

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Influência de efeitos  
não-locais na dispersão de  
poluentes na Camada Limite  
Planetária**

por

Camila Pinto da Costa

Dissertação submetida como requisito parcial  
para a obtenção do grau de  
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Marco Tullio Barreto Menna de Vilhena  
Orientador

Prof. Dr. Davidson Martins Moreira  
Co-orientador

Porto Alegre, Janeiro de 2004.

## CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Costa, Camila Pinto da

Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária / Camila Pinto da Costa.— Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2004.

83 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2004.

Orientador: Vilhena, Marco Tullio Barreto Menna de ; Coorientador: Moreira, Davidson Martins

Dissertação: Matemática Aplicada

Poluição do Ar, Camada Limite Convectiva, Transformada de Laplace, Equação de difusão-advecção, modelo de dispersão Euleriano, Parametrização da turbulência, coeficiente de difusão

# Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária

por

Camila Pinto da Costa

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática  
Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
como requisito parcial para a obtenção do grau de

## Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte e Transformadas Integrais

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Barreto Menna de Vilhena

Co-orientador: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira

Banca examinadora:

Prof. Dr. Carlos Malamut  
CDTN/MG

Profa. Dra. Eliete B. Hauser  
Faculdade de Matemática/PUC-RS

Prof. Dr. Antônio G. Goulart  
Departamento de Física/UFSM

Profa. Dra. Liliane Barichello  
PPGMAp/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em  
20 de Janeiro de 2004.

Prof. Dr. Vilmar Trevisan  
Coordenador

*Para meus pais, meus irmãos e meu namorado.*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Dr. Marco Tullio de Vilhena, pela orientação, apoio, incentivo e dedicação durante o desenvolvimento deste trabalho. E principalmente pelos conselhos oferecidos e pela amizade para comigo.

Agradeço em especial à minha família, principalmente aos meus pais e irmãos, pelo incentivo, carinho e compreensão demonstrado durante todo o curso.

Agradeço a meu namorado, a todos os meus amigos e colegas que sempre estiveram ao meu lado mesmo recebendo pouca atenção, pela paciência e palavras de incentivo e apoio.

Agradeço aos demais professores do PPGMAp pela colaboração em minha formação.

Agradeço ao Prof. Dr. Davidson Moreira pela co-orientação, apoio e auxílio no FORTRAN. Sua contribuição foi decisiva para a obtenção dos resultados deste trabalho.

Agradeço à CAPES pelo suporte financeiro.

Agradeço ao PPGMAp pela oportunidade.

Agradeço a Deus.

## SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS . . . . .	iv
LISTA DE TABELAS . . . . .	vi
LISTA DE SÍMBOLOS . . . . .	vii
RESUMO . . . . .	ix
ABSTRACT . . . . .	x
1 INTRODUÇÃO . . . . .	1
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA . . . . .	4
3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA . . . . .	9
3.1 Estrutura da Camada Limite Convectiva . . . . .	12
3.2 A estrutura da turbulência da Camada Limite Convectiva . . . . .	17
4 DESCRIÇÃO DO MÉTODO . . . . .	21
4.1 O Modelo de Poluição do ar . . . . .	21
4.2 Método de resolução . . . . .	24
4.2.1 Solução homogênea . . . . .	28
4.2.2 Solução particular . . . . .	29
4.2.3 Solução geral . . . . .	32
4.2.4 Inversão da solução . . . . .	34
4.2.4.1 Esquema da Quadratura de Gauss . . . . .	34
5 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA . . . . .	39
6 PERFIL DO VENTO . . . . .	46
7 VALIDAÇÃO DO MODELO . . . . .	47
7.1 Dados experimentais . . . . .	48

7.1.1	O Experimento de Copenhagen . . . . .	49
7.1.2	O Experimento de Prairie Grass . . . . .	50
<b>7.2</b>	<b>Índices Estatísticos . . . . .</b>	<b>52</b>
<b>8</b>	<b>RESULTADOS . . . . .</b>	<b>54</b>
8.1	Resultados para o Experimento de Copenhegen . . . . .	55
8.2	Resultados para o Experimento de Prairie Grass . . . . .	62
<b>9</b>	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>68</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .</b>	<b>71</b>
<b>APÊNDICE A</b>	<b>NOVO MÉTODO DE INVERSÃO . . . . .</b>	<b>80</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Estrutura da Troposfera (Stull, [64]) . . . . .	9
Figura 3.2	Ciclo diurno evolutivo da CLP. . . . .	10
Figura 3.3	Comportamento da temperatura potencial e da velocidade do vento na CLC. . . . .	14
Figura 3.4	Representação do fluxo vertical da dispersão de um contaminante no interior de uma camada de mistura. . . . .	17
Figura 3.5	Curva simétrica . . . . .	18
Figura 3.6	Assimetria positiva . . . . .	18
Figura 3.7	Assimetria negativa . . . . .	18
Figura 3.8	Deslocamento vertical de massas de ar causado pela convecção térmica . . . . .	20
Figura 4.1	Efeito local e efeito não-local na dispersão. . . . .	23
Figura 4.2	Desenho esquemático do modelo . . . . .	24
Figura 5.1	Comportamento do coeficiente de difusão adimensional para grandes tempos dependente das propriedades da turbulência em função da altura adimensional. . . . .	43
Figura 5.2	Comportamento do comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical adimensional em função da altura adimensional. . . . .	43
Figura 5.3	Comportamento da velocidade turbulenta vertical adimensional em função da altura adimensional. . . . .	44
Figura 5.4	Comportamento tempo de correlação Lagrangeana em função da altura adimensional. . . . .	44
Figura 7.1	Experimento de Copenhague . . . . .	49
Figura 8.1	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhague dos dados observacionais de concentração ( $Co$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $Cp$ ). . . . .	58
Figura 8.2	Gráfico da concentração superficial $\left(\frac{z}{z_i} = 0\right)$ adimensional $\overline{C^y}$ ( $Uz_i/Q$ ) em função da posição adimensional $X$ ( $xw_*/Uz_i$ ) com diferentes <i>assimetrias</i> para o experimento de Copenhague. . . . .	59



Figura 8.3	Gráfico da concentração adimensional $C^y (Uz_i/Q)$ em $\left(\frac{z}{z_i} = 0.9\right)$ em função da posição adimensional $X (xw_*/Uz_i)$ com diferentes <i>assimetrias</i> para o experimento de Copenhagen. . . . .	60
Figura 8.4	Gráfico da concentração superficial máxima adimensional em função da <i>assimetria</i> . . . . .	61
Figura 8.5	Gráfico de espalhamento sem <i>assimetria</i> para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração ( $Co$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $Cp$ ). . . . .	63
Figura 8.6	Gráfico de espalhamento com <i>assimetria</i> para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração ( $Co$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $Cp$ ). . . . .	65
Figura 8.7	Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional $C^y(Uz_i/Q)$ em função da posição adimensional $X(xw_*/Uz_i)$ utilizando-se o modelo (4.60) e (4.61) com <i>assimetria</i> e sem <i>assimetria</i> . . . . .	66

## LISTA DE TABELAS

Tabela 7.1	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen	50
Tabela 7.2	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Prairie Grass	51
Tabela 8.1	Concentrações superficiais integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando no modelo a equação (5.13) ( $C_p$ ) em diferentes distâncias da fonte, com assimetrias negativas e sem assimetria. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão ( $\bar{c}/Q$ ) e $C_o$ representa as concentrações observadas. .	56
Tabela 8.2	Concentrações superficiais integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando no modelo a equação (5.13) ( $C_p$ ) em diferentes distâncias da fonte, com assimetrias positivas. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão ( $\bar{c}/Q$ ) e $C_o$ representa as concentrações observadas. . . . .	57
Tabela 8.3	Índices estatísticos para os dados de Copenhagen . . . . .	57
Tabela 8.4	Índices estatísticos para os dados de Praire Grass sem <i>assimetria</i>	62
Tabela 8.5	Índices estatísticos para os dados de Praire Grass com <i>assimetria</i>	64

## LISTA DE SÍMBOLOS

CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Noturna
CLP	Camada Limite Planetária
CLR	Camada Limite Residual
CLS	Camada Limite Superficial
$C_o$	Concentrações observadas
$C_{or}$	Coefficiente de correlação
$C_p$	Concentrações preditas pelo modelo
$\bar{c}_n$	concentração na $n$ -ésima subcamada ( $kg/m^2$ )
$\overline{c^y}$	concentração média integrada lateralmente ( $kg/m^2$ )
$\overline{C_{n_p}}$	solução particular
$\overline{C_{n_h}}$	solução homogênea
$Fa_2$	Fator de dois
$Fb$	Fração de inclinação
$(f_m^*)_i$	freqüência adimensional do pico espectral vertical
$F_i^E(n)$	espectro Euleriano de energia
$F_i^E(0)$	espectro de energia Euleriano em $n = 0$
$F_s$	Desvio fracional padrão
$g$	aceleração da gravidade ( $m/s^2$ )
$g(z, t)$	função de <i>Green</i>
$H_s$	altura da fonte ( $m$ )
$k$	constante de Von Kármán
$K_x$	coeficiente de difusão turbulenta na direção $x$ ( $m^2/s$ )
$K_y$	coeficiente de difusão turbulenta na direção $y$ ( $m^2/s$ )
$K_z$	coeficiente de difusão turbulenta na direção $z$ ( $m^2/s$ )
$K_{z_n}$	coeficiente de difusão na região $n$ ( $m^2/s$ )
$L$	comprimento de Monin-Obukov ( $m$ )
$\mathcal{L}$	Transformada de Laplace
$n$	freqüência ( $s$ )
$n^*$	indica a região de emissão
$N$	número de camadas
$N_i$	número de inversões
$Nmse$	Erro quadrático médio normalizado
$p_i$	termo tabelado da <i>Quadratura de Gauss</i> (raízes)
$Q$	intensidade da fonte ( $g/s$ )
$S_i^E(n)$	espectro da velocidade Euleriana $i = u, v, w$
$S_k$	assimetria (skewness)
$Sp_{n^*}$	solução particular aplicada na região de emissão
$Sp'_{n^*}$	derivada da solução particular aplicada na região de emissão
$T_{L_w}$	escala de tempo Lagrangeana vertical
$t$	tempo ( $s$ )

$u_*$	velocidade de fricção( $m/s$ )
$u$	velocidade média do vento( $m/s$ )
$u_n$	velocidade média do vento na região $n$ ( $m/s$ )
$u$	componentes do vento médio na direção $x$
$v$	componentes do vento médio na direção $y$
$w$	componentes do vento médio na direção $z$
$w_i$	termo tabelado da <i>Quadratura de Gauss</i> (pesos)
$w_*$	escala de velocidade convectiva ( $m/s$ )
$W$	<i>Wronskiano</i>
$\overline{w'c'}$	fluxo turbulento de poluentes na vertical
$(\overline{w\theta})_0$	fluxo de calor turbulento na superfície
$x$	distância da fonte ( $m$ )
$z$	altura acima da superfície ( $m$ )
$z_i$	altura da Camada Limite Convectiva ( $m$ )
$z_0$	comprimento de rugosidade aerodinâmico ( $m$ )

## GREGOS

$\beta_i$	razão das escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana
$\delta$	função generalizada Delta de Dirac
$(\lambda_m)_w$	comprimento de onda associado ao máximo do espectro
vertical	
$\psi$	taxa de dissipação
$\Psi_m$	função estabilidade
$\sigma_w$	velocidade turbulenta vertical
$\sigma_i$	desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento
$\sigma_i^2$	variância generalizada
$\theta$	temperatura potencial média

## RESUMO

A equação de difusão-advecção é muito utilizada no campo de estudos da poluição atmosférica na determinação da concentração de poluentes. Uma maneira de solucionar o problema de fechamento desta equação está baseada na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média.

Neste trabalho, diferentemente do modo tradicional, utiliza-se uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio. Desta forma, obtém-se uma equação que leva em conta a assimetria no processo de dispersão de poluentes atmosféricos. Portanto, a proposta do presente trabalho é a obtenção da solução analítica desta nova equação utilizando-se a técnica da Transformada de Laplace, considerando-se a Camada Limite Planetária (CLP) como um sistema multicamadas.

Os parâmetros que encerram a turbulência são derivados da teoria de difusão estatística de Taylor combinada com a teoria de similaridade convectiva válidos para grandes tempos de difusão. Finalmente, na avaliação da performance deste modelo que considera a assimetria no processo de dispersão de poluentes atmosféricos, utilizam-se os dados experimentais de Copenhagen e Prairie Grass.

## ABSTRACT

The advection-diffusion equation is very used in the field of studies of the atmospheric pollution in the determination of the pollutants concentration. A way to solve the problem of closing of this equation is based on the transport hypothesis by gradient that, in analogy with the molecular diffusion, it assumes that the turbulent flow of concentration is proportional to the magnitude of the gradient of medium concentration.

In this work, unlike the standard procedure, a generic equation is used for the turbulent diffusion assuming that the flow and its derivative they are proportional to the averaged gradient. In decal, it is obtained an equation that takes into account the asymmetry in the process of dispersion of atmospheric pollutants. Therefore, the proposal of this work is the obtaining of the analytic solution of this new equation using the Laplace Transform technique, considering that PBL is discretized in  $N$  sub-intervals. The Inverse of the Transform is achieved through numerical scheme of Gaussian Quadrature.

The parameters that model the turbulence are derived from the statistical diffusion Taylor theory combined with the convective similarity theory, valid for great time of diffusion. Finally, in the evaluation of the performance of this model that considers the asymmetry in the process of dispersion of atmospheric pollutants, the experimental data of Copenhagen and Prairie Grass are used.

# 1 INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, a preocupação em manter o ar dentro dos padrões adequados tem aumentado consideravelmente o estudo da dispersão e do transporte de poluentes na atmosfera. O rápido crescimento industrial e tecnológico causa uma emissão excessiva de poluentes o que tem provocado sérios danos ambientais e apreensões, principalmente no que se refere a deterioração da qualidade do ar.

A modelagem matemática é muito útil no estudo dos processos de dispersão de poluentes atmosféricos. Estes modelos permitem realizar simulações que estimam o campo de concentração de poluentes próximo à fonte, tornando possível avaliar o impacto ambiental causado e agir no sentido de solucionar o problema da forma mais conveniente.

As leis que regulamentam a qualidade do ar estão se tornando cada vez mais rigorosas e exigentes. Desta forma, novos modelos matemáticos que produzam resultados precisos, de modo rápido, são necessários a fim de estimar realisticamente o procedimento adequado para manter o ar dentro dos padrões aceitáveis.

Com o propósito de descrever adequadamente a relação entre as emissões de poluentes na atmosfera e a qualidade do ar, um modelo deve levar em conta os parâmetros físicos meteorológicos e micro-meteorológicos que ocasionam o transporte de poluentes e ser capaz de reproduzir o seu campo de concentração.

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera emprega-se normalmente a equação de difusão-advecção que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade. 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.

A maneira mais utilizada de solucionar o problema de fechamento da equação de difusão-advecção está baseada na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. Neste trabalho, diferentemente do modo tradicional, utiliza-se uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio [70], [13]. Desta forma, obtém-se uma equação que leva em conta a assimetria no processo de dispersão de poluentes atmosféricos. Portanto, a proposta deste trabalho é a obtenção da solução analítica desta nova equação utilizando-se a técnica da Transformada de Laplace, considerando-se a Camada Limite Planetária (CLP) como um sistema multicamadas.

Em resumo, o principal objetivo deste trabalho é a construção de um modelo que considere de um modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta. Na análise leva-se em conta o caráter não homogêneo da turbulência na Camada Limite Convectiva (CLC) (o efeito dos turbilhões mais energéticos em diferentes alturas) e o efeito de transporte assimétrico no cálculo de concentração de poluentes, sendo que este termo não é considerado na solução da equação de difusão-advecção com o fechamento da turbulência tradicional. Utilizando-se de observações de concentrações superficiais realizadas nos experimentos de Copenhagen [26] e Prairie Grass [1] a performance do presente modelo será confrontada.

A presente dissertação encontra-se estruturada em 9 capítulos. No capítulo dois encontra-se uma revisão bibliográfica motivando a realização deste trabalho. No capítulo três descreve-se a Camada Limite Planetária (CLP) destacando-se a estrutura difusiva da Camada Limite Convectiva (CLC) e a definição de alguns conceitos básicos. No capítulo quatro apresenta-se o modelo de poluição do ar e o método de solução da equação de difusão-advecção considerando o efeito não-local. No capítulo cinco é descrita a parametrização da turbulência, onde são derivados os coeficientes de difusão. No capítulo seis descreve-se o perfil do vento utilizado. No capítulo sete apresentam-se os passos para a validação do modelo, descrevem-se os



experimentos de dispersão de Copenhagen e Prairie Grass a serem confrontados com o modelo. No capítulo oito confronta-se as concentrações preditas pelo modelo com dados observacionais para efetuar a validação do mesmo e discutem-se os resultados e, finalmente, no capítulo nove, apresentam-se as conclusões.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na tentativa de encontrar relações empíricas entre difusão atmosférica e fatores meteorológicos foram realizadas, na década de cinquenta, medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e parâmetros meteorológicos. O experimento mais significativo foi o de Prairie Grass [1]. Os parâmetros de dispersão lateral e vertical eram medidos diretamente ou estimados a partir de medidas de concentração na superfície. Baseado na teoria estatística de Hay e Pasquill [29] e nos experimentos de Prairie Grass, em 1961, Pasquill [51] conseguiu um modelo para os parâmetros de dispersão lateral.

Utilizando medidas de concentração na superfície e assumindo a validade do modelo de dispersão Gaussiano, o parâmetro de dispersão vertical foi estimado. Pasquill classificou os parâmetros de dispersão de acordo com o regime de estabilidade. Em 1975 Gifford [24] sugeriu algumas modificações e este modelo foi largamente utilizado em modelos de dispersão.

A partir da década de setenta os métodos empregados em simulação de dispersão turbulenta podem ser agrupadas em duas categorias: na primeira, a dispersão e o campo de concentração são estimados seguindo-se as partículas localizadas em um campo de velocidades, que são obtidos resolvendo-se as equações de Navier-Stokes, considerando-se as condições de contorno apropriadas, e a outra, em uma abordagem iniciada por Taylor, as trajetórias podem ser geradas diretamente usando um modelo estocástico para velocidades Lagrangeanas.

Em 1954 Monin e Obukhov [38] sugeriram uma teoria de similaridade válida para a camada limite superficial que é baseada na suposição de que o regime turbulento é descrito por alguns parâmetros-chaves, com os quais podem-se construir escalas características do movimento. Em 1984 Nieuwstadt [46] e em 1989 Sorbjan [60] introduziram uma teoria de similaridade local válida para toda a camada limite planetária estável. Já em 1970 Deardorff [15] desenvolveu uma teoria de

similaridade para a camada bem misturada quando propôs as escalas de movimentos características desta região.

A compreensão da difusão turbulenta na camada limite planetária convectiva teve considerável avanço a partir dos experimentos de tanque de Willis e Deardorff ([76], [77], [78], [79]). Estes experimentos demonstraram que a estrutura vertical da turbulência na camada limite convectiva não obedece a uma distribuição Gaussiana. Os primeiros suportes para as observações de laboratório de Willis e Deardorff foram obtidas a partir de modelos numéricos de Lamb [35] [36] que usou resultados do modelo de "Large Eddy Simulation" de Deardorff [16]. Em 1975 Briggs [6] propôs uma expressão para a distribuição de concentração vertical obtida a partir dos resultados de laboratório de Willis e Deardorff.

A equação de difusão-advecção é muito utilizada para a descrição do processo de dispersão de poluentes na baixa atmosfera, que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos. 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 (Monin e Yaglom, 1971 [39]; Pasquill, 1974 [52]).

A primeira solução da equação de difusão-advecção foi a bem conhecida solução Gaussiana, devido a Fick, na metade do século XIX. Na solução Gaussiana o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura e são consideradas as seguintes condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } z \rightarrow \infty \quad (2.1)$$

Estas são as condições de contorno utilizadas nas soluções analíticas da equação de difusão-advecção e que correspondem a fluxo nulo de poluentes na parte inferior e superior da camada limite planetária.

Em 1923, Roberts [56] expressou a solução bidimensional, para fontes próximas do solo, na qual tanto a velocidade média do vento  $u$  quanto o coeficiente de difusão vertical  $K_z$  obedecem uma lei de potência em função da altura  $z$ . Ou seja:

$$u = u_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^m ; \quad K_z = K_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^n \quad (2.2)$$

sendo  $z_1$  onde  $u_1$  e  $K_1$  são avaliados,  $m$  e  $n$  variam entre 0 e 1.

Em 1955, Rounds [57] apresentou uma solução, também bidimensional e com o perfil de velocidade média do vento descrito acima, porém, somente para perfis lineares de  $K_z$  e para fontes elevadas.

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 ( $\alpha = 1 - \beta$ ) foi resolvida em 1957 por Smith [59]. Em seguida, Smith obteve uma solução para o caso de  $u$  constante, mas com  $K_z$  da seguinte forma:

$$K_z = K_0 z^{\alpha l} (z_i - z)^{\beta} \quad (2.3)$$

onde  $K_0$  é uma constante,  $\alpha$  e  $\beta$  variam entre 0 e 1 de acordo com a altura da camada limite  $z_i$ .

Scriven e Fisher [58], em 1975, sugerem a solução com  $u$  constante e  $K_z$ , como segue:

$$K_z = z \quad \text{para } 0 \leq z \leq z_t \quad (2.4)$$

$$K_z = K_z(z_t) \quad \text{para } z_t \leq z \leq z_i \quad (2.5)$$

onde  $z_t$  é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada limite superficial).

Yeh e Huang [80] e Berlyand [5] em 1975, divulgaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com  $u$  e  $K_z$  seguindo os perfis de potência, porém para uma atmosfera sem contorno (ou seja  $(k_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \text{ em } z = \infty)$ ). Já em 1978, Demuth [20] avançou na solução com as mesmas condições, mas para uma camada verticalmente limitada (isto é,  $k_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \text{ em } z = z_i$ ).

Adaptando a teoria de similaridade de Monin-Obukhov à difusão, Van Ulden [71] expressou, no mesmo ano, a solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, somente com a hipótese que  $u$  e  $K_z$  seguem os perfis de potência.

Em 1980, Nieuwstadt [45] apresentou uma solução dependente do tempo e o coeficiente de difusão dado por:

$$K_z = Gu_* z \left(1 - \frac{z}{z_i}\right) \quad (2.6)$$

onde  $G$  é uma constante e  $u_*$  é a velocidade de fricção.

Mais tarde, em 1981, Nieuwstadt e Haan [47] ampliaram esta solução considerando o fato do crescimento da camada limite.

Uma solução analítica bidimensional para o nível do solo com perfis de potência da velocidade do vento e coeficiente de difusão, incluindo os efeitos de absorção ao nível do solo, foi apresentada por Kock [33] em 1989. Já em 1992, Chrysikopoulos et al. [12] desenvolveram uma solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo de uma fonte área contínua ao nível do solo para os mesmos perfis de  $U$  e  $K_z$  dados pelas equações (2.2), mas incluindo deposição como um mecanismo de remoção.

A emissão instantânea foi considerada em 1992 por Van Ulden [72] que desenvolveu uma solução aproximada descrevendo o campo de concentração como a soma de “puffs”.

Moura [43], em 1995, e Pires [55], em 1996, apresentaram a solução analítica da equação de difusão unidimensional dependente do tempo, sem vento, utilizando o coeficiente de difusão  $K_z$  de Degrazia et al. [19] para o caso estável e convectivo, respectivamente.

Em 1997, Lin e Hildeman [37] estenderam a solução de Yeh e Huang [80] e Berlyand [5], de 1975, para o caso de deposição para o solo.

Existem muitos modelos baseados em soluções analíticas como os apresentados anteriormente. Em particular, a solução de Berlyand [5] tem sido usada na Rússia, enquanto que o modelo de Scriven e Fisher [58] tem sido empregado para o transporte de poluentes e deposição na Europa (Fisher, 1978 [22]).

Hinrichsen [30] em 1986, desenvolveu um modelo com a solução de Berlyand [5] e tem verificado uma melhor eficácia comparado com o modelo de pluma Gaussiana utilizando três diferentes parametrizações.

Brown e Arya (1989) [7] tem comparado a eficácia do modelo usando as soluções de Yeh e Huang [80] com os dados de Hanford 67 (Nickola, 1977 [44]), apresentando uma boa concordância entre os resultados do modelo e dados experimentais.

Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de Yeh e Huang, Berlyand e Demuth tem sido adotados: KAPPAG (Tirabassi et al., 1986 [69]), KAPPAG-LT (Tirabassi et al., 1989 [68]), CISP (Tirabassi e Rizza, 1992 [66]) e MAOC (Tirabassi e Rizza, 1993 [67]).

Uma grande variedade de soluções numéricas da equação de difusão-advecção pode ser encontrada na literatura (Nieuwstadt e Van Ulden, 1978 [48]; Lamb, 1978 [35]; Carvalho, 1996 [10]). Porém, a busca de soluções analíticas para os problemas de dispersão ainda é uma das principais direções da pesquisa nesta área, pois todos os parâmetros aparecem explicitamente na solução, facilitando a investigação de suas influências.

### 3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

A concentração de poluentes em uma determinada região deve-se em grande parte às condições meteorológicas locais. Por isso, para a avaliação de dispersão de poluentes é imprescindível o conhecimento dos fenômenos que regem a atmosfera.

A troposfera pode ser dividida em duas partes: uma camada adjacente à superfície terrestre, chamada Camada Limite Planetária (CLP), e a camada acima desta, chamada Atmosfera Livre:

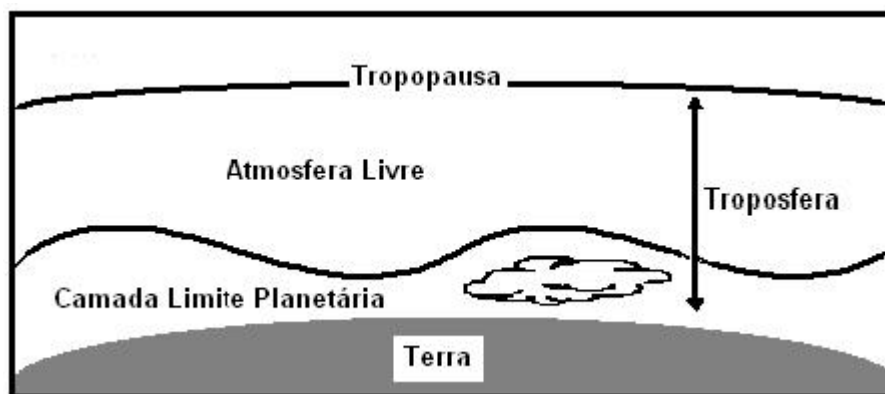


Figura 3.1: Estrutura da Troposfera (Stull, [64])

A parte da atmosfera que é influenciada diretamente pela superfície da terra e que responde a forçantes superficiais tais como os fluxos de calor e umidade, forças de atrito, evaporação e transpiração, emissão de poluentes e modificação de fluxo induzida pelo terreno, em uma escala de tempo de uma hora ou menos é denominada Camada Limite Planetária (CLP). A espessura da CLP varia de 100 m a 3000 m de altura a partir da superfície e é uma função direta dos forçantes térmicos e mecânicos (produção de turbulência pode ocorrer por empuxo e/ou cisalhamento do vento).

A variação diurna de temperatura na CLP é uma de suas principais características. Esta variação é provocada pelo aquecimento e resfriamento da su-

perfície da terra. A radiação de onda longa, proveniente do solo que absorve cerca de 90% da radiação nos dias ensolarados, faz com que a variação diurna seja bastante acentuada próximo ao solo e não ocorre a grandes altitudes. As massas de ar quente que se elevam a partir da superfície (gradiente de transporte positivo) são chamadas termas, turbilhões ou vórtices.

Nessa camada os ventos médios são responsáveis pelo transporte horizontal rápido (advecção) das espécies como umidade, calor, *mumentum* e os poluentes. Estes ventos variam normalmente entre 2 a 10  $m/s$ . Já o transporte vertical é dominado pela turbulência que é constituída de vários turbilhões que se sobrepõem e cujos tamanhos são variáveis (da ordem de 1  $mm$  a 3000  $m$  de diâmetro). A soma das contribuições de todos estes turbilhões constitui o espectro de energia turbulenta.

Sobre a superfície do solo em regiões de alta pressão a camada limite tem uma estrutura bem definida que envolve um ciclo diurno de acordo com os processos físicos que nela ocorrem. (Figura 3.2 - Stull, 1988 [64]):

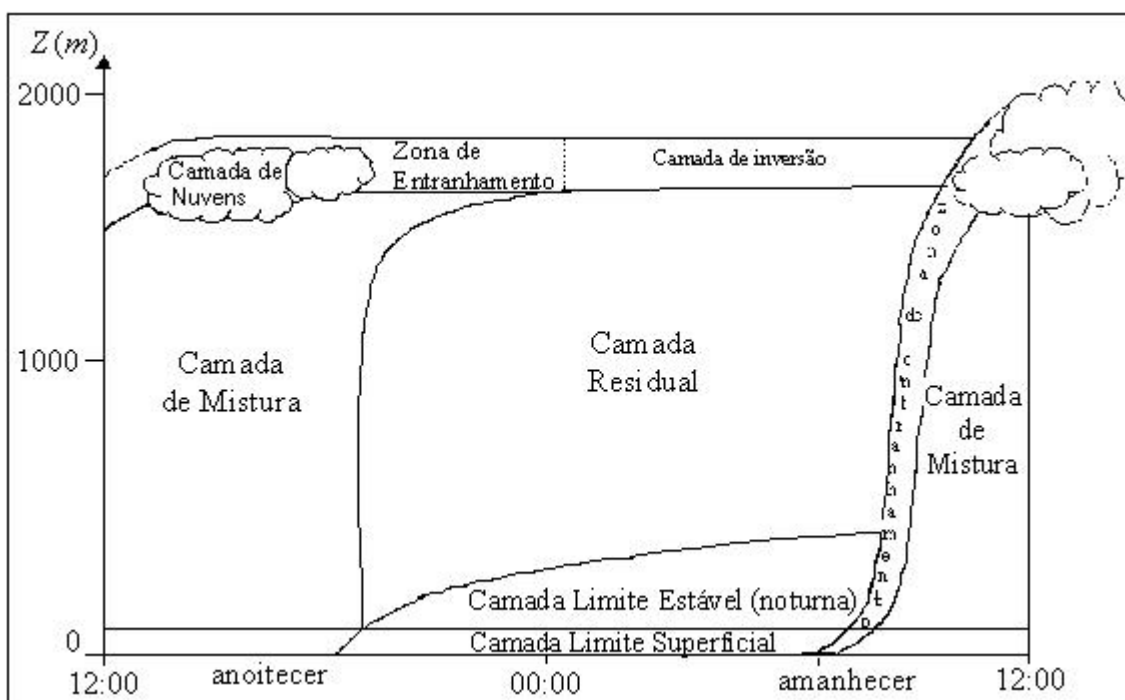


Figura 3.2: Ciclo diurno evolutivo da CLP.



As principais componentes desta estrutura são:

1. Camada Limite Superficial (CLS):

- é a região da CLP que varia em torno de 10 a 200  $m$ , e onde a variação vertical dos fluxos turbulentos, calor e cinética, variam menos que 10% de sua magnitude. É nessa camada que a interação entre a atmosfera e a superfície terrestre é fortemente sentida e os fluxos de cinética, calor e umidade são independentes da altura e do efeito *Coriolis*.

2. Camada Limite Convectiva (CLC);

- é a camada que começa a formar-se depois do nascer do sol. O aquecimento da superfície da terra forma termas de ar quente que se elevam modificando o topo da CLP. Essa estrutura convectiva dura o dia todo e cessa com o pôr do sol.

3. Camada Limite Estável (CLE) ou Noturna (CLN):

- comum à noite, pois ocorre quando a superfície terrestre se resfria. Esse resfriamento provoca um fluxo de calor negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões permitindo somente que pequenos turbilhões sobrevivam. Portanto a turbulência na CLE é menos intensa que na CLC, conseqüentemente, poluentes emitidos dentro da CLE se dispersam lentamente na vertical e mais rapidamente na horizontal (efeito dos ventos). Desta forma a altura da CLE é aproximadamente um décimo da CLC. Esta camada é formada por pequenos turbilhões que agem localmente e os forçantes superficiais propagam-se lentamente ao longo da camada.

4. Camada Limite Residual (CLR):

- quando cessa a formação de termas a turbulência também decai, a camada de ar resultante é denominada camada residual porque

o estado inicial das variáveis médias, as variáveis de concentração são as mesmas do decaimento recente da camada convectiva. Esta camada não tem contato com o solo pois se encontra acima da CLE.

Neste trabalho o modelo é aplicado à CLC, já que os dados experimentais confrontados com o mesmo foram obtidos sob condições convectivas.

### 3.1 Estrutura da Camada Limite Convectiva

A CLC é a camada que começa a formar-se depois do nascer do sol quando o solo começa a aquecer a camada de ar adjacente (fluxo de calor positivo) iniciando, assim, a convecção térmica; e cessa com o pôr do sol quando o fluxo de calor torna-se negativo.

O aquecimento da superfície da terra origina forte mistura vertical, pois há formação de termas (massas de ar quente) que se elevam a partir do solo, o que caracteriza esta camada. Define-se, então a CLC como a região da atmosfera que se estende do solo ( $z = 0$ ) até a base de uma inversão elevada ( $z = z_i$ ) (a altura onde a temperatura potencial aumenta como pode ser visto na figura (3.3)).

Esta camada atinge uma altura típica de 1000 a 2000  $m$  no meio da tarde. Acima deste limite tem-se a capa de inversão a qual atua como uma tampa anulando os movimentos verticais e restringindo o domínio da turbulência. Nesta camada ocorre uma distribuição da velocidade do vento e de temperatura potencial quase constante, o que é uma consequência da forte mistura vertical produzida pela convecção.

Freqüentemente, a turbulência na CLC apresenta-se em equilíbrio local com os forçantes externos. Isto significa que o tempo de relaxação da turbulência associado aos grandes turbilhões é muito menor que a escala de tempo associada a

mudanças externas, de modo que a estrutura da CLC não depende explicitamente do tempo (Driedonks e Tennekes, 1984 [21]).

Somente em 10% ou menos da CLC há a ocorrência dos gradientes da velocidade do vento médio, da direção do vento, e temperatura sendo que, nos 90% restantes a forte mistura convectiva suaviza quase todas as variações verticais nos principais perfis (velocidade, direção do vento e temperatura).

Como a maioria das fontes poluidoras estão próximas da superfície, a concentração de poluentes tende a aumentar significativamente na CLC pois estes são transportados pelos turbilhões e pelas termas que durante o decorrer do dia vão alcançando alturas cada vez maiores.

Em dias de céu claro sobre terra firme o fluxo de temperatura superficial aumenta fortemente após o nascer do sol, atinge seu valor máximo próximo ao meio dia e então decai. Entretanto, quando há presença de nuvens, a insolação ao nível do solo, reduz, dessa forma, a intensidade das termas. É justamente nestes dias que se as nuvens forem suficientemente espessas, a CLC pode exibir um crescimento menor que em outros e tornar-se não turbulenta.

Sobre terra firme a CLC pode ser considerada como uma estrutura de três camadas, diferenciadas em função de parâmetros predominantes, considerados relevantes para a descrição da turbulência. Na figura (3.3) baixo, encontra-se a estrutura da CLC e o comportamento da temperatura potencial e da velocidade média do vento em cada camada.

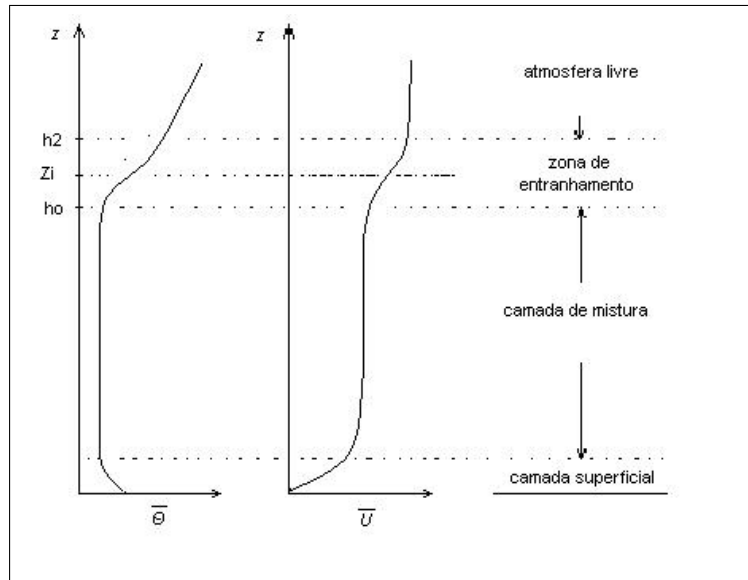


Figura 3.3: Comportamento da temperatura potencial e da velocidade do vento na CLC.

A primeira camada denominada Camada Limite Superficial (CLS), onde ocorre a predominância da turbulência mecânica está restrita a alturas menores do que  $z = |L|$ , onde  $L$  é o comprimento de Monin-Obukhov, definido pela expressão:

$$L = -\frac{u_*^3}{k \frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0} \quad (3.1)$$

onde  $\Theta$  é a temperatura potencial média,  $(\overline{w\theta})_0$  é o fluxo de calor turbulento na superfície,  $u_*$  é a velocidade de fricção na superfície,  $k$  é a constante Von Kármán e  $g$  a aceleração da gravidade.

Para uma CLC bem desenvolvida  $|L|$  apresenta valores típicos entre 10 e 100 m de modo que  $z_i/|L| \geq 10$  (Panofsky e Dutton, 1984 [50]). A razão  $z_i/|L|$  pode ser considerada um parâmetro de estabilidade uma vez que expressa a importância da turbulência convectiva e da turbulência mecânica. Na CLS são observados grandes gradientes de temperatura e velocidade, e o fluxo de calor turbulento é aproximadamente constante.

A segunda, denominada Camada de Mistura compreende a região entre  $|L| < z < z_i$  onde  $z_i$  é a altura da CLC. Devido a forte mistura vertical a turbulência nesta região pode ser considerada quase homogênea. Modelos numéricos (Deardorff, 1972 [16]), observações de campo (Kaimal e Wyngaard, 1976 [31]) e experimentos de laboratório (Willis e Deardorff, 1974 [76]) mostram que os parâmetros de escalas mais importantes na descrição da camada de mistura são  $z_i$  e  $w_*$ , a escala de velocidade convectiva que é expressa por:

$$w_* = \left[ \frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0 z_i \right]^{1/3} \quad (3.2)$$

As dimensões dos grandes turbilhões convectivos são expressas em função de  $z_i$  e as velocidades turbulentas são proporcionais a  $w_*$ . Valores típicos de  $z_i$  e  $w_*$  são, respectivamente 1000 m à 2000 m e 2 m/s (Weil e Brower, 1984 [75]).

A camada de mistura é assim chamada devido a intensa mistura vertical que tende a conservar as variáveis como temperatura potencial e umidade aproximadamente constantes com a altura. A velocidade do vento nesta região é aproximadamente constante.

O topo da camada convectiva de mistura,  $z_i$ , é definido como a altura onde ocorre fluxo de calor negativo. Este nível é próximo da metade da zona de entranhamento. A capa de inversão atua como uma interface entre a camada de mistura e a atmosfera livre. A camada de mistura gerada principalmente pelo empuxo tende a ser mais uniformemente misturada que a gerada mecanicamente, devido a anisotropia na convecção favorecer movimentos verticais, enquanto a anisotropia por cisalhamento favorece movimentos horizontais. Para muitas situações atmosféricas, o cisalhamento do vento próximo ao solo é geralmente mais importante para a geração de mistura que aquela através do topo da camada de mistura. A camada de mistura dominada pela geração de turbulência devido ao empuxo é chamada Camada Limite Convectiva ou camada de mistura convectiva.

A escala de tempo convectiva,  $z_i/w_*$ , é da ordem de 10 a 20 minutos em muitos casos. Este é um típico período de tempo para o ar circular entre a superfície e o topo da camada de mistura. Então, mudanças no fluxo de calor superficial e outros forçantes superficiais podem se comunicar com o resto da camada de mistura em um curto espaço de tempo - aproximadamente 15 minutos.

Em regiões próximas ao topo localiza-se a terceira camada, chamada de camada interfacial, ou zona de entranhamento (ZE), que é caracterizada por ocorrer um fluxo de calor negativo. Acima desta camada tem-se a atmosfera livre.

Na camada interfacial, todas as variáveis aproximam-se gradualmente dos valores observados na atmosfera livre (acima de  $1.2z_i$ ). O rápido aumento da velocidade do vento através da capa de inversão, que é normal durante uma situação convectiva, tem implicações no transporte de *momentum* e calor nas regiões superiores da camada limite. A zona de entranhamento é a região de ar estaticamente estável no topo da camada de mistura, onde existe entranhamento de ar da atmosfera livre para baixo e penetração convectiva das plumas térmicas para cima. A ZE pode ser muito espessa - em média aproximadamente 40% da profundidade da camada de mistura.

Durante a convecção livre (o fluxo de calor é o principal forçante da turbulência), plumas térmicas provenientes da superfície ganham *momentum* e se elevam através da camada de mistura. Buscam o ar da atmosfera livre e encontram um empuxo negativo, mas penetram a uma curta distância devido a seu *momentum*. Isto é chamado de penetração da convecção. Há pouca turbulência ambiente na atmosfera livre, e então não há como dispersar o ar proveniente das termas para a atmosfera livre.

Durante a penetração, dentro da inversão, um pouco de ar é empurrado para dentro da camada de mistura. Este ar torna-se rapidamente misturado dentro da camada de mistura devido à forte turbulência e não retorna para cima na camada estável mesmo tendo seu empuxo positivo. O resultado é o entranhamento do ar da

atmosfera livre para dentro da camada de mistura. Logo, o crescimento da camada de mistura em espessura é devido ao processo de entranhamento.

## 3.2 A estrutura da turbulência da Camada Limite Convectiva

Na CLC a forte mistura vertical produzida pelo fluxo de calor turbulento provocado pelo aquecimento solar da superfície terrestre dá origem a uma estrutura de plumas térmicas, ar quente que se eleva até a base da inversão térmica, circundadas por ar mais frio que desce do topo das nuvens em direção ao solo.

Estas estruturas ocorrem simultaneamente, são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional, com escalas de tempo da ordem de 15 minutos, para condições suficientemente instáveis.

As observações na atmosfera indicam que a dispersão de poluentes na atmosfera ocorre de forma *assimétrica*, pois 40% da área de uma CLC é ocupada por plumas térmicas (*updrafts*), enquanto 60% é ocupada por ar mais frio que desce (*downdrafts*) [40]. Os poluentes emitidos sob estas condições apresentam uma dispersão em forma de *looping*, como pode ser visto na figura (3.4):

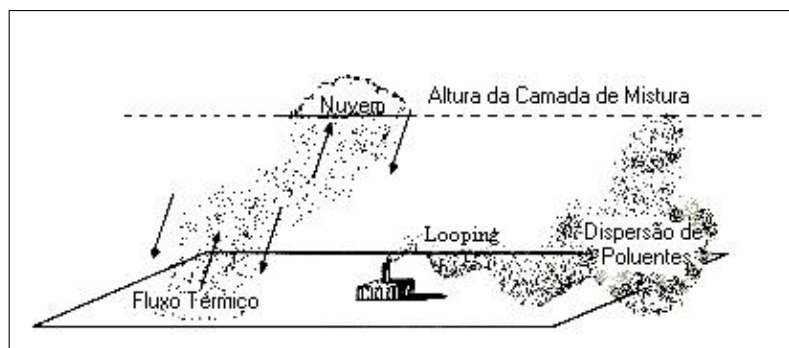


Figura 3.4: Representação do fluxo vertical da dispersão de um contaminante no interior de uma camada de mistura.

A *assimetria* ou *Skewness* ( $S_k$ ) é o grau de desvio, ou afastamento da simetria, de uma distribuição. Se a curva de frequência<sup>1</sup> de uma distribuição tem uma “cauda” maior à direita da ordenada máxima do que a esquerda, diz-se que a distribuição é *desviada para a direita*, ou que ela tem ***assimetria positiva***. Ocorrendo o inverso, diz-se que ela é *desviada para a esquerda*, ou que tem ***assimetria negativa*** [62]. Como mostrado nas figuras (3.5), (3.6) e (3.7).

Além disso, esse tipo de curva é chamado *unimodal* por possuir um único máximo. Existem outros tipos de curvas da frequência, a *bimodal*, se a curva possui dois máximos, e a *multimodal*, se a curva possui mais de dois máximos.

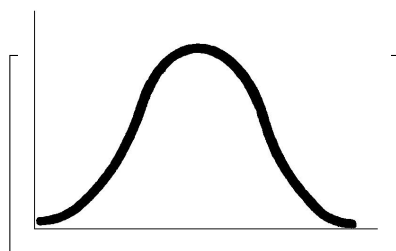


Figura 3.5: Curva simétrica

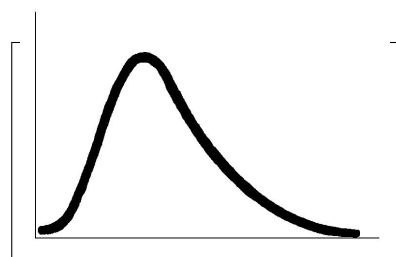


Figura 3.6: Assimetria positiva

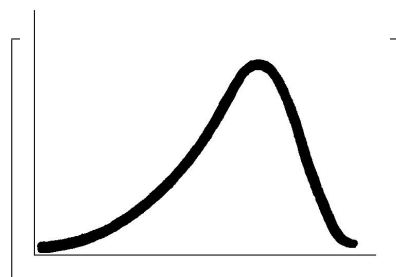


Figura 3.7: Assimetria negativa

---

<sup>1</sup>É uma representação gráfica de distribuição de frequência.



Se a área de correntes descendentes é maior que a de correntes ascendentes tem-se a *assimetria positiva*, caso contrário, *assimetria negativa*.

Há escalas de assimetria:

- $|S_k| < 0.15 \Rightarrow$  assimetria pequena
- $0.15 < |S_k| < 1 \Rightarrow$  assimetria moderada
- $|S_k| > 1 \Rightarrow$  assimetria elevada

Se  $S_k = -0.5$  então a assimetria é considerada moderada e negativa; ou seja, ocorre mais “*updrafts*” do que “*downdrafts*”.

Se  $S_k = 1.5$  então a assimetria é considerada elevada e positiva; ou seja, ocorre muito mais “*downdrafts*” do que “*updrafts*”.

Pela lei de conservação de massa, o ar quente subindo tem uma velocidade maior do que o ar frio que desce. Modelos numéricos mostram que esta estrutura assimétrica da CLC é responsável por padrões de dispersão vertical que são distintos dos tradicionais padrões Gaussianos (Lamb, 1982 [36]).

Esta assimetria na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés na CLC. A figura (3.8) mostra as correntes ascendentes e descendentes.

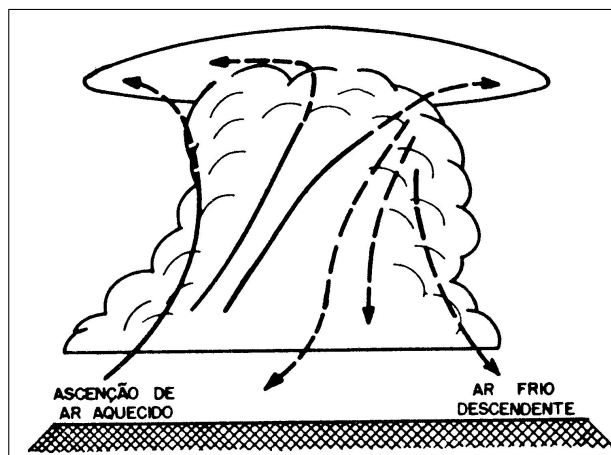


Figura 3.8: Deslocamento vertical de massas de ar causado pela convecção térmica

A circulação convectiva, incluindo o downdraft (ar descendo) e updraft (ar subindo), tem escalas horizontais de  $1.5z_i$  [Caughey e Palmer, 1979]. Velocidades verticais em termos podem alcançar 5 m/s ou mais, embora updrafts de 1 a 2 m/s sejam mais comuns.

O acréscimo do termo de contra-gradiente na equação de difusão-advecção leva em conta o efeito de transporte assimétrico no cálculo de concentração de poluentes, considerando de um modo mais completo a estrutura da turbulência na CLP.

## 4 DESCRIÇÃO DO MÉTODO

Toda substância emitida na atmosfera se dispersa através da difusão turbulenta causada pela variação de temperatura na camada limite. Esta variação provoca o aquecimento e 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. Conseqüentemente, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera é, geralmente, descrito pela equação de difusão-advecção.

Neste capítulo, apresenta-se a metodologia utilizada para solucionar a equação de difusão-advecção proposta por Van Dop [70] na qual considera-se o termo de contra-gradiente, com o objetivo de investigar o efeito do mesmo na equação.

### 4.1 O Modelo de Poluição do ar

A aproximação Euleriana para modelagem das propriedades estatísticas da concentração de poluentes em um escoamento turbulento (como o que ocorre na CLP) é muito utilizada no campo de estudos da poluição atmosférica. Na prática, somente parâmetros estatísticos Eulerianos são medidos. Uma medição Euleriana é feita por um instrumento cuja posição é fixa com relação ao fluxo. Neste contexto, a equação de difusão-advecção que descreve concentrações integradas lateralmente a partir de uma fonte contínua pode ser escrita como:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \quad (4.1)$$

onde  $\bar{c}$  é a concentração integrada lateralmente,  $u$  é a velocidade média do vento na direção horizontal e  $\overline{w'c'}$  é o fluxo turbulento de poluentes na vertical.

Uma maneira de solucionar o problema de fechamento da equação (4.1) está baseada na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão

molecular, assume que a turbulência é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média:

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (4.2)$$

onde  $K_z$  é o coeficiente de difusão vertical.

Desta forma, introduzindo-se a equação (4.2) na equação (4.1) obtém-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (4.3)$$

Esta equação é a mais utilizada na obtenção de um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos.

Neste trabalho, diferentemente da hipótese representada pela equação (4.2), considera-se uma equação genérica para a difusão turbulenta sugerida por Van Dop [70]:

$$\left( 1 + \frac{u S_k \sigma_w T_{Lw}}{2} \frac{\partial}{\partial z} \right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (4.4)$$

onde  $S_k$  é a *assimetria (skewness)*,  $T_{Lw}$  é a escala de tempo Lagrangeana vertical e  $\sigma_w$  é a velocidade turbulenta vertical. Verifica-se da equação (4.4) acima que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio. Portanto, a equação (4.1) pode ser escrita como:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{u S_k \sigma_w T_{Lw}}{2} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \quad (4.5)$$

ou

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \quad (4.6)$$

onde  $\beta$  representa os termos adicionais da equação:

$$\beta = \frac{u S_k \sigma_w T_{Lw}}{2} \quad (4.7)$$

Esses termos adicionais que aparecem na equação (4.4) levam em conta o caráter não-local na dispersão. O caráter local indica que apenas partículas vizinhas se relacionam, enquanto que o caráter não-local significa que quaisquer partículas podem se relacionar entre si. A figura (4.1) abaixo mostra um diagrama destes processo:

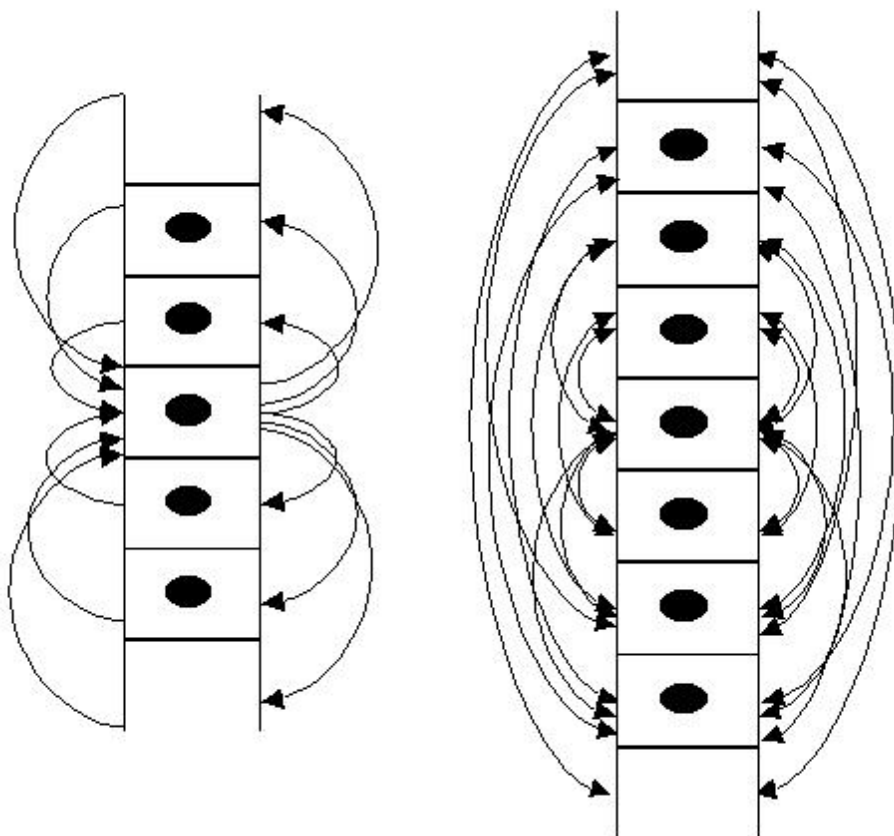


Figura 4.1: Efeito local e efeito não-local na dispersão.

Observa-se que quando ( $S_k \rightarrow 0$ ) na equação (4.6) tem-se que ( $\beta \rightarrow 0$ ), recaindo na equação original (4.3) que não considera o caráter não-local na dispersão de poluente. Dessa forma, o presente modelo estima de um modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta.

## 4.2 Método de resolução

Uma forma de se obter a solução da equação (4.6) é discretizando a CLC em  $N$  subcamadas, ou seja, considerando a CLC sendo um sistema de multicamadas, como pode-se ver na figura (4.2), sendo  $n^*$  a camada onde ocorre a emissão do poluente:

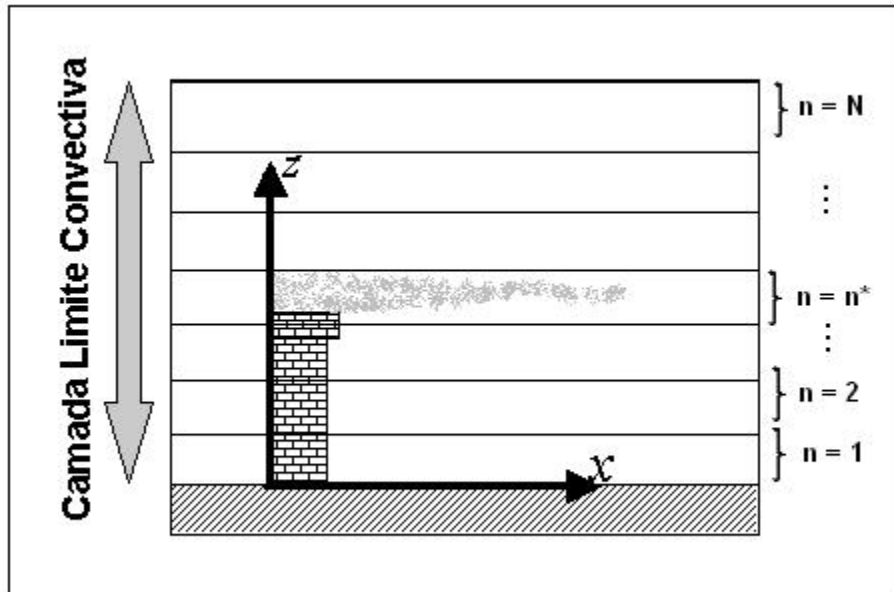


Figura 4.2: Desenho esquemático do modelo

Levando-se em consideração a dependência do coeficiente  $K_z$ , do perfil da velocidade do vento  $u$  e de  $\beta$  com relação a variável  $z$ , e a altura  $z_i$  da CLC

discretizada em  $N$  subintervalos, obtêm-se os seguintes valores médios para  $K_z$ ,  $u$  e  $\beta$  dentro de cada intervalo:

$$\begin{aligned} K_{z_n} &= \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} K_z(z) dz \\ u_n &= \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} u_z(z) dz \\ \beta_n &= \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} \beta_z(z) dz \end{aligned} \quad (4.8)$$

sendo que os valores iniciais de  $K_z(z)$ ,  $\beta_z(z)$  e  $u_z(z)$  serão determinados nos capítulos 5 e 6.

Deste modo, a equação (4.6) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$u_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \beta_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \right) \quad (4.9)$$

com  $z_{n-1} \leq z \leq z_n$ ;  $x > 0$  e  $n = 1, 2, \dots, N$ .

Toma-se como fronteiras a superfície terrestre e a altura da CLC, supondo que não há passagem de qualquer poluente; ou seja, o fluxo é zero no solo e no topo da CLC. Portanto, a equação (4.9) está sujeita às condições de contorno:

$$k_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0, z_i \quad (4.10)$$

E supondo uma fonte contínua com taxa de emissão contínua  $Q$  na altura  $H_s$ , tem-se a seguinte condição inicial:

$$\bar{c}_n(0, z) = \frac{Q}{u_n} \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \quad (4.11)$$

onde  $\delta$  é a função generalizada Delta de Dirac.

Além disso, supõe-se contato perfeito entre as subcamadas nas quais a CLC foi dividida, deste forma, consideram-se as condições de continuidade para a concentração e fluxo na interface, respectivamente:

$$\bar{c}_n = \bar{c}_{n+1} \quad z = z_n \quad e \quad n = 1, 2, \dots, (N - 1) \quad (4.12)$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \frac{\partial \bar{c}_{n+1}}{\partial z} \quad z = z_n \quad e \quad n = 1, 2, \dots, (N - 1) \quad (4.13)$$

Portanto, a solução da equação (4.9), juntamente com a condição de contorno (4.10) e a condição inicial (4.11), é obtida resolvendo N problemas do tipo:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \beta_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \right) \\ u_n \bar{c}_n(0, z) = Q \delta(z - H_s) \quad em \quad x = 0 \\ k_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0, z_i \end{array} \right. \quad (4.14)$$

sendo  $z_{n-1} \leq z \leq z_n$ , para  $n = 1 : N$ , onde  $\bar{c}_n$  representa a concentração na  $n$ -ésima subcamada.

Para determinar as  $2N$  constantes de integração, consideram-se  $(2N-2)$  condições de continuidade para a concentração (4.12) e fluxo (4.13) de concentração na interface.

Para resolver a equação (4.14), aplica-se a Transformada de Laplace denotando  $\mathcal{L}\{\bar{c}_n(x, z)\} = \bar{C}_n(s, z)$ . Segue abaixo os cálculos realizados:

$$\mathcal{L} \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} - \beta_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right] \right\} \quad (4.15)$$



$$\mathcal{L} \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) = K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} \quad (4.16)$$

$$\mathcal{L} \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} + \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \right\} = \mathcal{L} \left\{ K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} \quad (4.17)$$

$$u_n \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} + \beta_n \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \right\} = K_{z_n} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} \quad (4.18)$$

$$u_n \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} + \beta_n \frac{d}{dz} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} = K_{z_n} \frac{d^2}{dz^2} (\mathcal{L} \{ \bar{c}_n(x, z) \}) \quad (4.19)$$

$$u_n [s \bar{C}_n(s, z) - \bar{c}_n(0, z)] + \beta_n \frac{d}{dz} [s \bar{C}_n(s, z) - \bar{c}_n(0, z)] = K_{z_n} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) \quad (4.20)$$

$$u_n s \bar{C}_n(s, z) - u_n \bar{c}_n(0, z) + \beta_n s \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) - \beta_n \frac{d}{dz} \bar{c}_n(0, z) = K_{z_n} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) \quad (4.21)$$

$$-K_{z_n} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) + \beta_n s \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) + u_n s \bar{C}_n(s, z) - u_n \bar{c}_n(0, z) - \beta_n \frac{d}{dz} \bar{c}_n(0, z) = 0 \quad (4.22)$$

Dividindo ambos os lados da igualdade da equação (4.22) por  $(-K_{z_n})$ :

$$\frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{z_n}} \bar{C}_n(s, z) + \frac{u_n}{K_{z_n}} \bar{c}_n(0, z) + \frac{\beta_n}{K_{z_n}} \frac{d}{dz} \bar{c}_n(0, z) = 0 \quad (4.23)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} \overline{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \frac{d}{dz} \overline{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{z_n}} \overline{C}_n(s, z) = -\frac{u_n}{K_{z_n}} \overline{c}_n(0, z) - \frac{\beta_n}{K_{z_n}} \frac{d}{dz} \overline{c}_n(0, z) \quad (4.24)$$

Aplicando a condição inicial (4.11):  $\overline{c}_n(0, z) = \frac{Q \delta(z-H_s)}{u_n}$ , temos que:

$$\frac{d^2}{dz^2} \overline{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \frac{d}{dz} \overline{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{z_n}} \overline{C}_n(s, z) = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(z-H_s) - \frac{\beta_n}{K_{z_n}} \frac{d}{dz} \left( \frac{Q \delta(z-H_s)}{u_n} \right) \quad (4.25)$$

note que  $\frac{d}{dz} \left( \frac{Q \delta(z-H_s)}{u_n} \right) = 0$

Portanto, chega-se a equação:

$$\frac{d^2}{dz^2} \overline{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \frac{d}{dz} \overline{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{z_n}} \overline{C}_n(s, z) = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(z-H_s) \quad (4.26)$$

Que é uma equação diferencial linear não-homogênea, com coeficientes constantes. Para facilitar a notação reescrever-se a equação (4.26) da seguinte forma:

$$\overline{C}_n'' - \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \overline{C}_n' - \frac{u_n s}{k_{z_n}} \overline{C}_n = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(z-H_s) \quad (4.27)$$

A solução geral da equação (4.27), pode ser escrita sob a forma:

$$\overline{C}_n = \overline{C}_{n_p} + \overline{C}_{n_h} \quad (4.28)$$

onde  $\overline{C}_{n_p}$  é a *solução particular* e  $\overline{C}_{n_h}$  é a *solução homogênea* da equação homogênea associada.

#### 4.2.1 Solução homogênea

Equação homogênea associada à equação (4.27):

$$\overline{C_n}''(s, z) - \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \overline{C_n}'(s, z) - \frac{u_n s}{k_{z_n}} \overline{C_n}(s, z) = 0 \quad (4.29)$$

Resolvendo (4.29):

$$\lambda^2 - \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \lambda - \frac{u_n s}{k_{z_n}} = 0 \quad (4.30)$$

$$\lambda = \frac{\frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \pm \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{K_{z_n}}\right)^2 - 4 \cdot 1 \cdot \left(-\frac{u_n s}{k_{z_n}}\right)}}{2} \quad (4.31)$$

$$\lambda = \frac{\beta_n s}{2K_{z_n}} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{K_{z_n}}\right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{z_n}}} \quad (4.32)$$

Logo, para  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  reais e distintos:

$$\overline{C_{n_h}} = A_n e^{\left[\frac{\beta_n s}{2K_{z_n}} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{K_{z_n}}\right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{z_n}}}\right] z} + B_n e^{\left[\frac{\beta_n s}{2K_{z_n}} - \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{K_{z_n}}\right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{z_n}}}\right] z} \quad (4.33)$$

#### 4.2.2 Solução particular

Um caminho para se chegar a solução particular  $\overline{C_{n_p}}$ , é relacioná-la com a expressão de  $\overline{C_{n_h}}$ . De forma que  $\overline{C_{n_p}}$  pode ser escrita sob a forma integral como segue, conforme Kreider et al. [34]:

$$\overline{C_{n_p}} = \int_0^{z_i} G(z, t) h(t) dt \quad (4.34)$$

onde  $h(t)$  é uma função impulso; neste caso,  $h(t) = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(t - H_s)$ , e  $G(z, t)$  é a função de *Green* definida por:

$$G(z, t) = \frac{y_2(z)y_1(t) - y_1(z)y_2(t)}{W[y_1(t), y_2(t)]} \quad (4.35)$$

onde  $y_1(z)$  e  $y_2(z)$  são as duas soluções linearmente independentes da equação homogênea associada, e  $W [y_1(t), y_2(t)]$  é o *Wronskiano* destas duas soluções, dado por:

$$W [y_1(t), y_2(t)] = \begin{vmatrix} y_1(t) & y_2(t) \\ y_1'(t) & y_2'(t) \end{vmatrix} \quad (4.36)$$

Como:

$$\begin{aligned} y_1(z) &= e^{\left[ \frac{\beta_n s}{2K_{z_n}} + \frac{1}{2} \sqrt{\left( \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{z_n}}} \right] z} \\ y_2(z) &= e^{\left[ \frac{\beta_n s}{2K_{z_n}} - \frac{1}{2} \sqrt{\left( \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{z_n}}} \right] z} \end{aligned}$$

e denotando:

$$F_n = \frac{\beta_n s}{2K_{z_n}} \quad e \quad R_n = \frac{1}{2} \sqrt{\left( \frac{\beta_n s}{K_{z_n}} \right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{z_n}}}$$

Assim, encontra-se  $W [y_1(t), y_2(t)]$ :

$$W [y_1(t), y_2(t)] = \begin{vmatrix} e^{[F_n+R_n]t} & e^{[F_n-R_n]t} \\ [F_n + R_n] e^{[F_n+R_n]t} & [F_n - R_n] e^{[F_n-R_n]t} \end{vmatrix} \quad (4.37)$$

$$= [F_n - R_n] e^{[F_n+R_n]t} e^{[F_n-R_n]t} - [F_n + R_n] e^{[F_n-R_n]t} e^{[F_n+R_n]t} \quad (4.38)$$

$$= e^{[F_n+R_n]t} e^{[F_n-R_n]t} [(F_n - R_n) - (F_n + R_n)] \quad (4.39)$$

$$= -2R_n e^{[F_n+R_n]t + [F_n-R_n]t} = -2R_n e^{2F_n t} \quad (4.40)$$

Portanto, a função de *Green* procurada para o presente problema é:

$$G(z, t) = \frac{e^{[F_n - R_n]z} e^{[F_n + R_n]t} - e^{[F_n + R_n]z} e^{[F_n - R_n]t}}{-2R_n e^{2F_n t}} \quad (4.41)$$

Assim, substituindo (4.41) em (4.34), obtem-se:

$$\begin{aligned} \overline{C_{np}} &= \int_0^{z_i} \frac{e^{[F_n - R_n]z} e^{[F_n + R_n]t} - e^{[F_n + R_n]z} e^{[F_n - R_n]t}}{-2R_n e^{2F_n t}} \left[ -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(t - Hs) \right] dt \quad (4.42) \\ &= \frac{Q}{2R_n K_{z_n}} \left[ e^{[F_n - R_n]z} \left( \int_0^{z_i} \frac{e^{[F_n + R_n]t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - Hs) dt \right) - \right. \\ &\quad \left. \left( e^{[F_n + R_n]z} \int_0^{z_i} \frac{e^{[F_n - R_n]t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - Hs) dt \right) \right] \\ &= \frac{Q}{2R_n K_{z_n}} \left[ e^{[F_n - R_n]z} \left( \int_0^{z_i} \frac{e^{F_n t} e^{R_n t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - Hs) dt \right) - \right. \\ &\quad \left. e^{[F_n + R_n]z} \left( \int_0^{z_i} \frac{e^{F_n t} e^{-R_n t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - Hs) dt \right) \right] \\ &= \frac{Q}{2R_n K_{z_n}} \left[ e^{[F_n - R_n]z} \left( \int_0^{z_i} e^{-[F_n - R_n]t} \delta(t - Hs) dt \right) - \right. \\ &\quad \left. e^{[F_n + R_n]z} \left( \int_0^{z_i} e^{-[F_n + R_n]t} \delta(t - Hs) dt \right) \right] \\ &= \frac{Q}{2R_n K_{z_n}} \left[ e^{[F_n - R_n]z} (e^{-[F_n - R_n]Hs}) - e^{[F_n + R_n]z} (e^{-[F_n + R_n]Hs}) \right] \end{aligned}$$

Portanto a solução particular é:

$$\overline{C_{np}} = \frac{Q}{2R_n K_{z_n}} (e^{[F_n - R_n][z - Hs]} - e^{[F_n + R_n][z + Hs]}) \quad (4.43)$$

### 4.2.3 Solução geral

Assim, a solução geral da equação (4.27) é:

$$\begin{aligned} \overline{C}_n &= \overline{C}_{n_p} + \overline{C}_{n_h} \\ \overline{C}_n(s, z) &= A_n e^{[F_n - R_n]z} + B_n e^{[F_n - R_n]z} + \frac{Q}{2R_n K_{z_n}} \left( e^{[F_n - R_n][z - H_s]} - e^{[F_n + R_n][z + H_s]} \right) \end{aligned} \quad (4.44)$$

onde o último termo do lado direito é válido na subcamada onde contém a fonte.

Para se determinar as constantes  $A_n$  e  $B_n$ , aplica-se as  $(2N - 2)$  condições de continuidade de interface (4.12 e 4.13):

$$\begin{aligned} \text{em } z = 0: & \quad K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_1(s, 0) = 0 \\ \text{em } z = z_1: & \quad \begin{cases} \overline{C}_1(s, z_1) = \overline{C}_2(s, z_1) \\ K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_1(s, z_1) = K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_2(s, z_1) \end{cases} \\ \text{em } z = z_2: & \quad \begin{cases} \overline{C}_2(s, z_2) = \overline{C}_3(s, z_2) \\ K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_2(s, z_2) = K_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_3(s, z_2) \end{cases} \\ \text{em } z = z_3: & \quad \begin{cases} \overline{C}_3(s, z_3) = \overline{C}_4(s, z_3) \\ K_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_3(s, z_3) = K_{z_4} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_4(s, z_3) \end{cases} \\ \vdots & \quad \vdots \\ \text{em } z = z_{(N-1)}: & \quad \begin{cases} \overline{C}_{N-1}(s, z_{(N-1)}) = \overline{C}_N(s, z_{(N-1)}) \\ K_{z_{(N-1)}} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_{(N-1)}(s, z_{(N-1)}) = K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_N(s, z_{(N-1)}) \end{cases} \\ \text{em } z = z_i: & \quad K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_N(s, z_i) = 0 \end{aligned} \quad (4.45)$$

Com as expressões obtidas em (4.45) chega-se a um sistema linear de dimensão ( $d = 2N$ ) dado por  $\mathbf{MX}=\mathbf{b}$ :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & M_{46} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{53} & M_{54} & M_{55} & M_{56} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{65} & M_{66} & M_{67} & M_{68} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{75} & M_{76} & M_{77} & M_{78} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d-1,d-3} & M_{d-1,d-2} & M_{d-1,d-1} & M_{d-1,d} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d,d-1} & M_{d,d} \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

$$\mathbf{X} = [A_1 \quad B_1 \quad A_2 \quad B_2 \quad A_3 \quad B_3 \quad \dots \quad \dots \quad A_N \quad B_N]^T \quad (4.47)$$

$$\mathbf{b} = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad -Sp_{n^*} \quad -Sp'_{n^*} \quad \dots \quad 0 \quad 0]^T \quad (4.48)$$

onde  $n^*$  indica a região de emissão,  $Sp_{n^*}$  é a solução particulare  $Sp'_{n^*}$  é a derivada da solução particular, ambas aplicadas na região de emissão, ou seja:

$$Sp_{n^*} = \frac{Q}{2R_{n^*}K_{z_{n^*}}} (e^{[F_j - R_{n^*}][z - H_s]} - e^{[F_j + R_{n^*}][z + H_s]}) \quad (4.49)$$

$$Sp'_{n^*} = K_{z_{n^*}} R_{n^*} \frac{Q}{2R_{n^*}K_{z_{n^*}}} (e^{[F_{n^*} - R_{n^*}][z - H_s]} + e^{[F_{n^*} + R_{n^*}][z + H_s]}) \quad (4.50)$$

e a matriz  $\mathbf{M}$ , é definida como segue:

$$M_{11} = F_1 + R_1$$

$$M_{12} = F_1 - R_1$$

e para  $n = 1, 2, 3, \dots, N$

$$\begin{aligned}
M_{2n,2n-1} &= e^{[F_n+R_n]z_n} \\
M_{2n,2n} &= e^{[F_n-R_n]z_n} \\
M_{2n,2n+1} &= -e^{[F_{n+1}+R_{n+1}]z_n} \\
M_{2n,2n+2} &= -e^{[F_{n+1}-R_{n+1}]z_n} \\
M_{2n+1,2n-1} &= K_{z_n} [F_n + R_n] e^{[F_n+R_n]z_n} \\
M_{2n+1,2n} &= K_{z_n} [F_n - R_n] e^{[F_n-R_n]z_n} \\
M_{2n+1,2n+1} &= -K_{z_{(n+1)}} [F_{n+1} + R_{n+1}] e^{[F_{n+1}+R_{n+1}]z_n} \\
M_{2n+1,2n+2} &= -K_{z_{(n+1)}} [F_{n+1} - R_{n+1}] e^{[F_{n+1}-R_{n+1}]z_n}
\end{aligned}$$

e, por fim:

$$\begin{aligned}
M_{d,d-1} &= [F_N + R_N] e^{[F_N+R_N]z_N} \\
M_{d,d} &= [F_N - R_N] e^{[F_N-R_N]z_N}
\end{aligned}$$

O sistema  $\mathbf{MX}=\mathbf{b}$  será resolvido numericamente utilizando o método da *Eliminação de Gauss* [8]. O algoritmo foi implementado na linguagem de programação FORTRAN 90 [32].

A variável complexa “ $s$ ” está presente nos cálculos da resolução de (4.46), para tanto, é substituída pelas raízes da *Quadratura Gaussiana* [63] e dividida pela variável  $x$ ;  $\left(s = \frac{p_i}{x}\right)$ .

#### 4.2.4 Inversão da solução

A solução (4.44) foi obtida analiticamente, como pode ser conferido, porém a concentração de poluentes  $\bar{c}_n(x, z)$ , é determinada invertendo-se numericamente  $\bar{C}_n(s, z)$ .

##### 4.2.4.1 Esquema da Quadratura de Gauss

Se a transformada de Laplace de uma função  $f(t)$  é  $F(s)$ , isto é:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = F(s)$$



então  $f(t)$  é a Transformada Inversa de Laplace, simbolicamente:

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1} \{F(s)\}$$

Existe uma fórmula para a inversão da Transformada de Laplace de uma função  $F(s)$ , com  $Re(s) > \alpha$  definida pela integral de Mellin:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} F(s) ds, \quad t > 0 \quad (4.51)$$

onde  $\gamma$  é um real qualquer tal que  $\gamma > \alpha$ .

A integração em (4.51) deve ser efetuada ao longo de uma reta  $s = \gamma$  no plano complexo, onde  $s = a + bi$ . O número real  $\gamma$  é escolhido de modo que  $s = \gamma$  esteja à direita de todas as singularidades, mas no mais, é arbitrário, [61].

A Transformada Inversa de Laplace também pode ser determinada através do esquema da *Quadratura Gaussiana* [63], sendo que:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} p^{-1} e^p F(p) dp \approx \sum_{i=1}^N w_i F(p_i) \quad (4.52)$$

onde  $w_i$  e  $p_i$  são, respectivamente, os pesos e as raízes da *Quadratura de Gauss*.

Assim, temos que:

$$\bar{c}_n(x, z) = \mathcal{L}^{-1} \{ \bar{C}_n(s, z) \} \quad (4.53)$$

$$\bar{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{sx} \bar{C}_n(s, z) ds \quad (4.54)$$

fazendo uma mudança de variável

$$s = \frac{p}{x} \Rightarrow xs = p \quad \text{logo} \quad \begin{aligned} s \rightarrow \gamma + i\infty &\Rightarrow p \rightarrow \gamma^* + i\infty \\ s \rightarrow \gamma - i\infty &\Rightarrow p \rightarrow \gamma^* - i\infty \end{aligned}$$

$$ds = \frac{1}{x} dp \quad e \quad \overline{C}_n(s, z) = F\left(\frac{p}{x}, z\right)$$

$$\overline{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L e^p F\left(\frac{p}{x}, z\right) \frac{1}{x} dp \quad (4.55)$$

$$x\overline{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L e^p F\left(\frac{p}{x}, z\right) dp \quad (4.56)$$

fazendo [2]:

$$G(p) = p^\alpha F\left(\frac{p}{x}, z\right) \Rightarrow F\left(\frac{p}{x}, z\right) = G(p)p^{-\alpha}, \quad \text{onde } \alpha = 1$$

substituindo a igualdade acima em (4.56) e usando (4.52) tem-se:

$$x\overline{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L e^p G(p) p^{-\alpha} dp = \sum_{j=1}^{N_i} w_j G(p_j) \quad (4.57)$$

implicando em

$$\overline{c}_n(x, z) = \frac{1}{x} \sum_{j=1}^{N_i} w_j G(p_j) \quad (4.58)$$

mas:

$$G(p) = p^\alpha F\left(\frac{p}{x}, z\right) \quad \text{onde } \alpha = 1$$

portanto:

$$\bar{c}_n(x, z) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{x} w_j F\left(\frac{p_j}{x}, z\right) \quad (4.59)$$

Ou seja, a solução geral procurada é:

$$\bar{c}_n(x, z) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{x} w_j [A_n e^{[F_n^* + R_n^*]z} + B_n e^{[F_n^* - R_n^*]z}] \quad (4.60)$$

onde não há fonte, e:

$$\begin{aligned} \bar{c}_n(x, z) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{x} w_j [A_n e^{[F_n^* + R_n^*]z} + B_n e^{[F_n^* - R_n^*]z} + \\ + \frac{Q}{2R_n^* K_{z_n}} (e^{[F_n^* - R_n^*][z - H_s]} - e^{[F_n^* + R_n^*][z - H_s]})] \end{aligned} \quad (4.61)$$

onde há emissão da fonte.

Sendo que:

$$F_n^* = \frac{\beta_n}{2K_{z_n}} \frac{p_j}{x} \quad e \quad R_n^* = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n}{K_{z_n}} \frac{p_j}{x}\right)^2 + \frac{4u_n}{K_{z_n}} \frac{p_j}{x}}$$

Em que  $N_i$  é o número de inversões. Pode ser conferido no livro de Stroud-Secret [63] que o módulo da parte real da raiz do esquema da Quadratura Gaussiana para a inversão da transformada de Laplace aumenta com  $N$  (a ordem da aproximação). Tendo em mente que a solução para a concentração utilizando a transformada de Laplace possui um termo exponencial do tipo  $e^{\pm \left(\sqrt{\frac{p_j}{x}}\right)z}$ , foi observado o aparecimento de *overflow* para o argumento positivo da exponencial e *underflow* para o argumento negativo quando  $N_i$  assume valores maiores que 8. Dessa forma, para eliminar problemas deste tipo precisa-se executar os cálculos estabelecendo uma limitação para  $N_i$ , ou seja,  $N_i \leq 8$ .

Foram testados valores variados para  $N_i$  ( $N_i = 4, N_i = 6$  e  $N_i = 8$ ), cujo melhores resultados foram obtidos para  $N_i = 8$ . Além disso, há trabalhos na literatura que indicam maior estabilidade computacional com  $N_i = 8$  (Vilhena e Barichello [73] e Vilhena e Streck [74]).

As constantes de integração  $A_n$  e  $B_n$  são determinadas, agora, resolvendo o sistema  $\mathbf{M}\mathbf{x}=\mathbf{b}$  dados pelas equações (4.46), (4.47) e (4.48) sendo que  $F_n$  e  $R_n$  são substituídos por  $F_n^*$  e  $R_n^*$ , respectivamente.

A solução estará completamente determinada quando os parâmetros turbulentos forem especificados, e isto será feito no capítulo 5.

## 5 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA

A parametrização turbulenta apropriada complementa a modelagem do transporte de contaminantes na atmosfera. Uma vez que relaciona os fenômenos naturais com os modelos matemáticos descrevendo, assim, a física da turbulência. A forma como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados com a estrutura da CLP é de fundamental importância para a validação do modelo.

Os coeficientes de difusão vertical propostos por Degrazia et al. ([19] e [18]) são formulados a partir da teoria de difusão de Taylor [65] combinados com o espectro de energia cinética turbulenta, a fim de descrever a estrutura turbulenta da CLC.

Os parâmetros de dispersão são quantidades de grande importância na modelagem de difusão. A construção inicia com a equação para o parâmetro de dispersão generalizada  $\sigma_\alpha^2$  dado por Pasquill e Smith [53]:

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen}^2\left(\frac{\pi n t}{\beta_i}\right)}{n^2} dn \quad (5.1)$$

com:

$$\alpha = x, y, z$$

$$i = u, v, w$$

onde  $F_i^E(n)$  é o valor do espectro de energia Euleriana normalizado pela variância da velocidade Euleriana,  $\sigma_i$  é o desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento,  $n$  é a frequência,  $t$  o tempo de viagem e  $\beta_i$  é a razão das escalas integral de tempo Lagrangeana e Euleriana:  $\frac{T_{L_i}}{T_i}$ , sendo que:

$$T_{L_i} = \frac{\beta_i F_i^E(0)}{4} \quad (5.2)$$

Uma expressão para o coeficiente de difusão, sugerido por Batchelor [3], pode ser escrito por:

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt} \quad (5.3)$$

Derivando a equação (5.1) em relação a variável temporal, e substituindo (5.3), obtém-se:

$$K_\alpha = \frac{d}{dt} \left( \frac{\sigma_\alpha^2}{2} \right) = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen} \left( \frac{2\pi n t}{\beta_i} \right)}{n} dn \quad (5.4)$$

Para grandes tempos de difusão ( $t \rightarrow \infty$ ), a função filtro na integral (5.4) é muito limitada, pois o primeiro zero da função filtro ocorre em  $2\pi n t / \beta_i = \pi$ . Portanto  $n = \beta_i / (2t) \rightarrow 0$ , se  $t$  é muito grande. Neste caso  $F_i^E(n) \approx F_i^E(0)$  (Sorbjan [60]), de modo que a taxa de dispersão torna-se independente do tempo de viagem e pode ser expressa como uma função das propriedades locais da turbulência, de forma que:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} F_i^E(0) \int_0^\infty \frac{\text{sen} \left( \frac{2\pi n t}{\beta_i} \right)}{n} dn \quad (5.5)$$

onde  $F_i^E(0)$  é o valor do espectro de energia Euleriano em  $n = 0$ .

A integral na equação (5.5) é igual a  $\frac{\pi}{2}$ , para  $t > 0$ . Assim, o coeficiente de difusão para grandes tempos assume a seguinte forma:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(0)}{4} \quad (5.6)$$

A partir da equação (5.6), conclui-se que a difusão para grandes tempos depende do comportamento do espectro próximo à origem.

A equação para o espectro da velocidade Euleriana sob condições instáveis, pode ser expressa como uma função de escalas convectivas como (Degrazia et al [17]):

$$\frac{nS_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1.06 c_i f \psi^{2/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3} \left[1 + 1.5 \left(\frac{f}{(f_m^*)_i}\right)\right]^{5/3}} \quad (5.7)$$

onde:

- $c_i = \alpha_i (2\pi k)^{-2/3}$  é derivado experimentalmente a partir do espectro para cada componente de direção do vento. Seu valor é 0.36 para as componentes transversais e 0.27 para componente longitudinal,  $\alpha_i$ , para as componentes  $u$ ,  $v$  e  $w$  respectivamente, é uma constante que depende das condições atmosféricas e  $k = 0.4$  é a constante de Von Kármán;
- $f = \frac{nz}{u(z)}$ ,  $z$  é a altura acima do solo e  $u(z) = u$  é a velocidade média do vento horizontal;
- $(f_m^*)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i}$  é a frequência adimensional do pico espectral vertical;
- $z_i$  é o topo da camada limite convectiva;
- $w_*$  é a escala de velocidade convectiva;
- $\psi = 1.5 - 1.2 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/3}$  é a taxa de dissipação.
- $(\lambda_m)_w$  é o comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical que é relevante no estudo e na investigação do transporte turbulento na camada convectiva, (Carvalho et al. [11]):

$$(\lambda_m)_w = \begin{cases} \frac{z}{0.55 - 0.38 \left|\frac{z}{L}\right|} & 0 \leq z \leq |L| \\ 5.9z & |L| \leq z \leq 0.1 z_i \\ 1.8 z_i \left[1 - e^{\left(\frac{-4z}{z_i}\right)} - 0.0003 e^{\left(\frac{8z}{z_i}\right)}\right] & 0.1 z_i < z \end{cases} \quad (5.8)$$

- $L$  é o comprimento de Monin-Obukov.

Substituindo  $f$  em (5.7) e integrando a equação resultante sobre toda o domínio da frequência tem-se:

$$\sigma_i^2 = 1.06 c_i \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_i^{2/3}} \left( \frac{z}{z_i} \right)^{2/3} w_*^2 \quad (5.9)$$

Normalizando o espectro de energia Euleriana pela variância da velocidade turbulenta obtém-se:

$$F_i^E(n) = \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2} = \frac{z}{u (f_m^*)_i} \left[ 1 + 1.5 \frac{f}{(f_m^*)_i} \right]^{-5/3} \quad (5.10)$$

Conseqüentemente, em  $n = 0$ :

$$F_i^E(0) = \frac{z}{u (f_m^*)_i} \quad (5.11)$$

De acordo com Degrazia et al. [18],  $\beta_i$  pode ser expresso como:

$$\beta_i = 0.55 \frac{u}{\sigma_i} \quad (5.12)$$

Substituindo as equações (5.11) e (5.12) em (5.6) tem-se, na direção  $z$ :

$$K_z = \frac{0.55}{4} \frac{\sigma_w z}{(f_m^*)_w} \quad (5.13)$$

ainda, a partir das equações (5.2), (5.11) e (5.12) obtém-se:

$$T_{L_i} = \frac{0.55}{4} \frac{z}{\sigma_i (f_m^*)_i} \quad (5.14)$$

Nas figuras a seguir são apresentadas o comportamento das equações (5.13), (5.8), (5.9) e (5.14), respectivamente:



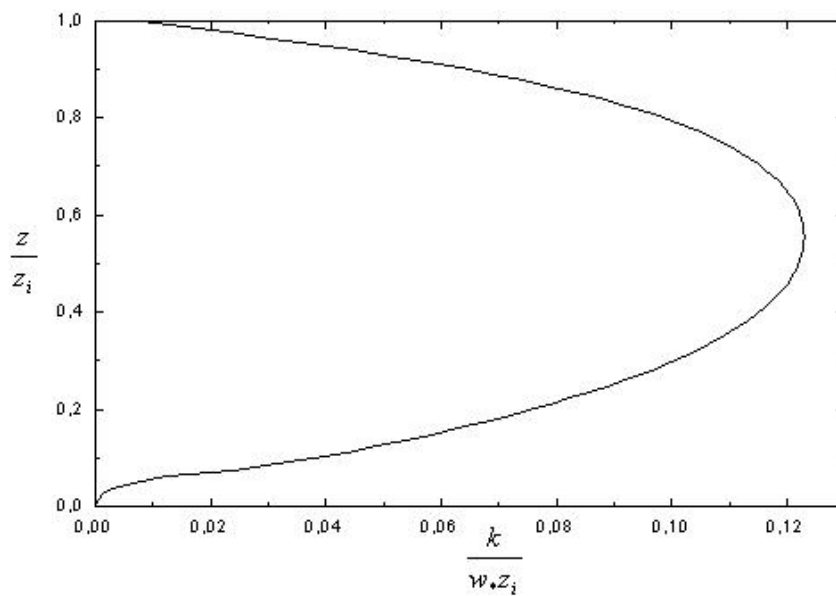


Figura 5.1: Comportamento do coeficiente de difusão adimensional para grandes tempos dependente das propriedades da turbulência em função da altura adimensional.

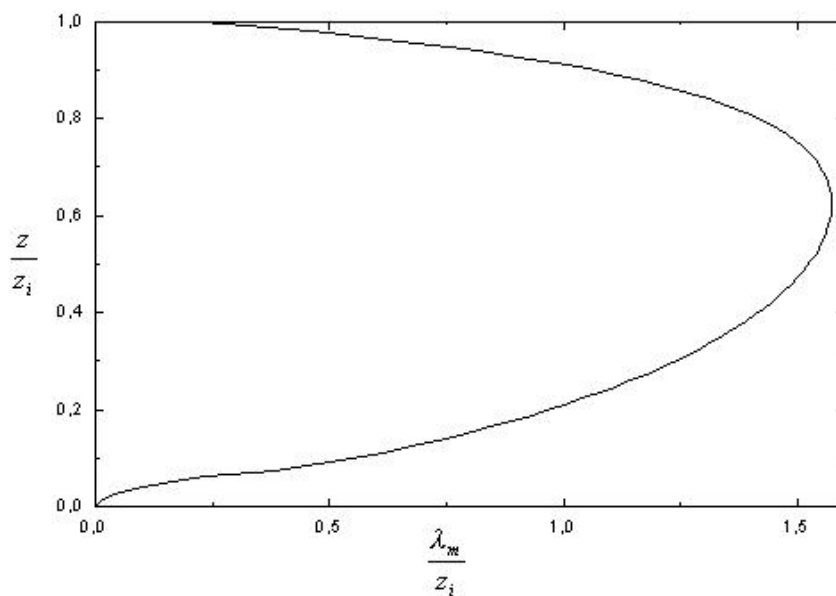


Figura 5.2: Comportamento do comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical adimensional em função da altura adimensional.

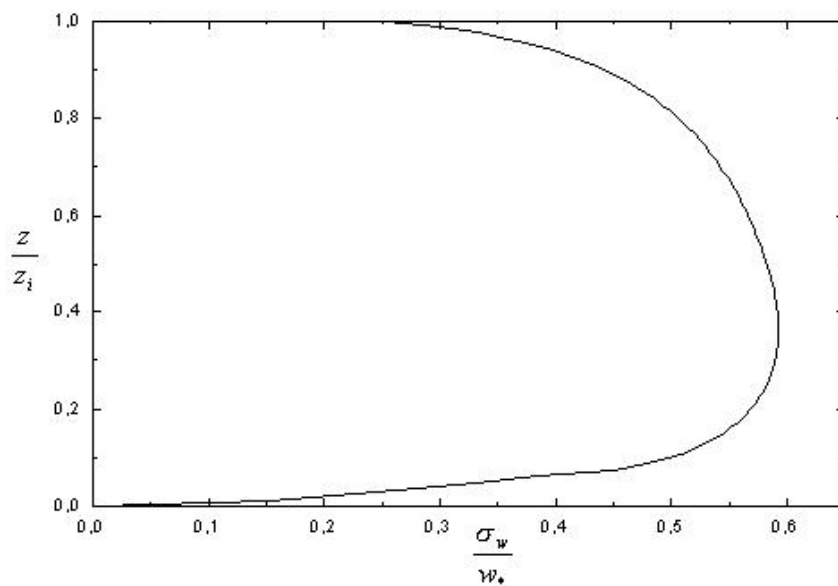


Figura 5.3: Comportamento da velocidade turbulenta vertical adimensional em função da altura adimensional.

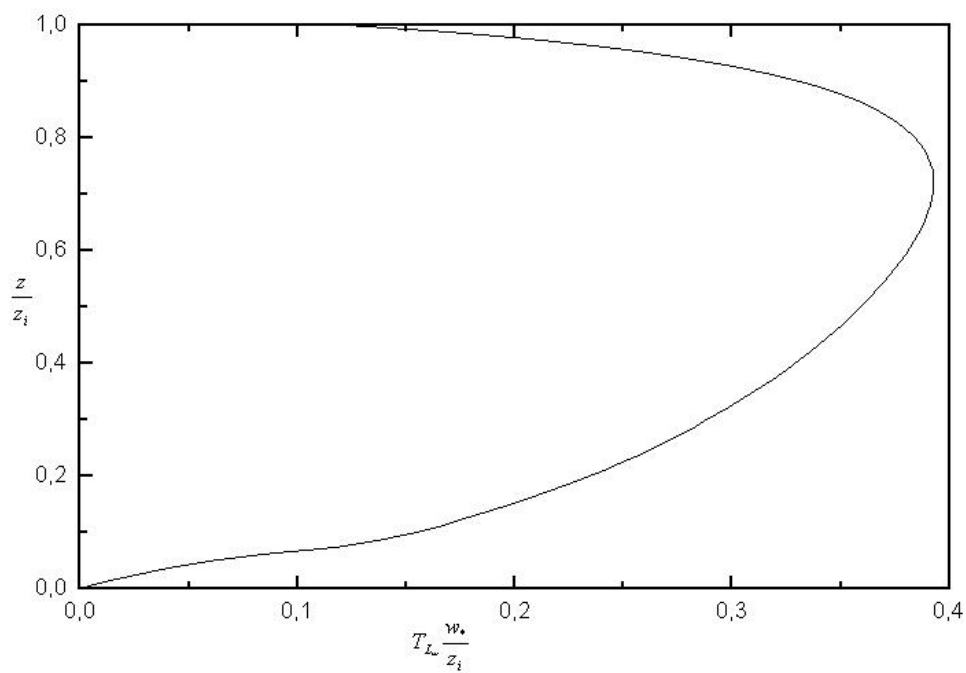


Figura 5.4: Comportamento tempo de correlação Lagrangeana em função da altura adimensional.

Observa-se nos gráficos acima, para todas as equações analisadas, que eles apresentam valores nulos (ou próximos a este valor) na base e no topo da CLC.

O coeficiente de difusão, no gráfico (5.1), apresenta o seu máximo aproximadamente no meio da camada, este comportamento está relacionado ao comprimento de onda  $(\lambda_m)_w$  dado pela equação (5.8).

O comprimento de onda cresce rapidamente até  $0.65z_i$  aproximadamente onde atinge o seu máximo, como pode ser visto no gráfico (5.2).

O gráfico (5.3) representa a velocidade turbulenta vertical que cresce lentamente até o valor de  $0.1z_i$  que representa a camada superficial, atingindo o valor máximo em até  $0.3z_i$

O tempo de correlação Lagrangeana, no gráfico (5.4), cresce rapidamente atingindo seu valor máximo em  $0.7z_i$  acima da metade da CLP.

## 6 PERFIL DO VENTO

Neste estudo, o perfil da velocidade média do vento tem sido parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML (Berkowicz et al., 1986 [4]):

$$u = \frac{u_*}{k} \left[ \ln \left( \frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left( \frac{z_0}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b \quad (6.1)$$

onde  $z_b = \min [|L|, 0.1z_i]$ ,  $k = 0.4$  é a constante de Von Karman,  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $z_0$  o comprimento de rugosidade e  $\Psi_m$  é a função estabilidade dada por (Paulsen, 1975 [54]):

$$\Psi_m = 2 \ln \left[ \frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[ \frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2} \quad (6.2)$$

com  $A$  definido por:

$$A = \left( 1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/4} \quad (6.3)$$

O perfil da velocidade média do vento derivado da equação (6.1) será utilizado na simulação do modelo nos experimentos descritos neste trabalho: Experimento de Copenhagen e Experimento de Prairie Grass.

## 7 VALIDAÇÃO DO MODELO

O processo de validação do modelo é uma atitude de investigação científica, onde se busca a compreensão e a conseqüente verbalização das soluções obtidas.

Encontrar o resultado do problema proposto faz parte do processo porém o questionamento do resultado obtido, bem como o do problema original, é fundamental. Resolver um problema não é só a compreensão daquilo que se é exigido, nem mesmo uma aplicação mecânica de fórmulas, o que, inclusive, pode condicionar a um determinado método de raciocínio. “... *O conhecimento emerge de problemas a serem resolvidos e de situações a serem dominadas...*” (Vegnaud, apud Carvalho, p. 87, [9]).

Cada problema deve ter um objetivo específico e uma característica peculiar, caso contrário deixa de ser identificado como um desafio para o resolvidor e passa a se tornar um exercício habitual repetitivo.

Um modelo operacional para o cálculo da dispersão de poluentes que é utilizado para prevenção da qualidade do ar deve ter os seguintes atributos:

- Incorporar uma descrição realística dos processos físicos que governam o sistema a ser modelado.
- Produzir estimativas adequadas de dados observacionais.

Hanna [27], dividiu o processo de validação em três etapas com o objetivo de organizar um pouco esse processo:

1. Exame da estrutura do modelo,
2. Análise da sensibilidade, e
3. Teste das predições do modelo contra observações.

É importante examinar as hipóteses envolvidas na formulação do modelo que está sendo validado, compreender o problema e perceber claramente o que é necessário para a sua validação.

Este passo é fundamental porque oportuniza a organização do modelo e sua consolidação determinando uma discriminação entre os diferentes modelos.

Análise sensitiva é essencial para identificar os dados de entrada críticos do modelo. O teste do modelo deve concentrar-se nos dados de entrada que tornam o modelo mais sensível, ou seja, os diferentes coeficientes de difusão, perfis de vento, e os termos adicionais.

## 7.1 Dados experimentais

Para avaliar a performance do modelo foram utilizados dados observados em dois experimentos: Experimento de Copenhagen, que é um experimento de fonte alta, e Experimento de Prairie Grass, por ser de fonte baixa; a serem confrontados com os gerados pelo modelo.

A razão entre a altura onde ocorre a emissão de poluentes ( $H_s$ ) e a altura da CLC ( $z_i$ ) determina se o experimento é considerado de fonte alta ou baixa, isto é:

se  $\frac{H_s}{z_i} < 0.1$  o experimento é considerado de fonte baixa;

se  $\frac{H_s}{z_i} > 0.1$  o experimento é considerado de fonte alta.

Ainda, a razão entre a altura da CLC ( $z_i$ ) e do comprimento de Monin-Obukov ( $L$ ) determina se o experimento é de convecção fraca, moderada ou alta; isto é:

se  $\frac{z_i}{|L|} < 5$  tem-se convecção fraca;

se  $5 < \frac{z_i}{|L|} < 10$  tem-se convecção moderada;

se  $\frac{z_i}{|L|} > 10$  tem-se convecção alta.

### 7.1.1 O Experimento de Copenhagen

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning [25] e Gryning e Lyck [26], consistiram na liberação do traçador hexafluoreto de enxofre ( $SF_6$ ) na região norte de Copenhagen.

O poluente foi abandonado sem empuxo de uma fonte de 115 m de altura, essa fonte consiste de um cilindro posicionado perpendicularmente ao chão simulando uma chaminé, e coletado por três arcos perpendiculares ao vento médio. Os arcos foram posicionados de 2 a 6 km do ponto no qual ocorreu a liberação do traçador, como

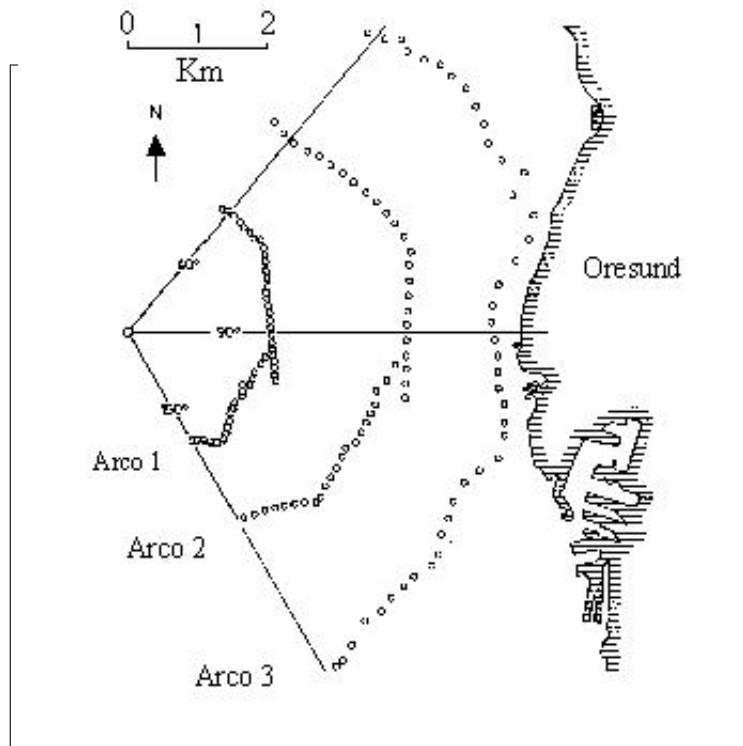


Figura 7.1: Experimento de Copenhagen

As concentrações integradas lateralmente (normalizadas pela taxa de emissão  $Q$ ) foram observadas ao nível do solo ( $z = 0$ ). As liberações de  $SF_6$  começaram  $1h$  antes do início da medição feita pelos arcos. A média das medidas foi de  $1h$  e suas imprecisões são de 10%. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de  $0.6 m$ .

Na Tabela 7.1 abaixo são exibidos os dados micrometeorológicos dos experimentos de dispersão na Camada Limite Convectiva de Copenhague para serem utilizados no modelo dado pelas equações (4.60) e (4.61).

Tabela 7.1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhague

Exp.	$u$ ( $ms^{-1}$ )	$u_*$ ( $ms^{-1}$ )	$L$ ( $m$ )	$w_*$ ( $ms^{-1}$ )	$z_i$ ( $m$ )	$\frac{H_s}{z_i}$	$\frac{z_i}{ L }$
1	3.4	.36	-37	1.8	1980	0.06	53.51
2	10.6	.73	-292	1.8	1920	0.06	6.57
3	5.0	.38	-71	1.3	1120	0.1	15.77
4	4.6	.38	-133	0.7	390	0.29	2.93
5	6.7	.45	-444	0.7	820	0.14	1.85
6	13.2	1.05	-432	2.0	1300	0.09	3.01
7	7.6	.64	-104	2.2	1850	0.06	17.78
8	9.4	.69	-56	2.2	810	0.14	14.46
9	10.5	.75	-289	1.9	2090	0.06	7.23

### 7.1.2 O Experimento de Prairie Grass

O Experimento de Prairie Grass foi realizado em O'Neill, Nebraska no ano de 1956, descrito por Barad [1]. O traçador usado neste experimento é o dióxido de enxofre ( $SO_2$ ) que foi abandonado a uma altura de  $0.5 m$  e coletado a  $1.5 m$  em arcos concêntricos em distâncias de 50, 100, 200, 400 e 800  $m$ . A fonte poluidora consistia de um cilindro posicionado perpendicularmente ao chão simulando uma chaminé. A imprecisão das medidas deste experimento é de 10%.

Portanto, a performance do modelo para fonte baixa é confrontada com os dados experimentais deste experimento. O terreno de Prairie Grass é plano com comprimento de rugosidade aerodinâmica de apenas  $0.6 cm$ .



Os parâmetros micrometeorológicos deste experimento de dispersão estão na Tabela 7.2 abaixo:

Tabela 7.2: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Prairie Grass

Exp.	$L$ (m)	$z_i$ (m)	$w_*$ ( $ms^{-1}$ )	$u$ ( $ms^{-1}$ )	$Q$ $gs^{-1}$	$\frac{H_s}{z_i}$	$\frac{z_i}{ L }$
1	-9	260	0.84	3.2	82	$1.9 \cdot 10^{-3}$	28.89
5	-28	780	1.64	7.0	78	$6.4 \cdot 10^{-4}$	27.86
7	-10	1340	2.27	5.1	90	$3.7 \cdot 10^{-4}$	134.0
8	-18	1380	1.87	5.4	91	$3.6 \cdot 10^{-4}$	76.67
9	-31	550	1.70	8.4	92	$9.0 \cdot 10^{-4}$	17.74
10	-11	950	2.01	5.4	92	$5.3 \cdot 10^{-4}$	86.36
15	-8	80	0.70	3.8	96	0.01	10.0
16	-5	1060	2.03	3.6	93	$4.7 \cdot 10^{-4}$	221.0
19	-28	650	1.58	7.2	102	$7.7 \cdot 10^{-4}$	23.21
20	-62	710	1.92	11.3	102	$7.0 \cdot 10^{-4}$	11.45
25	-6	650	1.35	3.2	104	$7.7 \cdot 10^{-4}$	108.33
26	-32	900	1.86	7.8	98	$5.6 \cdot 10^{-4}$	28.13
27	-30	1280	2.08	7.6	99	$3.9 \cdot 10^{-4}$	42.67
30	-39	1560	2.23	8.5	98	$3.2 \cdot 10^{-4}$	40.0
43	-16	600	1.66	6.1	99	$8.3 \cdot 10^{-4}$	37.5
44	-25	1450	2.20	7.2	101	$3.4 \cdot 10^{-4}$	58.0
49	-28	550	1.73	8.0	102	$9.1 \cdot 10^{-4}$	19.64
50	-26	750	1.91	8.0	103	$6.7 \cdot 10^{-4}$	28.85
51	-40	1880	2.30	8.0	102	$2.7 \cdot 10^{-4}$	47.00
61	-38	450	1.65	9.3	102	$1.1 \cdot 10^{-3}$	11.84

Os traçadores utilizados nos experimentos são mais densos que o ar ( $SF_6$  e  $SO_2$ ), de modo que eles se depositariam rapidamente no solo depois de sua liberação pela fonte. A utilização destes traçadores foi possível devido ao fato que a sua liberação ocorreu em níveis de concentração muito pequenos de forma que o peso molecular da mistura liberada é próximo ao peso molecular do ar e assim os efeitos gravitacionais sobre o traçador podem ser desconsiderados. Sabe-se que para a simulação deste modelo o material liberado deve ser um gás estável e que permaneça suspenso no ar por um longo tempo (não é levado em consideração a perda de material da pluma) [40].

## 7.2 Índices Estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados nos experimentos de Copenhagen e Prairie Grass, é feita através de índices estatísticos presentes na literatura.

Utilizando a seguinte notação: os índices  $o$  e  $p$  indicam respectivamente, as quantidades observadas e previstas,  $\bar{C}$  é a concentração de poluentes e  $\sigma$  é o desvio padrão. Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

1. Erro quadrático médio normalizado:  $Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\bar{C}_o \bar{C}_p}$ 
  - informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos e observadas. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.
2. Coeficiente de correlação:  $Cor = \frac{\overline{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p}$ 
  - 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 (%) que estão entre  $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$
4. Fração de Inclinação:  $Fb = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0,5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)}$ 
  - informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.
5. Desvio fracional padrão:  $Fs = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}$ 
  - O valor ótimo é zero.

Para realização desta análise estatística emprega-se um programa desenvolvido por Hanna em 1989 [28], que utiliza um procedimento padrão reconhecido pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera.

## 8 RESULTADOS

Neste capítulo apresenta-se os resultados das simulações do modelo quando parametrizado com o perfil do vento da equação (6.1) e o coeficiente de difusão dado pela equação (5.13). Adicionalmente, verifica-se a influência da assimetria (*skewness*) no fechamento da turbulência.

Este é um método semi-analítico já que a concentração final de poluentes é determinada com auxílio computacional. As equações (4.60) e (4.61) juntamente com as parametrizações utilizadas dadas pela equação (5.13) são elementos característicos do presente modelo que, acrescidas dos dados micrometeorológicos dos experimentos produzem a concentração de poluentes.

Para um melhor entendimento deste processo de obtenção da concentração segue abaixo um esquema do algoritmo implementado na linguagem de programação FORTRAN 90 [32]:

- Dados de entrada: dados micrometeorológicos do experimento:

$$u, u_*, L, W_*, z_i, z_0, H_s, Q$$

- Discretiza a CLC em N subcamadas
  - Perfil do vento:  $u_n$
  - Coeficiente de difusão:  $K_{z_n}$
  - Termos adicionais:  $\beta_n$
- Para pontos distantes da fonte: ( $x = 10 : 6000$  de 50 em 50)
  - Para os pontos e raízes da Quadratura: ( $j = 1 : 8$ )
    - \* Monta e resolve o sistema (Eliminação de Gauss)
    - \* Calcula a concentração através das equações (4.60) e (4.61).
- Calcula os índices estatísticos

- Concentração final
- Fim do Programa

Para o experimento de Copenhagen foram utilizadas camadas de  $10 m$  até o topo da CLC. Para o experimento de Prairie Grass, camadas de  $0.5 m$  até  $0.1 z_i$  e acima desta altura, foram utilizadas regiões de  $10 m$ , sendo que em cada uma foi assumido um valor médio para os parâmetros turbulentos.

A fonte encontra-se dentro de uma determinada subcamada considerada a região de emissão, como mostra a figura (4.2); o caso da fonte encontrar-se na interface foi suposto, considerando duas regiões de emissão, porém não houve melhorias nos resultados.

## 8.1 Resultados para o Experimento de Copenhagen

Primeiramente será analisado o experimento de Copenhagen. Nas tabelas (8.1) e (8.2) encontram-se as concentrações superficiais integradas lateralmente observadas (normalizadas pela taxa de emissão  $Q$ ) confrontadas com os resultados do modelo. Utiliza-se diferentes valores de *assimetria* ( $S_k$ ) para avaliar sua influência. Na tabela (8.3) estão os resultados dos índices estatísticos do modelo de dispersão para diferentes valores de  $S_k$ :

Tabela 8.1: Concentrações superficiais integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando no modelo a equação (5.13) ( $C_p$ ) em diferentes distâncias da fonte, com assimetrias negativas e sem assimetria. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão ( $\bar{c}/Q$ ) e  $Co$  representa as concentrações observadas.

Exp.	$z_i$ (m)	Distância (m)	$Co$ ( $10^{-4} sm^{-2}$ )	$C_p$ $S_k = -1$	$C_p$ $S_k = -0.5$	$C_p$ $S_k = 0$
1	1980	1900	6.48	5.64	5.79	6.00
		3700	2.31	3.46	3.42	3.31
2	1920	2100	5.38	3.59	3.76	3.95
		4200	2.95	3.47	3.67	3.88
3	1120	1900	8.20	6.79	7.18	7.62
		3700	6.22	4.55	4.66	4.79
		5400	4.30	3.56	3.58	3.57
4	390	4000	11.66	8.78	9.01	9.29
5	820	2100	6.72	4.33	4.61	4.92
		4200	5.84	5.09	5.42	5.79
		6100	4.97	4.67	4.91	5.16
6	1300	2000	3.96	1.77	1.84	1.91
		4200	2.22	2.08	2.22	2.37
		5900	1.83	1.89	1.98	2.11
7	1850	2000	6.70	3.65	3.92	4.21
		4100	3.25	2.43	2.53	2.63
		5300	2.23	1.99	2.04	2.09
8	810	1900	4.16	4.11	4.31	4.55
		3600	2.02	2.91	2.96	3.02
		5300	1.25	2.41	2.42	2.39
9	2090	2100	4.58	3.58	3.70	3.88
		4200	3.11	3.43	3.62	3.83
		6000	2.59	2.81	2.94	3.08

Tabela 8.2: Concentrações superficiais integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando no modelo a equação (5.13) ( $Cp$ ) em diferentes distâncias da fonte, com assimetrias positivas. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão ( $\bar{c}/Q$ ) e  $Co$  representa as concentrações observadas.

Exp.	$z_i$ (m)	Distância (m)	$Co$ ( $10^{-4} sm^{-2}$ )	$Cp$ $S_k = 0.5$	$Cp$ $S_k = 1$	$Cp$ $S_k = 1.5$
1	1980	1900	6.48	6.44	7.20	7.27
		3700	2.31	3.13	3.04	3.48
2	1920	2100	5.38	4.16	4.36	4.52
		4200	2.95	4.11	4.40	4.82
3	1120	1900	8.20	8.05	8.23	8.44
		3700	6.22	5.01	5.43	5.89
		5400	4.30	3.58	3.71	4.15
4	390	4000	11.66	9.64	9.91	9.69
5	820	2100	6.72	5.25	5.54	5.94
		4200	5.84	6.19	6.70	7.49
		6100	4.97	5.42	5.63	5.83
6	1300	2000	3.96	1.95	1.95	1.88
		4200	2.22	2.54	2.77	3.09
		5900	1.83	2.22	2.34	2.50
7	1850	2000	6.70	4.52	4.90	5.67
		4100	3.25	2.76	2.91	2.91
		5300	2.23	2.18	2.34	2.53
8	810	1900	4.16	4.82	4.91	4.69
		3600	2.02	3.13	3.40	3.80
		5300	1.25	2.35	2.37	2.57
9	2090	2100	4.58	4.09	4.27	4.42
		4200	3.11	4.05	4.33	4.75
		6000	2.59	3.22	3.34	3.43

Tabela 8.3: Índices estatísticos para os dados de Copenhagen

Modelo	$Nmse$	$Cor$	$Fa2$	$Fb$	$Fs$
$S_k = -1.0$	0.11	0.899	0.957	0.171	0.383
$S_k = -0.5$	0.09	0.904	0.957	0.131	0.345
$S_k = 0.0$	0.07	0.909	0.957	0.090	0.297
$S_k = 0.5$	0.06	0.911	0.957	0.043	0.237
$S_k = 1.0$	0.05	0.908	0.957	-0.007	0.189
$S_k = 1.5$	0.06	0.893	0.957	-0.062	0.187

Analisando-se as tabelas (8.1) e (8.2) verifica-se uma boa concordância dos resultados do modelo com os dados observacionais para as diferentes assimetrias. A análise dos índices estatísticos na tabela (8.3) mostra um *erro quadrático médio* baixo, *coeficiente de correlação* alto (em torno de 90%) e um *fator de dois* de 95%, indicando bons resultados.

Observa-se que os melhores resultados ocorrem com  $S_k = 1$ , isto se deve ao menor *erro quadrático médio* ( $Nmse$ ), menor *fração de inclinação* ( $Fb$ ), baixo *desvio fracional padrão* ( $Fs$ ), um bom *fator de dois* ( $Fa2$ ) e maior *coeficiente de correlação* ( $Cor$ ).

A seguir apresenta-se o gráfico de espalhamento na figura (8.1) (concentrações observadas em função das previstas pelo modelo), utilizando-se no modelo o coeficiente de difusão dado pela equação (5.13), válido para grandes tempos de difusão. Os resultados foram obtidos com  $S_k = -0.5$ ,  $S_k = 0$ ,  $S_k = 0.5$  e  $S_k = 1$ .

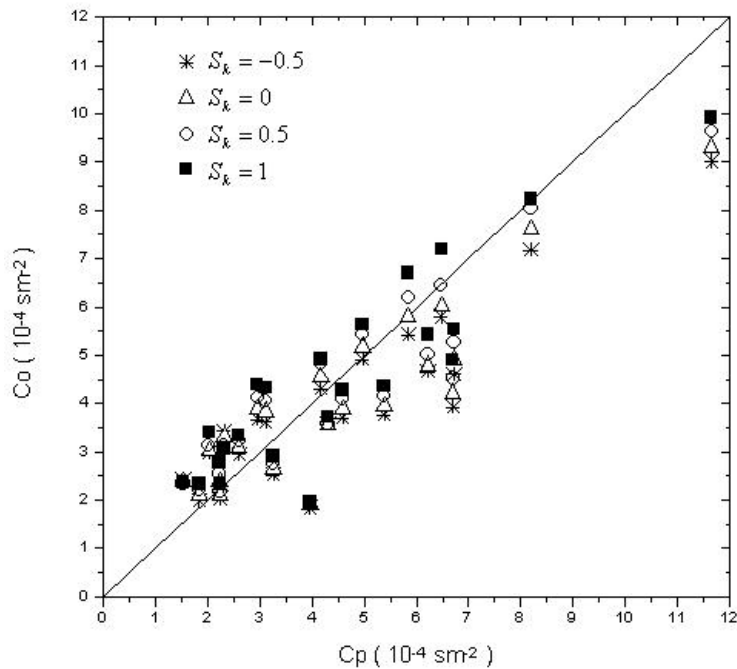


Figura 8.1: Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração ( $Co$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $Cp$ ).



Normalmente, na análise de gráficos de espalhamento, introduz-se uma reta formando um ângulo de  $45^\circ$  com a linha vertical e horizontal para a melhor visualização da concordância dos resultados. Quanto mais próximo estiverem os dados desta reta, melhores os resultados. Observa-se pelo gráfico de espalhamento da figura 8.1 uma boa concordância dos resultados do modelo quando utiliza-se como coeficiente de difusão a equação (5.13) e diferentes *assimetrias* ( $S_k$ ) para o experimento de Copenhagen.

É muito importante ter conhecimento da distância da fonte onde ocorre a concentração máxima de poluentes. Para isto, analisam-se a seguir os gráficos da concentração adimensional ( $\overline{C^y} = \frac{\bar{c} u z_i}{Q}$ ) em função da posição adimensional ( $X = \frac{x w_*}{u z_i}$ ), com diferentes *assimetrias* ao nível do solo ( $\frac{z}{z_i} = 0$ ) e para alturas próximas à camada de inversão ( $\frac{z}{z_i} = 0.9$ ) para o experimento de Copenhagen.

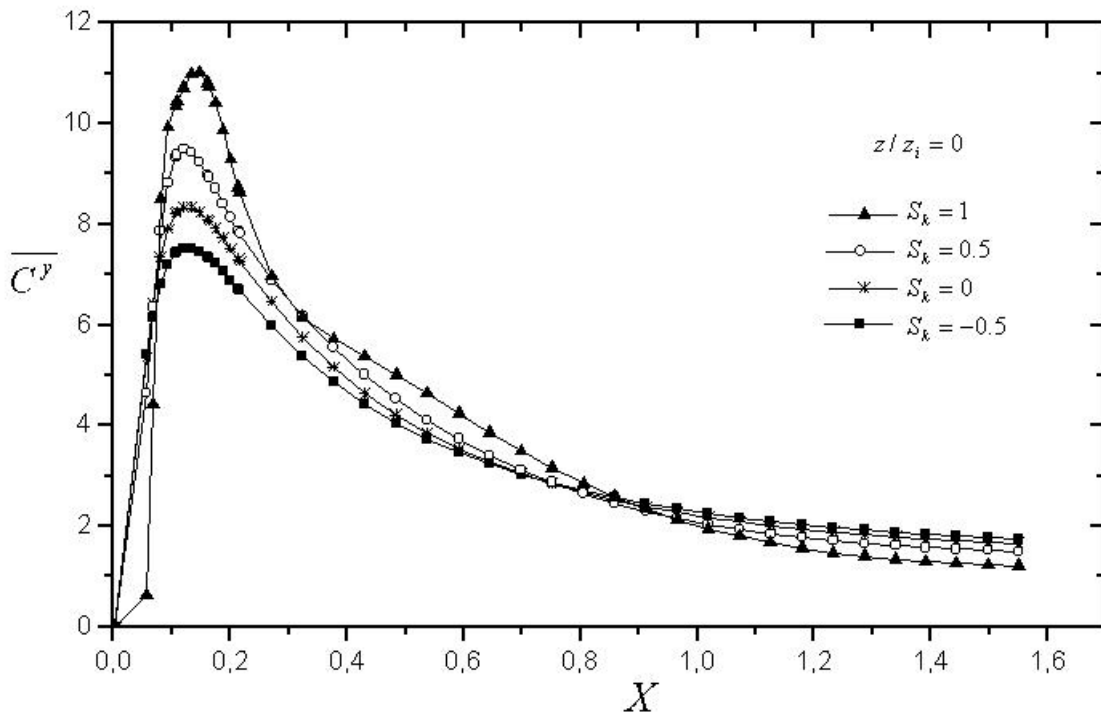


Figura 8.2: Gráfico da concentração superficial ( $\frac{z}{z_i} = 0$ ) adimensional  $\overline{C^y}$  ( $U z_i / Q$ ) em função da posição adimensional  $X$  ( $x w_* / U z_i$ ) com diferentes *assimetrias* para o experimento de Copenhagen.

Observa-se na figura (8.2) que até  $X = 0.07$  quanto maior a *assimetria* menor a concentração, depois deste valor, quanto maior a *assimetria* maior a concentração. Sendo que em  $X = 0.85$  a concentração volta a diminuir com o aumento da *assimetria*.

A concentração máxima alcançada se dá em:

$X = 0.134$	para	$S_k = -0.5$	e	$\overline{C^y} = 7.52$
$X = 0.120$	para	$S_k = 0.$	e	$\overline{C^y} = 8.32$
$X = 0.120$	para	$S_k = 0.5$	e	$\overline{C^y} = 9.49$
$X = 0.147$	para	$S_k = 1.$	e	$\overline{C^y} = 11.02$

A seguir tem-se o gráfico da concentração em função da distância da fonte para diferentes *assimetrias* em alturas mais elevadas ( $\frac{z}{z_i} = 0.9$ ).

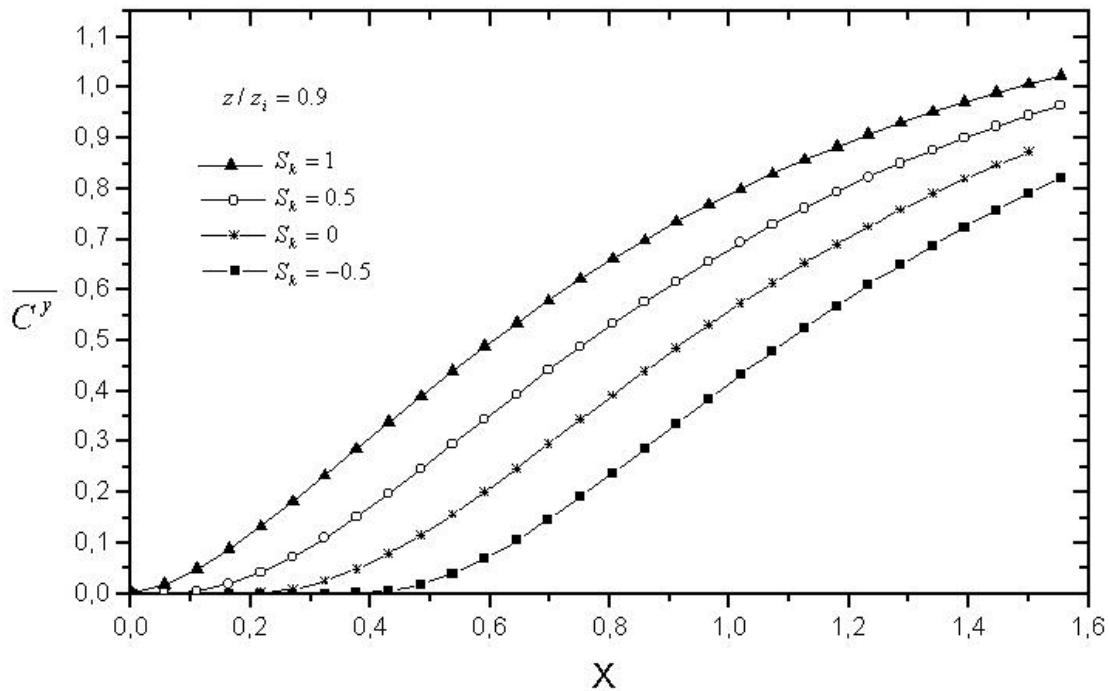


Figura 8.3: Gráfico da concentração adimensional  $C^y$  ( $Uz_i/Q$ ) em ( $\frac{z}{z_i} = 0.9$ ) em função da posição adimensional  $X$  ( $xw_*/Uz_i$ ) com diferentes *assimetrias* para o experimento de Copenhagen.

Observa-se na figura (8.3) que em todos os pontos, quanto maior a *assimetria* maior a concentração. Isto mostra que em alturas mais elevadas

$\left(\frac{z}{z_i} = 0.9\right)$  também há uma influência da *assimetria*. Não é possível determinar o valor da concentração máxima, pois o poluente continua ascendendo, entretanto é perceptível o processo de homogeneização da mesma.

Para analisar a influência do  $S_k$  na concentração superficial, tem-se o gráfico a seguir da concentração superficial máxima adimensional em função da *assimetria*.

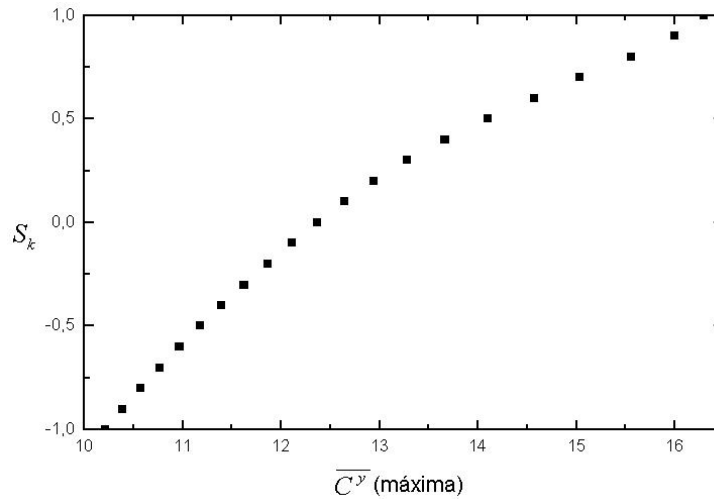


Figura 8.4: Gráfico da concentração superficial máxima adimensional em função da *assimetria*.

Nota-se na figura (8.4) que a concentração máxima próxima ao solo cresce monotonicamente com  $S_k$ . Conseqüentemente, percebe-se um erro de até 31.77% se o  $S_k$  é desconsiderado.

Observando as figuras (8.2) e (8.3) verifica-se o efeito do transporte não-local, pois a influência da *assimetria* na concentração de poluentes é significativa tanto ao nível do solo, como para regiões próximas da CLC.

Observa-se, que para concentração ao nível do solo, uma forte influência da *assimetria*, pois altera quantitativamente o pico da concentração máxima, porém não alterou a posição do máximo. Para grandes distâncias da fonte diminui a influência do termo de contra-gradiente.

Para a concentração em níveis mais elevados ( $\frac{z}{z_i} = 0.9$ ), ocorre também uma influência importante da *assimetria*. Para a *assimetria* positiva verifica-se, para pequenas distâncias, uma rápida homogeneização da concentração. Já para a *assimetria* negativa a concentração é transportada a uma certa distância e depois se inicia o processo de homogeneização da mesma.

## 8.2 Resultados para o Experimento de Prairie Grass

O Experimento de Prairie Grass é um experimento fortemente convectivo de fonte baixa.

Apresenta-se os resultados de concentrações integradas lateralmente coletadas na altura de  $1.5m$  usando-se no modelo a equação (5.13), válida para grandes tempos de difusão.

A tabela (8.4) a seguir apresenta as concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo sem considerar a *assimetria*.

Tabela 8.4: Índices estatísticos para os dados de Praire Grass sem *assimetria*

Modelo	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
sem $S_k$	0.46	0.806	0.36	-0.436	0.356

Analisando-se a tabela (8.4) verifica-se uma baixa concordância dos resultados do modelo com os dados observacionais para  $S_k = 0$ , apresentando um *fator de dois* de aproximadamente 36%, não indicando bons resultados.

A seguir apresenta-se o gráfico de espalhamento na figura (8.5) (concentrações observadas em função das preditas pelo modelo), utilizando-se no modelo

o coeficiente de difusão dado pela equação (5.13), válido para grandes tempos de difusão e desconsiderando  $S_k$ .

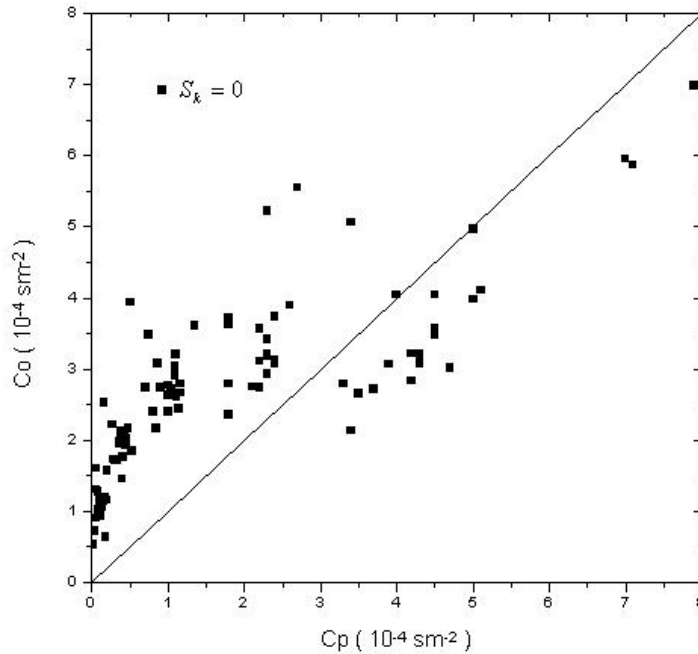


Figura 8.5: Gráfico de espalhamento sem *assimetria* para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração ( $Co$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $Cp$ ).

Observando-se o gráfico de espalhamento da figura (8.5) verifica-se uma tendência dos resultados de concentração do modelo não se aproximarem dos dados observacionais quando não se considera o  $S_k$ . Na realidade, quando  $S_k = 0$ , todo o termo de contra-gradiente se anula, desconsiderando, assim, o caráter não-local.

Como foi dito anteriormente, este experimento é fortemente convectivo e a concentração foi medida em pequenas distâncias da fonte. Sabe-se que neste caso a distância adimensional  $X$  tem uma influência muito importante [42], [41]. Desta forma, neste trabalho encontrou-se as seguintes expressões em função da turbulência e da distância da fonte, que melhor representam a *assimetria* para este experimento:

$$\begin{aligned} \overline{S}_k &= - \left( 1 + \frac{|L|}{z_i} \right)^{3/4} X^{1/3} && \text{para } x \geq 400 \text{ m} \\ \overline{S}_k &= - \left( 0.8 + \frac{|L|}{z_i} \right)^{3/4} X^{1/3} && \text{para } x < 400 \text{ m} \end{aligned} \quad (8.1)$$

A tabela (8.5) a seguir apresenta as concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo considerando as expressões (8.1) para a *assimetria*.

Tabela 8.5: Índices estatísticos para os dados de Praire Grass com *assimetria*

Modelo	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
com $S_k$	0.14	0.963	0.840	0.111	0.229

Pode-se perceber que a *assimetria* influenciou satisfatoriamente gerando bons resultados, isto se deve ao menor *erro quadrático médio* (*Nmse*), menor *fração de inclinação* (*Fb*), menor *desvio fracional padrão* (*Fs*), maior *fator de dois* (*Fa2*) e *coeficiente de correlação* de 96%.

Abaixo apresenta-se a figura (8.6) onde está representado o gráfico de espalhamento dos dados observacionais de concentrações integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo para o experimento de Praire Grass, levando-se em consideração o caráter não-local, utilizando a equação (8.1) para a *assimetria*.

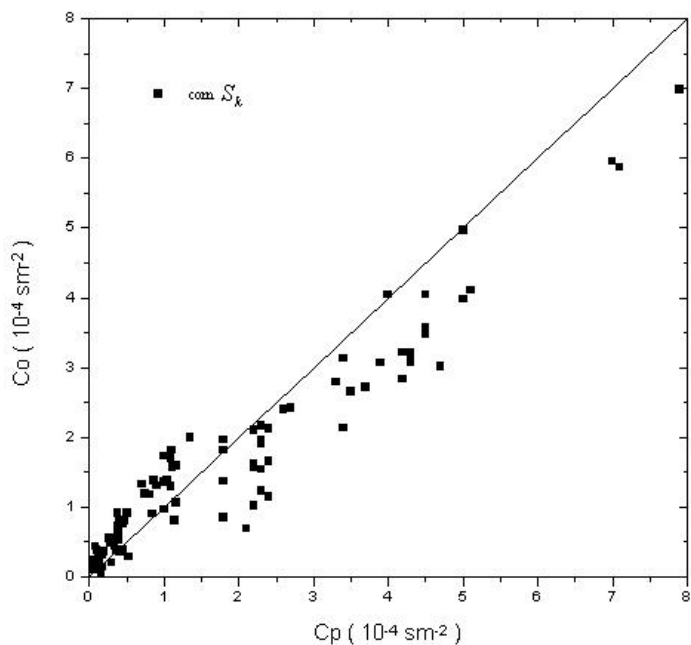


Figura 8.6: Gráfico de espalhamento com *assimetria* para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração ( $Co$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $Cp$ ).

Observando-se o gráfico de espalhamento da figura (8.6) nota-se uma boa concordância dos resultados do modelo quando utiliza-se as equações (8.1) para a *assimetria*.

Na figura (8.7) apresenta-se o gráfico da concentração adimensional em função da posição adimensional para o experimento de Prairie Grass. Utiliza-se o modelo com *assimetria* e depois sem *assimetria* em comparação com os dados observacionais.

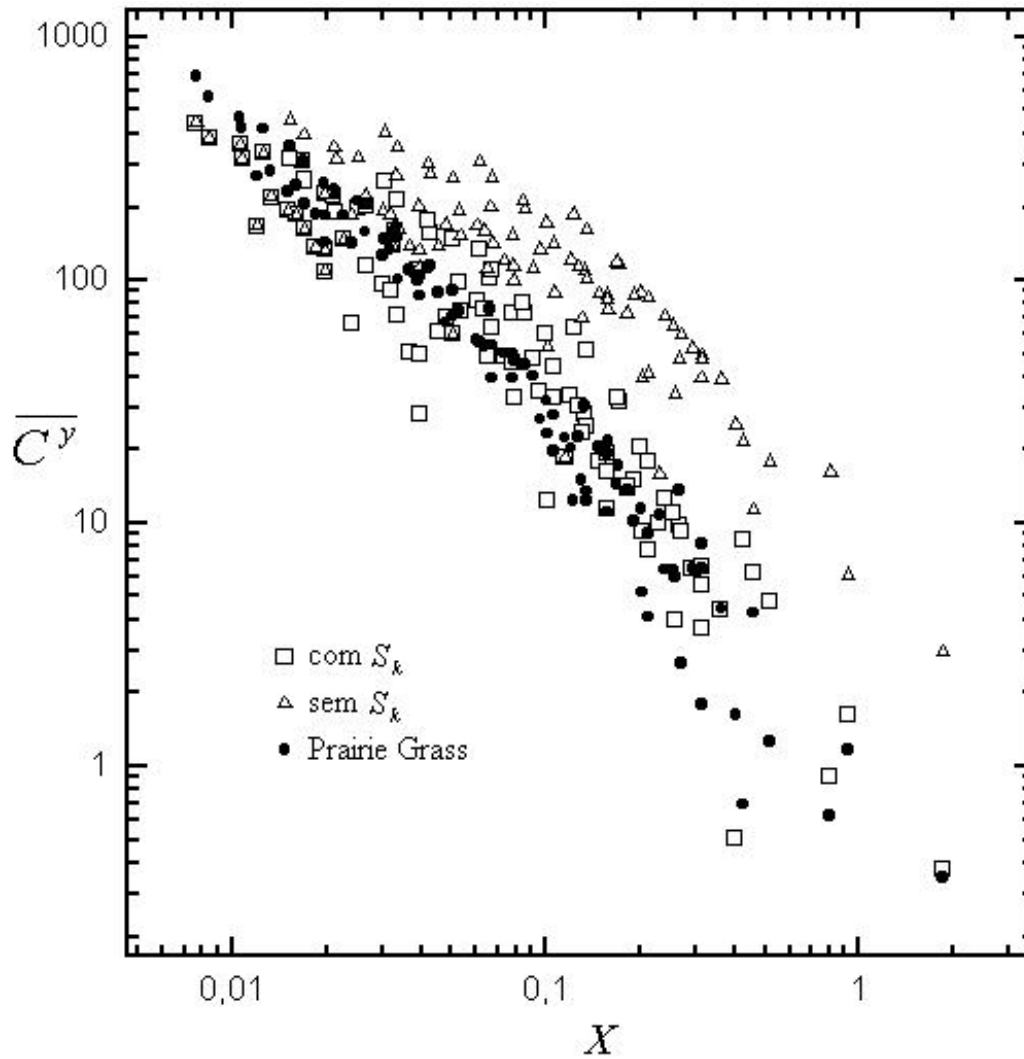


Figura 8.7: Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional  $C^y(Uz_i/Q)$  em função da posição adimensional  $X(xw_*/Uz_i)$  utilizando-se o modelo (4.60) e (4.61) com *assimetria* e sem *assimetria*.



A figura (8.7) mostra que utilizando a *assimetria*, a concentração integrada lateralmente ao nível do solo se aproxima da predita pelo modelo. Entretanto, desconsiderando a *assimetria*, os resultados pioram. Isto se deve ao fato que com a *assimetria*, a física dos *updrafts* e *downdrafts* é levada em consideração no fluxo turbulento de dispersão. Este resultado confirma que, para uma fonte baixa sob condições fortemente convectivas, o poluente rapidamente ascende sob a influência de um *updraft*.

## 9 CONCLUSÃO

Este trabalho descreve o desenvolvimento e a avaliação de um modelo semi-analítico que considera o caráter não-local no fechamento da turbulência na equação de difusão-advectação. O modelo estima a concentração de poluentes liberados por fontes contínuas, sendo a equação de difusão-advectação resolvida pelo método da Transformada de Laplace, considerando-se a CLC como um sistema multicamadas. A Transformada inversa é obtida numericamente através do esquema de Quadratura de Gauss. Em cada subcamada os parâmetros que envolvem a turbulência assumem um valor médio constante.

O fato de considerar-se o termo de contra-gradiente no fechamento da turbulência fez surgir um termo adicional na equação de difusão-advectação. Este termo leva consigo informações sobre o transporte assimétrico na CLC. Isto é um aspecto importante, pois agora o caráter não-local é modelado não somente no coeficiente de difusão, mas também com um termo pertencente à equação diferencial. Adicionalmente, deve-se salientar que este termo não gerou maior esforço computacional de modo que o método de resolução da equação de difusão-advectação que considera a discretização da CLC pôde ser mantido de modo generalizado sem maiores dificuldades.

Para a avaliação da performance do modelo foi realizada uma comparação entre os dados experimentais e os resultados do modelo. Observou-se que a assimetria influencia na concentração de poluentes de forma significativa para alturas próximas ao solo e ao topo da CLC para as condições convectivas dos experimentos de Copenhagen e Prairie Grass.

No experimento de Copenhagen verificou-se que assimetria foi mais influente na distância de máxima concentração, alterando o valor do máximo. Este resultado é muito expressivo, pois a determinação do máximo é um dos mais importantes aspectos a serem considerados no controle da qualidade do ar. Observou-se

também que para distâncias maiores a assimetria não foi muito importante. Isto se deve ao fato deste experimento ser de convecção fraca-moderada.

Para o experimento de Prairie Grass, cuja fonte é superficial, verificou-se que os resultados da concentração sem a consideração da assimetria foram bastante ruins. Desta forma, na tentativa de se obter melhores resultados foi gerada uma expressão em função da turbulência e da distância da fonte para a assimetria. Com esta expressão se obteve resultados muito bons estando de acordo com o esperado para fontes superficiais em condições de convecção forte, pois o poluente ascende rapidamente devido à influência de um “updraft”.

Uma análise geral dos resultados mostra que o modelo de dispersão de poluentes com as parametrizações utilizadas que encerram a física da turbulência não-homogênea e que leva em consideração o caráter não-local no fechamento da turbulência, produz uma boa concordância com as concentrações medidas para ambos experimentos. Portanto, obteve-se um modelo que leva mais informações sobre a física da CLC e que permite reproduzir o campo de concentração de poluentes liberados por fontes contínuas altas e baixas. Este é um resultado muito importante, pois normalmente um modelo que descreve adequadamente o transporte de poluentes para fontes altas não é válido para fontes baixas e vice-versa. Finalmente, é relevante mencionar que este é um método robusto do ponto de vista computacional e que pode ser aplicado como ferramenta auxiliar para o controle da qualidade do ar.

Como sugestões para futuros trabalhos pode-se citar:

- Testar outros métodos de inversão numérica.

Durante o andamento deste trabalho, foi realizado um estudo sobre um novo método de inversão [23], cujos cálculos detalhados desta parte são mostrados no apêndice A.

O algoritmo em FORTRAN 90 foi elaborado para casos simples de inversão e concluiu-se que o método alcança resultados satisfatórios. Muita análise em cima desta nova inversão foi realizada, e concluiu-se que este novo método de inversão não ganharia rapidez na solução, uma vez que ainda é necessário resolver o sistema  $\mathbf{M}\mathbf{x}=\mathbf{b}$  de dimensão  $d = 2N$ . Sendo que, neste novo método, o sistema precisaria ser resolvido a cada cálculo das integrais (A.12) antes de “chamar” a subrotina do método de *Romberg* o que tornaria o método mais lento. Portanto, não é prática a sua aplicação. Por esse motivo, e também por falta de tempo, o algoritmo não foi adaptado para a inversão da equação (4.53) do presente modelo.

- Utilização de computação simbólica, como por exemplo o Maple VII, para a inversão da matriz  $\mathbf{M}$ , dos coeficientes, obtendo assim, uma expressão analítica para os mesmos.
- Testar o método para a Camada Limite Estável.
- Estender o método a problemas de três dimensões.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BARAD, M. L. Project prairie grass, a field program in diffusion. *Geophys. Res. Pap., n. 59 1 and 2* (1958), Geophysics Research Directorate, Air Force Cambridge Research Center.
- [2] BARICHELLO, L. B. *Formulação analítica para a solução do problema de ordenada discreta unidimensional*. Tese (doutorado em engenharia mecânica), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1992.
- [3] BATCHELOR, G. K. Diffusion in a field of homogeneous turbulence, euleriana analysis. *Aust. J. Sci. Res. 2* (1949), 437–450.
- [4] BERKOWICZ, R. R., OLESEN, H. R., AND TORP, U. 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 Wispelare, F.A. Schiermeirier and N.V. Gillani*, Plenum Publishing Corporation (1986).
- [5] BERLYAND, M. *Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere*. translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA, 1975.
- [6] BRIGGS, G. A. Plume rise predictions. *Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses, D.A. Haugen ed., American Meteorological Society Boston, MA* (1975), 59–111.
- [7] BROWN, M. J., AND ARYA, S. P. S. Vertical dispersion from surface and elevated releases. *Proc. Sixth Joint Conference on Application of air pollution meteorology, Anaheim, CA (USA)* (1989), 163–166.
- [8] BURDEN, R. L., AND FAIRES, J. D. *Análise Numérica*. Thomson, São Paulo, 2003.

- [9] CARVALHO, D. L. Metodologia do ensino da matemática. *Coleção mestrado. 2º grau. Série formação do professor São Paulo: Cortez* (1990), 116p.
- [10] CARVALHO, J. *Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva*. Dissertação (mestrado em meteorologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.
- [11] CARVALHO, J. C., DEGRAZIA, G. A., AFONSSI, D., CAMPOS, C. R. J., ROBERTI, D. R., AND KERR, A. S. Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. *Meteorologische Zeitschrift* 11, 2 (2002), 89–97.
- [12] CHRYSIKOPOULOS, C. V., HILDEMANN, L. M., AND ROBERTS, P. V. A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source. *Atmos. Environ.* 26A (1992), 747–757.
- [13] COSTA, C. P., MOREIRA, D. M., VILHENA, M. T., AND CARVALHO, J. Solução da equação de difusão-advecção com o termo de contra-gradiente no fechamento da turbulência para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. *Ciência e Natura* (2003), 111–114.
- [14] DANVIES, B., AND MARTIN, B. Numerical inversion of the laplace transform: a survey and comparison of methods. *Journal of Computational Physics* 33 (1979), 1–32.
- [15] DEARDORFF, J. W. Convective velocity and temperature scales for the unstable planetary boundary layer and for raleigh convection. *J. Atmos. Society* 27 (1970), 1211–1213.
- [16] DEARDORFF, J. W. Theoretical expression for the counter-gradient vertical heat flux. *J. Geophys. Res.* 77 (1972), 5900–5904.

- [17] DEGRAZIA, G. A., MANGIA, C., AND RIZZA, U. A comparison between different methods to estimate the lateral dispersion parameter under convective conditions. *Journal of Applied Meteorology* 37 (1998), 227–231.
- [18] DEGRAZIA, G. A., MOREIRA, D. M., AND VILHENA, M. T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *American Meteorological Society* (2001), 1233–1240.
- [19] DEGRAZIA, G. A., VELHO, H. F. C., AND CARVALHO, J. C. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. *Contributions to Atmosph. Phys.* (1997), 57–64.
- [20] DEMUTH, C. A. Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. *Atmos. Environ.* 12 (1978), 1255–1258.
- [21] DRIEDONKS, A. G., AND TENNEKES, H. Entrainment effects in the well-mixed atmospheric boundary layer. *Boundary Layer Meteorology* 30 (1984), 75–105.
- [22] FISHER, B. E. A. The calculation of long term sulphur deposition in europe. *Atmos. Environ.* 12 (1978), 489–501.
- [23] GANAPOL, B. D., AND FURFARO, R. Reactor fuel element heat conduction via numerical laplace transform inversion. *Computational Heat and Mass Transfer-CHMT* (2001), 361–370.
- [24] GIFFORD, F. A. Atmospheric dispersion models for environmental pollution applications. *Lectures on air pollution and environmental impact analysis DA Haugen, Ed., Amer. Meteor. Soc., Boston* (1975), 35–58.
- [25] GRYNING, S. E. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmos. Environment* 21 (1987), 79–89.

- [26] GRYNING, S. E., AND LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations. *American Meteorological Society* 23 (1984), 651–660.
- [27] HANNA, S. R. Air quality model evaluation and uncertainty. *JAPCA* 38 (1988), 406–412.
- [28] HANNA, S. R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment* 23 (1989), 1385–1395.
- [29] HAY, J. S., AND PASQUILL, F. Diffusion from a continuous source in relation to the spectrum and scale of turbulence. *Advances in Geophysics* 6 (1959), 345–365.
- [30] HINRICHSSEN, K. Comparison of four analytical dispersion models for near surface releases above a grass surface. *Atmos. Environ.* 20 (1986), 29–40.
- [31] KAIMAL, J. C., AND WYNGAARD, J. C. Turbulence structure in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.* 33 (1976), 2152–2169.
- [32] KERRIGAN, J. F. *Migrating to Fortran 90*. O’Reilly and Associates, Inc., Sebastopol/CA, 1993.
- [33] KOCK, W. A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption. *Atmos. Environ.* 23 (1989), 1729–1732.
- [34] KREIDER, D., KULLER, R. C., PERKINS, F. W., AND OSTBERG, D. R. *Introdução à Análise Linear: Equações Diferenciais Lineares*, vol. 3. Ao livro técnico S/A, Rio de Janeiro, 1972.
- [35] LAMB, R. G. A numerical simulation of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ.* 12 (1978), 1297–1304.



- [36] LAMB, R. G. Diffusion in the convective boundary layer. *Atmospheric Turbulence and air Pollution Modelling*, F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, Eds., Reidel (1982), 159–229.
- [37] LIN, J. S., AND HILDEMAN, L. M. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. *Atmos. Environ.* 31 (1997), 59–71.
- [38] MONIN, A. S., AND OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. *Tr. Akad. Nauk, SSSR, Geofiz. Inst.* 24 (1954), 1963–1987.
- [39] MONIN, A. S., AND YAGLOM, A. M. *Statistical fluid mechanics*. MIT Press, Cambridge, 1971.
- [40] MOREIRA, D. M. *Modelo Euleriano semi-analítico de dispersão turbulenta de contaminantes*. Tese (doutorado em engenharia mecânica), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1999.
- [41] MOREIRA, D. M., DEGRAZIA, G. A., CARVALHO, J. C., AND VILHENA, M. T. Dispersion parametrization applied to strong convection: low source case. *Hybrid Methods in Engineering. EUA: in press* (2002).
- [42] MOREIRA, D. M., DEGRAZIA, G. A., AND VILHENA, M. T. Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model. *II Novo Cimento* 22C, 5 (1999), 685–691.
- [43] MOURA, A. B. D. *Solução analítica para dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável*. Dissertação (mestrado em engenharia mecânica), Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1995.

- [44] NICKOLA, P. W. *The Hanford 67 series: a volume of atmospheric field diffusion measurements*. Pnl-2433 Battelle, Pacific Northwest Laboratories, Richland, WA (USA), 1977.
- [45] NIEUWSTADT, F. T. M. An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ.* *14* (1980), 1361–1364.
- [46] NIEUWSTADT, F. T. M. The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer. *J. Atmos. Society* *41* (1984), 2202–2216.
- [47] NIEUWSTADT, F. T. M., AND HAAN, B. J. An analytical solution of one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation. *Atmos. Environ.* *15* (1981), 845–851.
- [48] NIEUWSTADT, F. T. M., AND VAN ULDEN, A. P. A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. *Atmos. Environ.* *12* (1978), 2119–2124.
- [49] O'NEIL, P. V. *Advanced Engineering Mathematics*. ITP - Brooks/Cole, Boston, MA, 1995.
- [50] PANOFSKY, H. A., AND DUTTON, J. A. *Atmospheric Turbulence*, 397 ed. Wiley-Interscience, J. Wiley and Sons, 1984.
- [51] PASQUILL, F. The estimation of the dispersion of windborne material. *Meteor. Mag.* *90* (1961), 33–37.
- [52] PASQUILL, F. *Atmospheric Diffusion*, 2nd ed. John Wiley and Sons, New York, 1974.
- [53] PASQUILL, F., AND SMITH, F. B. *Atmospheric diffusion*. Ellis Howood Ltd., Chichester, 1983.

- [54] PAULSEN, C. A. The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer. *J. Appl. Met.* 9 (1975), 857–861.
- [55] PIRES, C. S. *Um estudo analítico da dispersão de contaminantes abandonados por fontes áreas em uma camada limite convectiva*. Dissertação (mestrado em sensoriamento remoto), Centro Estadual de Pesquisas em Sensoriamento Remoto e Meteorologia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1996.
- [56] ROBERTS, O. F. T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. *Proc. Roy. Soc.* 104 (1923), 640–648.
- [57] ROUNDS, W. Solutions of the two-dimensional diffusion equation. *Trans. Am. Geophys. Union* 36 (1955), 395–405.
- [58] SCRIVEN, R. A., AND FISHER, B. A. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout-ii. the effect of turbulent diffusion. *Atmos. Environ.* 9 (1975), 59–65.
- [59] SMITH, F. The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere. *J. Fluid Mech.* 2 (1957), 49–76.
- [60] SORBJAN, Z. *Structure of the atmospheric boundary layer*. Prentice Hall, New Jersey, pp. 317, 1989.
- [61] SPIEGEL, M. R. *Transformadas de Laplace*, pp. 267 ed. McGraw-Hill do Brasil Ltda, São Paulo, 1971.
- [62] SPIEGEL, M. R. *Estatística*. McGraw-Hill do Brasil, São Paulo, 1974.
- [63] STROUD, A. H., AND SECREST, D. *Gaussian Quadrature Formulas*. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1966.
- [64] STULL, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (Olanda), 1988.

- [65] TAYLOR, G. I. Diffusion by continuous movements. *Proceedings London Mathematical Society* 20, Series 2 (1921), 196–211.
- [66] TIRABASSI, T., AND RIZZA, U. An analytical model for a screen evaluation of the environmental impact from a single point source. *Il Nuovo Cimento* 15c (1992), 181–190.
- [67] TIRABASSI, T., AND RIZZA, U. *An air pollution model for complex terrain*. In Air Pollution (ed. Zannetti P., Brebbia, C.A., Garcia, J.E. and Ayala Milian, G., pp. 149–156, Proceeding of air Pollution conference, Monterrey, Mexico. Computational Mechanics Pub. (Southampton) and Elsevier (Amsterdam), 1993.
- [68] TIRABASSI, T., TAGLIAZUCCA, M., AND PAGGI, P. A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer. *Atmos. Environ* 23 (1989), 857–862.
- [69] TIRABASSI, T., TAGLIAZUCCA, M., AND ZANNETTI, P. Kappa-g, a nongaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements. *JAPCA* 36 (1986), 592–596.
- [70] VAN DOP, H., AND VERVER, G. Countergradient transport revisited. *Journal of the Atmospheric Sciences* 58 (2001), 2240–2247.
- [71] VAN ULDEN, A. P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. *Atmos. Environ.* 12 (1978), 2125–2129.
- [72] VAN ULDEN, A. P. A surface layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground. *Atmos. Environ.* 26A (1992), 681–692.
- [73] VILHENA, M. T., AND BARICHELLO, L. B. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kernntechnik* 56, 5 (1991), 334–336.

- [74] VILHENA, M. T., AND STRECK, E. E. An approximate analytical solution of the one-group neutron transport equation. *Kerntchnik* 57, 3 (1992), 196–198.
- [75] WEIL, J. C., AND BROWER, R. P. An update gaussian plume model for tall stacks. *JAPCA* 34, 1984, 818–827.
- [76] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. A laboratory model of the unstable planetary boundary layer. *J. Atmos. Society* 31 (1974), 1297–1307.
- [77] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer. *Quart. J. R. Met. Society* 102 (1976), 427–445.
- [78] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. A laboratory study of dispersion from elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ.* 12 (1978), 1305–1311.
- [79] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer. *Atmos. Environ.* 15 (1981), 109–117.
- [80] YEH, G., AND HUANG, C. Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere. *Boun. Layer Meteor.* 9 (1975), 381–390.

## APÊNDICE A    NOVO MÉTODO DE INVERSÃO

Durante o andamento deste trabalho, foi realizado um estudo sobre um novo método de inversão [23] onde:

$$F(s) = \mathcal{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt$$

Seja  $s = \gamma + i\theta$ , então:

$$\begin{aligned} F(\gamma + i\theta) &= \int_0^{\infty} f(t) e^{-(\gamma + i\theta)t} dt \\ &= \int_0^{\infty} f(t) e^{-\gamma t} e^{-i\theta t} dt \\ &= \int_0^{\infty} e^{-\gamma t} f(t) \cos(\theta t) dt + i \int_0^{\infty} e^{-\gamma t} f(t) \operatorname{sen}(\theta t) dt \end{aligned}$$

onde a integral da esquerda representa  $\operatorname{Re} F(\gamma + i\theta)$ , enquanto que, a integral da direita representa  $\operatorname{Im} F(\gamma + i\theta)$

Assim:

$$\operatorname{Re} F(\gamma + i\theta) = \frac{2}{2} \int_0^{\infty} e^{-\gamma t} f(t) \cos(\theta t) dt = 2 \int_0^{\infty} \underbrace{\frac{e^{-\gamma t} f(t)}{2}}_{f^*(t)} \cos(\theta t) dt$$

Defina:  $f^*(t) = \frac{e^{-\gamma t} f(t)}{2}$  para  $t > 0$ .

Pela inversa de Fourier [49]:

$$f^*(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} F(\gamma + i\theta) \cos(\theta t) d\theta \quad (\text{A.6})$$

Mas  $f^*(t) = \frac{e^{-\gamma t} f(t)}{2}$ , então:

$$\frac{e^{-\gamma t} f(t)}{2} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} F(\gamma + i\theta) \cos(\theta t) d\theta \quad (\text{A.7})$$

Portanto:

$$f(t) = \frac{2e^{\gamma t}}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} F(\gamma + i\theta) \cos(\theta t) d\theta \quad (\text{A.8})$$

Fazendo uma mudança de variável:

$$\theta = \frac{\omega}{t} \Rightarrow d\theta = \frac{1}{t} d\omega$$

Logo:

$$\begin{aligned} f(t) &= \frac{2e^{\gamma t}}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} F\left(\gamma + i\frac{\omega}{t}\right) \cos(\omega) \frac{1}{t} d\omega \\ &= \frac{2e^{\gamma t}}{\pi t} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} F\left(\gamma + i\frac{\omega}{t}\right) \cos(\omega) d\omega \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Assim, uma aproximação da decomposição da integral do cosseno em integrais sobre o cosseno periódico pode ser dada por [14], fazendo:

$$\omega = w + k\pi$$

$$f(t) = \frac{2e^{\gamma t}}{\pi t} \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\pi} \operatorname{Re} F\left(\gamma + i\frac{w + k\pi}{t}\right) \cos(w + k\pi) dw \quad (\text{A.10})$$

Note que:

$$\begin{aligned} \cos(w + k\pi) &= \cos(w) + \cos(k\pi) - \underbrace{\sin(w)\sin(k\pi)}_0 \\ &= \cos(w) \cdot (-1)^k \end{aligned}$$

Portanto:

$$f(t) = \frac{2e^{\gamma t}}{\pi t} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_0^{\pi} \operatorname{Re} F\left(\gamma + i\frac{w + k\pi}{t}\right) \cos(w) dw \quad (\text{A.11})$$

Defina:

$$g(w) = \operatorname{Re} F\left(\gamma + i\frac{w + k\pi}{t}\right) \cos(w)$$

Assim, tem-se:

$$\int_0^{\pi} \operatorname{Re} F\left(\gamma + i\frac{w + k\pi}{t}\right) \cos(w) dw = \int_0^{\pi} g(w) dw \quad (\text{A.12})$$

Agora, cada integral é calculada usando o *Método de Integração de Romberg* [8], ou seja, para resolver (A.12), utiliza-se o método de *Romberg*, que consiste em:

$$\int_0^{\pi} g(w) dw = T_n^m \quad (\text{A.13})$$

na qual:

$$T_l^{m+1} = T_l^m + \frac{T_l^m - T_{l-1}^m}{4^{m+1} - 1} \quad (\text{A.14})$$

para  $j = 1, 2, 3, \dots, n$  e  $m = 0, 1, 2, \dots, n$ , sendo  $n$  suficientemente grande.

Inicializado pelo *Método Trapezoidal*:



$$T_l^0 = \frac{1}{2}T_{l-1}^0 + \frac{\pi}{2^l} \sum_{\substack{j=1 \\ \text{ímpar}}}^{2^l-1} g\left(\frac{j\pi}{2^l}\right) \quad (\text{A.15})$$

sendo:

$$T_0^0 = \frac{\pi}{2} [g(0) + g(\pi)] \quad (\text{A.16})$$