.83	1.74	0.320
$u_* = 27$	800	0.00306	0.00591	4.74	3.14	0.518
$L = 77$	1600	0.00132	0.00331	5.40	3.02	0.399
$h = 182$	3200	0.000662	0.00179	6.32	2.84	0.370
$u_* = 20$	800	0.00804	0.0201	3.00	1.75	0.400
$L = 34$	1600	0.00426	0.0131	3.39	1.62	0.325
$h = 104$	3200	0.00314	0.00915	3.75	1.31	0.343
$u_* = 26$	800	0.00525	0.0105	3.07	1.56	0.500
$L = 59$	1600	0.00338	0.00861	3.24	1.47	0.393
$h = 157$	3200	0.00292	0.00664	3.46	1.14	0.440
$u_* = 30$	800	0.00723	0.0134	3.17	1.17	0.540
$L = 71$	1600	0.00252	0.00615	3.80	1.15	0.410
$h = 185$	3200	0.00125	0.00311	4.37	1.10	0.402

4. NUMERICAL RESULTS

The model was evaluated with the ratio C_d/C_{nd} , where C_d and C_{nd} are the crosswind-integrated concentrations of ZnS and SF₆ measured at 1.5 m above the ground and normalized respectively by the emission rate Q . A comparison of predicted and observed values C_d/C_{nd} are shown in Fig. 1 for approach (11), with vertical eddy diffusivity given by Degrazia et al. (2000) and power profile of wind (Panofsky and Dutton 1988). Data between dot lines correspond to a factor of two. In this respect, it is possible to note that the model reproduces fairly well the observed concentration.

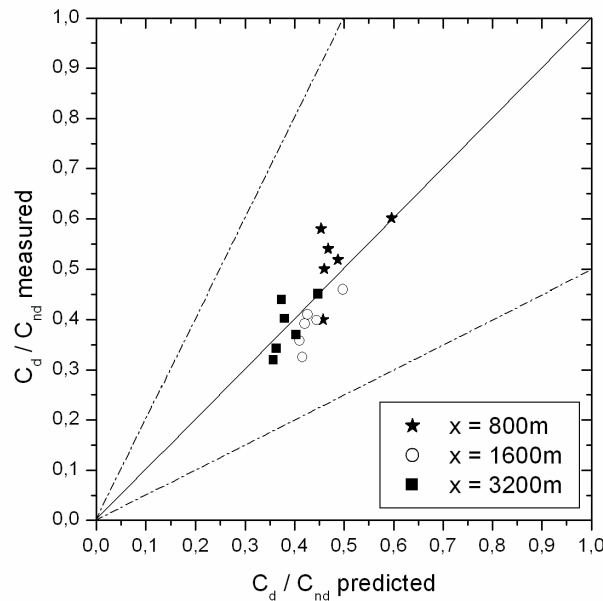


Figure 1. Scatter diagram of observed and predicted data. Data between dot lines correspond to a factor of two.

Table 2 presents some performance measurements, obtained using the well known statistical evaluation procedure described by Hanna (1989):

$$\text{Normalized mean square error (NMSE)} = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p},$$

$$\text{Factor of due (FA2)} = \text{fraction of data (\%)} \text{ for } 0.5 \leq (C_p / C_o) \leq 2$$

$$\text{Correlation coefficient (COR)} = \overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})} / \sigma_o \sigma_p,$$

$$\text{Fractional bias (FB)} = \overline{C_o} - \overline{C_p} / 0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p}),$$

$$\text{Fractional standard deviations (FS)} = (\sigma_o - \sigma_p) / 0.5(\sigma_o + \sigma_p)$$

where subscripts o and p refer to observed and predicted quantities, respectively, σ is the standard deviation and an overbar indicates an average.

Table 2. Statistical evaluation of model performance.

	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT	0.01	0.77	1.00	-0.01	0.38

The statistical index FB indicates whether the predicted quantities underestimate or overestimate the observed ones. The statistical index $NMSE$ represents the quadratic error of the predicted quantities in relation to the observed ones. Best results are indicated by values nearest zero in $NMSE$, FB and FS , and nearest 1 in R and $FA2$. The statistical indices point out that a good agreement is obtained between experimental data and the GILTT model. The computational time to obtain the numerical results was 72 seconds in an Intel Celeron, 1.60GHz and 1024Mb of RAM.

Doran and Horst (1985) presented four different models that evaluate the dry deposition at the ground with four different approaches: the source depletion approach of Chamberlain (1953), the corrected source depletion model of Horst (1980, 1983), the K model proposed by Ermak (1977) and Rao (1981), and the K corrected model of Rao (1981). Finally, to compare the results with the four models above, different statistical parameters were calculated (used in the paper by Doran and Horst, 1985) described by Fox (1981) and Willmott (1982):

$$\text{Mean bias } (\overline{d}) = \sum_{i=1}^N d_i / N$$

$$\text{Variance } (S^2) = \sum_{i=1}^N (d_i - \overline{d})^2 / (N - 1)$$

$$\text{Mean absolute error (MAE)} = \sum_{i=1}^N |Cp_i - Co_i| / N$$

$$\text{Index of agreement } (I) = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^N (P_i' - O_i')^2}{\sum_{i=1}^N (|P_i'| + |O_i'|)^2} \right]$$

where d_i is the difference between observed (Co_i) and predicted (Cp_i) values, $P_i' = Cp_i - \overline{Co_i}$, $O_i' = Co_i - \overline{Co_i}$, the overbar indicates an average and $0 < I < 1$ and N is the data number.

In Tab. 3 comparisons between the GILTT approach and the above models (Chamberlain, 1953; Horst, 1980; Horst, 1983; Ermak, 1977; Rao, 1981) are reported, and it is possible to see the good performance of the solution.

Table 3. Statistical evaluation of model performance compared with other models.

Parameter	GILTT	Source depletion	Corrected source depletion	K model	Corrected K model
Mean Bias	0.01	0.11	0.01	0.21	0.07
Mean absolute error	0.04	0.11	0.05	0.21	0.07
S = (variance) ^{1/2}	0.05	0.05	0.06	0.08	0.05
Correlation coefficient	0.77	0.82	0.70	0.63	0.78
Index of agreement	0.84	0.64	0.83	0.42	0.76

5. FINAL REMARKS

A general solution of the two-dimension time-dependent advection-diffusion equation considering dry deposition to the ground has been presented. In order to show the performances of the solution in actual scenarios, a parameterization of the PBL has been introduced, and the values predicted by the solutions have been compared with the Hanford diffusion experiment dataset. The analysis of the results shows a reasonably good agreement between the computed values against the experimental ones. Finally, the solution results were compared with those of 4 different models.

Therefore the methodology discussed is promising to simulate pollutant dispersion in atmosphere. Furthermore, the use of the FT algorithm allows us to obtain results with a prescribed accuracy.

We focus our future attention in the task of improving this methodology in order to make it more operational for air quality modeling.

6. ACKNOWLEDGEMENTS

The authors thank to CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) and the project "Laboratorio LaRIA" for the partial financial support of this work.

7. REFERENCES

- Abate, J. and Valkó, P.P., 2004, "Multi-precision Laplace transform inversion", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.60, pp. 979-993.
- Arya, S., 1999, "Air pollution meteorology and dispersion", Oxford University Press, New York.
- Chamberlain, A.C., 1953, "Aspects of travel and deposition of aerosol and vapour clouds", UKAEA Report No. AERE-HP/R-1261, Harwell, Berkshire, England.
- Chrysikopoulos C.V., Hildemann L.M. and Roberts P.V. 1992, "A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source", *Atm. Environ.*, Vol. 26A, pp. 747-757.
- Degrazia G.A., Anfossi D., Carvalho J.C., Mangia C., Tirabassi T. and Campos Velho H.F., 2000, "Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions", *Atm. Environ.*, Vol. 34, pp. 3575-3583.
- Doran, J.C., Abbey, O.B., Buck, J.W., Glover, D.W. and Horst, T.W., 1984, "Field validation of Exposure Assessment Models", Volume 1, Data Environmental Science Research Lab, Research Triangle Park, NC. 177p. EPA/600/384/092A.
- Doran, J.C. and Horst, T.W., 1985, "An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements". *Atm. Environ.*, Vol. 19, pp. 939-951.
- Ermak, D.L., 1977, "An analytical model for air pollution transport and deposition from a point source", *Atm. Environ.*, Vol. 11, pp. 231-237.
- Fox, D.G., 1981, "Judging air quality model performance: a summary of the AMS workshop on dispersion model performance", *Bull. Am. Met. Soc.*, Vol. 62, pp. 599-609.
- Hanna, S.R., 1989, "Confidence limits for air quality models, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods", *Atm. Environ.*, Vol. 23, pp. 1385-1395.
- Horst, T.W. 1977, "A surface depletion model for deposition from a Gaussian plume", *Atm. Environ.*, Vol. 11, pp. 41-46.
- Horst, T.W., 1980, "A review of Gaussian diffusion-deposition models", In *Atmospheric Sulphur Deposition* (edited by Shriner D.S., Richmond C.R. and Lindberg S.E.), pp. 275-283. Ann Arbor Science, Ann Arbor, MI.
- Horst, T.W., 1983, "A correction to the Gaussian source depletion model. In *Precipitation Scavenging, Dry Deposition and Resuspension*" (edited by Pruppacher H.R., Semonin R.G. and Slinn W.G.N.), pp. 1205-1218. Elsevier North Holland, Amsterdam, The Netherlands.
- Horst, T.W. 1984, "The modification of plume models to account for dry deposition", *Boundary-Layer Met.*, Vol. 30, pp. 413-430.

- Horst T.W. and Slinn W.G. 1984, "Estimates for pollution profiles above finite area-sources", *Atm. Environ.*, Vol. 18, pp. 1339-1346.
- Irwin, J.S., 1979, "A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability", *Atm. Environ.*, Vol. 13, pp. 191-194.
- Kock W. 1989, "A solution of two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level deposition", *Atm. Environ.*, Vol. 23, pp. 1729-1732.
- Lin J.S. and Hildemann L.M. 1997, "A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition", *Atm. Environ.*, Vol. 31, pp. 59-71.
- Moreira, D.M., Vilhena, M.T., Tirabassi, T., Buske, D. and Cotta, R.M., 2005, "Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method", *Atm. Environ.*, Vol. 39, pp. 6289-6294.
- Moreira, D.M., Vilhena, M.T., Buske, D. and Tirabassi, T., 2006, "The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL", *Atm. Environ.*, Vol. 40, pp. 3186-3194.
- Overcamp T.J. 1976, "A general Gaussian diffusion-deposition model for elevated point source", *J. appl. Met.*, Vol. 15, pp. 1167-1171
- Panofsky H. A. and Dutton J. A., 1988, "Atmospheric Turbulence", John Wiley & Sons, New York.
- Pasquill F. and Smith F.B., 1983, "Atmospheric Diffusion", John Wiley & Sons, New York.
- Rao, K.S., 1981, "Analytical solutions of a gradient-transfer model for plume deposition and sedimentation", NOAA Tech. Mem. ERL ARL-109, Air Resources Laboratories, Silver Spring, MD.
- Seinfeld, J.H. and Pandis, S.N., 1997, "Atmospheric chemistry and physics", John Wiley & Sons, New York.
- Smith F.B. 1962, "The problem of deposition in atmospheric diffusion of particulate matter", *J. atmos. Sci.*, Vol. 19, pp. 429-434.
- Valkó, P.P., Abate, J., 2004, "Comparison of sequence accelerators for the Gaver method of numerical Laplace transform inversion". *Computers and Mathematics with Application*, Vol.48, pp. 629-636.
- Wilmott, C.J., 1982, "Some comments on the evaluation of model performance", *Bull. Am. Met. Soc.*, Vol. 63, pp. 1309-1313.
- Wortmann, S., Vilhena, M.T., Moreira, D.M. and Buske, D., 2005, "A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL", *Atm. Environ.*, Vol. 39, pp. 2171-2178.

5. RESPONSIBILITY NOTICE

The authors are the only responsible for the printed material included in this paper.