

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

**Solução da equação de
difusão-advecção para uma
CLP não-homogênea e
não-estacionária pelo método
GILTT**

por

Kelen Berra de Mello

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, Fevereiro de 2005.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Mello, Kelen Berra de

Solução da equação de difusão-advecção para uma CLP não-homogênea e não-estacionária pelo método GILTT / Kelen Berra de Mello.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2005.

64 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2005.

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

**Solução da equação de difusão-advecção
para uma CLP não-homogênea e
não-estacionária pelo método GILTT**

por

Kelen Berra de Mello

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. Sérgio de Queiroz Bogado Leite
CNEN/RJ

Prof. Dr. Ricardo Carvalho Barros
Inst. Politécnico/UERJ

Profa. Dra. Cynthia Feijó Segatto
PPGMAp/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
03 de Fevereiro de 2006.

Profa. Dr. Maria Cristina Varriale
Coordenador

Para meus pais, meu irmão e meu noivo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Dr. Marco Tullio de Barreto Menna de Vilhena, pela orientação, pela confiança no meu trabalho, e principalmente pelos conselhos e pela amizade.

Agradeço em especial aos meus pais e irmão pelo apoio, incentivo e compreensão demonstrado durante todo o curso. Agradeço aos meus tios, Gertrudes Berra e Helio Culau, que me acolheram com uma filha em Porto Alegre.

Agradeço ao meu noivo por estar sempre presente, apesar da distância, nos momentos mais difíceis. Agradeço pela compreensão, pela dedicação, pela paciência e principalmente pelas palavras de incentivo.

Agradeço ao Prof. Dr. Davidson Martins Moreira pela co-orientação, apoio e pela dedicação ao meu trabalho.

Agradeço ao Prof. Dr. Sérgio Wortmann pela amizade e pela oportunidade de aprender o método da GITT.

Agradeço ao Prof. Dr. Jonas Carvalho pelo apoio dado a este trabalho.

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

Agradeço ao PPGMAp pela oportunidade.

Agradeço à CNPq pelo suporte financeiro.

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	3
3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA	7
3.1 Camada Limite Convectiva:	8
3.1.1 Camada Superficial (CS):	9
3.1.2 Camada de Convecção Livre (CCL):	10
3.1.3 Camada de Mistura (CM):	10
3.1.4 Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE):	11
3.2 Camada Residual (CR):	12
3.3 Camada Limite Estável (CLE):	13
3.4 A Estrutura da Turbulência na Camada Limite Convectiva . .	14
4 DESCRIÇÃO DO MÉTODO	16
4.1 GITT:	16
4.2 Solução do sistema de equações diferenciais ordinárias trans-	
formado:	18
4.3 Inversão Numérica da Transformada de Laplace pelo método	
de Quadratura de Gauss:	22
5 O MODELO DE POLUIÇÃO DO AR	24

6	PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA E PERFIL TURBULENTO	30
6.1	Coeficientes de difusão:	30
6.1.1	Coeficiente para grandes tempos de difusão :	30
6.1.2	Coeficiente de difusão em função da posição e da altura (formulação integral) :	32
6.1.3	Coeficiente de difusão em função da posição e da altura (formulação algébrica) :	33
6.1.4	Comparação entre os coeficientes de difusão:	34
6.2	Perfil do Vento :	35
7	VALIDAÇÃO DO MODELO	37
7.1	Experimento de Copenhagen :	37
7.2	Índices Estatísticos	39
7.3	Pontos de Quadratura	40
7.4	Estabilidade Numérica	42
8	RESULTADOS NUMÉRICOS	44
8.1	Análise da influência da velocidade vertical no comportamento da pluma	49
8.2	Velocidade Vertical e Horizontal geradas pelo LES	51
9	CONCLUSÃO	55
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	57

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Estrutura da Troposfera (Stull, [57])	8
Figura 3.2	Diferença entre o comportamento de uma pluma dispersada na CLE e outra na Camada Residual. Fonte: Stull; 1988, p14. figura adaptada. [57]	12
Figura 5.1	Esquema que representa o problema a ser estudado.	24
Figura 6.1	Comparação dos coeficientes de difusão propostos na secção (6.1.1) e (6.1.3) utilizando as distâncias $x = 1000m$, $x = 3000m$, $x = 5000m$	35
Figura 7.1	Concentração integrada lateralmente em função da distância para $t = 1000s$ e para diferentes pontos de quadratura Gaussiana. . .	41
Figura 7.2	Concentração integrada lateralmente em função da distância para $t = 5000s$ e para diferentes pontos de quadratura Gaussiana. . .	42
Figura 7.3	Estabilidade Numérica. Gráfico da Concentração Integrada Lateralmente pelo número de autovalores, para o Experimento 1 de Copenhagen para $x = 1900 m$	43
Figura 7.4	Estabilidade Numérica. Gráfico da Concentração Integrada Lateralmente pelo número de autovalores, para o Experimento 1 de Copenhagen para $x = 3700 m$	43
Figura 8.1	Gráfico de espalhamento de C_o em comparação com C_p , para o U como sendo uma lei de potência [39].	46
Figura 8.2	Concentração experimental versus concentração obtida através do modelo proposto utilizando o vento descrito pela equação (6.28).	48
Figura 8.3	Concentração de poluentes em termos das variáveis adimensionais X e Z . Utilizando $W = 0 m/s$	49
Figura 8.4	Concentração de poluentes em termos das variáveis adimensionais X e Z . Utilizando $W = 0.5 m/s$	50
Figura 8.5	Concentração de poluentes em termos das variáveis adimensionais X e Z . Utilizando $W = -0.5 m/s$	51
Figura 8.6	Distribuição da concentração de poluentes integrada usando os perfis de vento gerados pelo LES	53
Figura 8.7	Distribuição da concentração de poluentes obtida por Willis e Deardorff (1978) ([64])	54

Figura 8.8 Distribuição da concentração de poluentes obtida por Lamb (1978) 54
([27])

LISTA DE TABELAS

Tabela 7.1	Parâmetros micrometeorológicos no experimento de Copenhagen	38
Tabela 7.2	Velocidade de fricção u_* em (m/s) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 minutos.	38
Tabela 7.3	Comprimento de Monin-Obukhov L em (m) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 minutos.	38
Tabela 8.1	Concentrações integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando os coeficientes de difusão (6.14) e (6.27) e o vento descrito pela equação (6.31). As concentrações de poluentes são normalizadas dividindo pela intensidade Q	45
Tabela 8.2	Concentrações integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando os coeficientes de difusão (6.14) e (6.27) e o vento descrito pela equação (6.28). As concentrações de poluentes são normalizadas dividindo pela intensidade Q	47
Tabela 8.3	Dados Estatísticos.	48
Tabela 8.4	Parâmetros externos gerados pelo LES	52
Tabela 8.5	Parâmetros micrometeorológicos a partir da simulação do LES .	52

LISTA DE SÍMBOLOS

A^*	operador diferencial parcial genérico
A_k	peso da quadratura de Gauss
B^*	operador diferencial genérico
c	concentração de poluentes
C	concentração de poluentes integrada lateralmente
\bar{C}	concentração de poluentes integrada lateralmente transformada
CCL	camada de convecção livre
CLC	camada limite convectiva
CLE	camada limite estável
CLP	camada limite planetária
CM	camada de mistura
C_o	concentrações observadas
Cor	coeficiente de correlação
C_p	concentrações preditas pelo modelo
CR	camada residual
CS	camada superficial
d_i	autovalores da matriz H
D_{av}	matriz diagonal de autovalores da matriz H
F	matriz de coeficientes do problema transformado
F^*	fonte
$F_i^E(n)$	valor do espectro de energia Euleriano da velocidade do vento turbulento
$(f_m^*)_i$	freqüência adimensional do pico espectral vertical
$Fa2$	fator de dois
Fb	fração de inclinação
Fs	desvio fracional padrão
g	aceleração da gravidade
G	matriz de coeficientes do problema transformado
H	matriz de coeficientes do problema transformado
H_s	altura da fonte
I	matriz Identidade
k	constante de Von Kármán
K_x	coeficiente de difusão turbulenta
K_x	coeficiente de difusão turbulenta na direção x
K_y	coeficiente de difusão turbulenta na direção y
K_z	coeficiente de difusão turbulenta na direção z
L	comprimento de Monin-Obukhov
L^*	operador diferencial associado ao problema de Sturm-Liouville
\mathcal{L}	operador da transformada de Laplace
M	número de pontos da quadratura de Gauss

∇	operador gradiente
∇^2	Laplaciano
N_i	quadrado da norma de L^*
$Nmse$	erro quadrático médio normalizado
Q	intensidade da fonte
s	variável independente transformada
$S_i^E(n)$	espectro da velocidade Euleriana $i = u, v, w$
t	tempo
u_*	velocidade de fricção na superfície
U	velocidade média do vento longitudinal
V	velocidade média do vento transversal
v_k	raiz da quadratura de Gauss
X_{ave}	matriz de autovetores da matriz H
X	distância adimensional
W	velocidade média do vento vertical
z_i	altura da camada limite convectiva
z_o	comprimento da rugosidade
$Z(y)$	vetor qualquer
$\bar{Z}(y)$	vetor qualquer transformado
Z	distância adimensional
ZE	zona de entranhamento

GREGOS

Ψ_i	autovetores do operador L^*
λ_i	autovalores do operador L^*
$(\lambda_m^*)_i$	comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical
Θ	temperatura potencial média
β_i	razão das escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana
δ	função generalizada Delta de Dirac
ψ	taxa de dissipação
σ_α^2	parâmetro de dispersão generalizada desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento
σ_i	desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento
σ_i^2	variância generalizada
θ	temperatura potencial média

RESUMO

Neste trabalho é apresentada a solução da equação de difusão-advecção transiente para simular a dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária. A solução é obtida através do método analítico GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) e da técnica de inversão numérica da quadratura de Gauss. A validação da solução é comprovada utilizando as concentrações obtidas a partir do modelo com as obtidas experimentalmente pelo Experimento de Copenhagen. Nesta comparação foram utilizados os perfis de vento potencial e logaritmo e os parâmetros de turbulência propostos por Degrazia et al (1997) [19] e (2002) [17]. Os melhores resultados foram obtidos utilizando o perfil de vento potencial e o coeficiente de difusão propostos por Degrazia et al (1997).

A influência da velocidade vertical é mostrada através do comportamento das concentrações de poluentes na pluma. Além disso, as velocidades verticais e longitudinais geradas pelo Large Eddy Simulation (LES) foram colocadas no modelo para poder simular uma camada limite turbulenta mais realística, a qual apresentou resultados satisfatórios quando comparados com os disponíveis na literatura.

ABSTRACT

In this work we show the solution of the advection-diffusion equation to simulate a pollutant dispersion in the Planetary Boundary Layer. The solution is obtained by the GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) analytic method and by Gauss Quadrature numerical inversion. The validity of the solution is proved using concentration obtained from the model with concentration obtained for Copenhagen experiment. In this comparison was utilized potential and logarithmic wind profile and eddy diffusivity derived by Degrazia et al (1997) [19] and (2002) [17]. The best results were generated by using the potential wind profile and the eddy diffusivity derived by Degrazia et al (1997).

The vertical velocity influence is shown in the plume behavior of the pollutant concentration. Moreover, the vertical and longitudinal velocity provided by Large Eddy Simulation (LES) was added to the model to simulate the turbulent boundary layer more realistically. The result was accurate when compared with the one published in the literature.

1 INTRODUÇÃO

A degradação ambiental em nível mundial é o grave problema que preocupa as sociedades modernas pelas conseqüências catastróficas que o aquecimento global está trazendo para a vida na Terra. A origem desse fenômeno está ligada à Revolução Industrial, que ocorreu por volta de 1770. Desde esta época, a industrialização emprega uma tecnologia dita "suja", pois a maior parte de suas fábricas é movida por petróleo, gás e carvão. Esta prática em conjunto com o desmatamento de florestas produz gás carbônico (CO_2) em grande quantidade, provocando assim, o aquecimento global.

Visando ao desenvolvimento de fontes de energia não-poluentes, em dezembro de 1997, foi firmado o Protocolo de Kyoto, o qual estabelece metas de redução de gases poluentes para países industrializados. Para este começar a ser implementado era necessário a adesão de 55 países. O Protocolo de Kyoto levou oito anos para entrar em vigor, isto só aconteceu em 16 de fevereiro de 2005. A meta do Protocolo de Kyoto é reduzir em 5,2% os níveis de gás carbônico, de 2008 até 2012 em relação aos níveis de 1990. Atualmente, 150 países já aderiram ao protocolo, mesmo assim falta a adesão do país de maior responsabilidade pela emissão de gases: os EUA (responsável por 25% do total mundial de emissão dos gases). Mas tanto economistas quanto ambientalistas não veem este como a solução para os problemas ambientais, pois para evitar piores conseqüências das mudanças climáticas seria preciso uma redução de 60% das emissões. Deste modo, fica ressaltado o interesse do estudo da dispersão de poluentes na atmosfera com o objetivo da redução ou eliminação dos seus efeitos no ambiente.

Para se determinar a concentração de poluentes na atmosfera existem dois modelos matemáticos para simular numericamente estes fenômenos: Euleriano e Lagrangeano. A principal diferença entre os dois modelos é que o sistema de referência Euleriano é fixo em relação à Terra, enquanto o Lagrangeano segue a velocidade instantânea do fluido [1]. Neste trabalho, utiliza-se o modelo Euleriano,

resolvendo a equação de difusão-advecção transiente. Para a solução da mesma, primeiramente aplica-se a técnica de Transformada de Laplace no tempo resultando assim num problema estacionário, o qual é resolvido pelo método analítico GITT (Generalized Integral Transform Technique) e o problema transformado resultante, através da Transformada de Laplace [65]. A reconstrução da solução transiente é determinada pela técnica de inversão numérica de quadratura de Gauss.

Para que se possa validar a solução da equação de difusão-advecção é feita a comparação com os dados experimentais do Experimento de Copenhagen, utilizando parâmetros turbulentos e perfis de vento encontrados na literatura. Além disso, no comportamento da pluma, é analisada a influência do vento vertical constante, e para dados mais realísticos, utilizando velocidades verticais $W(x, z)$ e horizontais $U(x, z)$ gerados pelo Large Eddy Simulation (LES) com grade de 64 x 64. Devido os dados gerados pelo LES serem dados discretos utiliza-se uma interpolação polinomial do campo de vento ($U(x, z)$ e $W(x, z)$) na variável z e a média do valor de x . Este experimento de dispersão é simulado no regime da camada turbulenta convectiva.

A presente dissertação encontra-se estruturada em 9 capítulos. No Capítulo 2 encontra-se uma revisão bibliográfica motivando a realização deste trabalho. No Capítulo 3 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 4 apresenta-se o método utilizado para a solução da equação difusão-advecção transiente. No Capítulo 5 apresenta-se o modelo de poluição do ar. No Capítulo 6 é descrita a parametrização da turbulência e o perfil do vento utilizado. No Capítulo 7 apresenta-se a validação do modelo, com a descrição do experimento de dispersão de Copenhagen. No Capítulo 8 apresenta-se a influência da velocidade vertical no comportamento da pluma, assim como o uso das velocidades verticais e horizontais providas do LES e, finalmente, no Capítulo 9 e, apresenta-se as conclusões.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na metade do século XIX, Fick resolveu pela primeira vez a equação de difusão-advecção utilizando o método Gaussiano onde os coeficientes de difusão e de advecção eram constantes com a altura. Ele considerou como condições de contorno o fluxo nulo de poluentes no limite inferior e superior da camada limite planetária.

Mais tarde, para fontes próximas do solo, Roberts (1923) [46] resolveu a equação bidimensional, onde a velocidade média do vento U e o coeficiente de difusão vertical K_z seguem uma lei de potência em função da altura z :

$$U = U_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \quad e \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \quad (2.1)$$

sendo z_1 o ponto onde U_1 e K_1 são avaliados, m e n variam entre 0 e 1.

Em 1955, Rounds [47] apresentou uma solução para fontes elevadas resolvendo a mesma equação e o mesmo perfil de vento utilizado por Roberts, mas com perfis lineares para K_z .

Smith, em 1957, [52] também resolveu a equação bidimensional utilizando U e K_z funções de potência da altura, mas os expoentes destas funções seguiram a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$). Em seguida, Smith obteve uma solução para K_z da seguinte forma:

$$K_z = K_0 z^{\alpha l} (z_i - z)^{\beta}, \quad (2.2)$$

onde K_0 é uma constante, α e β variam entre 0 e 1 de acordo com a altura da camada limite z_i , mas para U constante.

Em 1975, Scriven e Fisher [50] sugerem a solução com U constante e K_z , como segue:

$$K_z = z, \quad \text{para } 0 \leq z < z_t, \quad (2.3)$$

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

onde z_t é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada limite superficial). Também neste ano, Yeh e Huang [68] e Berlyand [3], obtiveram a solução bidimensional para fontes elevadas com U e K_z seguindo os perfis de potência, porém para uma atmosfera sem contorno, ou seja, $K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z \rightarrow \infty$. Um ano depois, Demuth [20] desenvolveu a solução para uma camada verticalmente limitada ($K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z = z_i$), e adaptando a teoria de similaridade de Monin-Obukhov à difusão, Van Ulden [59] divulgou a solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, utilizando também perfis de potência para U e K_z .

Uma solução transiente só foi resolvida em 1980 por Nieuwstadt [36], o qual utilizou o seguinte coeficiente de difusão:

$$K_z = Gu_* z \left(1 - \frac{z}{z_i} \right), \quad (2.5)$$

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

No ano seguinte, Nieuwstadt e Haan [37] ampliaram esta solução considerando o fato do crescimento da camada limite. Kock (1989) [24] desenvolveu uma solução analítica bidimensional utilizando os efeitos de absorção ao nível do solo para perfis de potência da velocidade do vento e coeficiente de difusão.

Brown e Arya (1989) [4] têm comparado a eficácia do modelo usando as soluções de Yeh e Huang [68] com os dados de Hanford 67 (Nickola, 1977 [35]), apresentando uma boa concordância entre os resultados do modelo e dados experimentais.

A primeira solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo de uma fonte aérea contínua ao nível do solo para os mesmos perfis de U e K_z dados pelas equações (2.1), mas incluindo a deposição como um mecanismo de remoção foi apresentada por Chrysikopoulos et al. [11] em 1992.

A emissão instantânea foi considerada em 1992, por Van Ulden [60] que desenvolveu uma solução aproximada, descrevendo o campo de concentração como a soma de "puffs".

Moura, [33] para o caso estável em 1995, e Pires, [43] para o caso convectivo 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]. Moreira (1996) [32] propôs uma solução para o caso bidimensional estacionário usando o mesmo artifício dos trabalhos anteriores.

Em 1997, Lin e Hildeman [29] estenderam a solução de Yeh e Huang [68] e Berlyand [3], de 1975, para o caso de deposição para o solo.

Uma grande variedade de soluções numéricas da equação de difusão-advecção pode ser encontrada na literatura (Nieuwstadt e Van Ulden, 1978 [38]; Lamb, 1978 [27]; Carvalho, 1996 [7]), pois as soluções numéricas às vezes são preferidas por sua praticidade. Porém ela contém erros de aproximação, por isso as soluções híbridas (analítica-numérica) ou analíticas vêm como uma alternativa para diminuição dos erros ou até sua inexistência.

A GITT (Generalized Integral Transform Technique) é um método híbrido proposto por Cotta (1993) [12] e Cotta e Mikhaylov (1997) [13] derivado da transformação integral clássica [30] para problemas lineares de difusão. É vasta a literatura a respeito da GITT, e sua aplicação em problemas de poluição atmosférica vem crescendo muito nestes últimos anos. Em 1999, Moura [34] resolveu analiticamente a equação de difusão-advecção estacionária bidimensional e tridimensional, pela GITT, onde os coeficientes de difusão eram dependentes da distância da fonte.

Em 2000, Wortmann et al [66] desenvolveram uma solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficientes de difusão variáveis. Neste mesmo ano, Cataldi et al. [8] encontraram a solução de difusão advecção atmosférica para uma fonte pontual instântenea, e Ribeiro et al [44] simularam computacionalmente a dispersão de poluentes com uma fonte contínua em condição de neutralidade atmosférica, ambos os trabalhos foram para a camada limite superficial. Em 2002, Ribeiro et al [45] estenderam seus estudos para camada limite atmosférica.

Velloso et al (2003) [61] desenvolveram um modelo levando em conta o efeito do mecanismo de deposição sobre a dispersão de poluentes na atmosfera. Neste mesmo ano, Storch e Pimentel [55] simularam a dispersão de poluentes levando em conta apenas a turbulência vertical.

Em 2003, Buske et al [6] e em 2004 Wortmann et al [67] apresentaram uma solução analítica para a equação de difusão-advecção levando em conta condições de vento forte e a velocidade horizontal do vento. Em 2005, Storch et al [54] simularam a dispersão de poluentes na atmosfera usando o método de Sign-Count para resolver o problema transformado, e Buske et al [5] apresentaram a solução para a equação bidimensional transiente aplicando a Transformada de Laplace na variável do tempo transformando a equação original numa equação estacionária, resolvendo esta pela técnica GITT e reconstruindo a solução pela inversão numérica de quadratura de Gauss-Legendre.

Vale salientar que os trabalhos de [5], [6], [66] e [67] diferenciam-se dos outros trabalhos já citados, pois estes apresentam soluções analíticas para o problema transformado utilizando a técnica da Transformada de Laplace (esta formulação será apresentada no capítulo 4).

3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

A atmosfera ou a camada gasosa que envolve o planeta é formada por uma mistura de gases, e cuja a espessura é aproximadamente de 1000 km . Porém, este estudo é voltado para a parte mais próxima à terra, que pode atingir até 11 km de altitude, e tem como característica apresentar uma diminuição da temperatura com a altura - a chamada troposfera. Isto porque, é onde ocorre quase todos os fenômenos meteorológicos, como as nuvens, as chuvas e os ventos.

A troposfera pode ser dividida em Atmosfera Livre e Camada Limite Planetária (CLP). A Atmosfera Livre é a parte mais alta da troposfera, e é onde o fluxo de ar não é turbulento. A CLP é a camada que tem contato direto com a superfície da Terra, e sua altura vai até onde o efeito entre o atrito causado entre o ar e a superfície é bastante significativo. Segundo Stull (1988) [57] e Garrat (1992) [21], ela ainda pode ser definida como uma camada na qual os efeitos da superfície são sentidos diretamente numa escala tempo menor do que um dia, e na qual fluxos de momentum, calor e massa são transferidos pelos movimentos turbulentos numa escala da ordem da profundidade da CLP ou menor (varia de aproximadamente de 10 m até $2\text{ a }3\text{ km}$).

A profundidade desta camada varia devido a vários fatores: rugosidade da superfície, umidade, taxa de aquecimento e resfriamento da superfície, cisalhamento do vento, entre outros. O transporte, nesta camada, é dominado pela advecção na horizontal (vento médio) e na vertical pela difusão (turbulência). A turbulência é composta por turbilhões (de tamanhos variáveis que podem ser da ordem de 1 mm a 3 km de diâmetro) que se sobrepõem.

Segundo Stull (1988) [57], sobre a superfície terrestre, nas regiões de alta pressão, a Camada Limite Planetária tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia. Normalmente, em um período de 24 horas, a CLP pode ser classifi-

cada (como mostra a Figura 3.1) quanto aos seus forçantes como: Camada Limite Convectiva, Camada Residual e Camada Limite Estável.

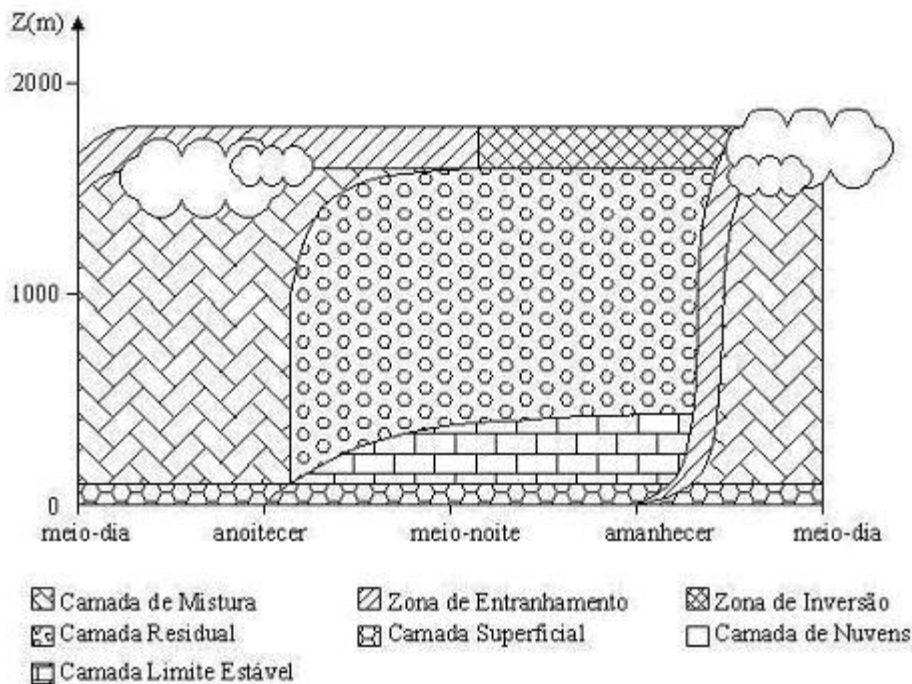


Figura 3.1: Estrutura da Troposfera (Stull, [57])

3.1 Camada Limite Convectiva:

Ao amanhecer, a Terra é aquecida pela radiação advinda do Sol, e esta se torna mais quente que a atmosfera, a qual por condução aquece o ar em contato com ela. Este ar aquecido se torna mais leve que o ar logo acima (mais frio) e, tende a subir; enquanto o ar mais frio tende a descer. Este movimento convectivo e consecutivo dá origem à Camada Limite Convectiva (CLC).

No meio da tarde esta camada pode atingir a altura de 1000 a 2000 metros. Como a maioria das fontes poluidoras está próxima da superfície, a con-

centração de contaminantes pode aumentar significativamente na CLC, pois estes poluentes são transportados pelos turbilhões e pelas termas (massas de ar quente que se elevam a partir do solo). Durante o decorrer do dia, as termas vão alcançando alturas cada vez maiores.

Pode-se, definir a CLC como aquela região da atmosfera que se estende do solo ($z = 0$) até a altura onde ocorre fluxo de calor negativo ($z = z_i$), e que é caracterizada por uma forte mistura vertical impulsionada pelo fluxo vertical de calor positivo. Esta mistura vertical intensa é provocada por movimentos convectivos organizados, gerados pelo aquecimento solar da superfície terrestre.

A Camada Limite Planetária pode ser dividida em: Camada Superficial, Camada de Convecção Livre, Camada de Mistura, Camada Interfacial de Entranhamento.

3.1.1 Camada Superficial (CS):

Na camada superficial são observados grandes gradientes de temperatura e velocidade, e o fluxo turbulento é aproximadamente constante. Na camada superficial é onde a teoria de Monin-Obukhov é válida, o cisalhamento do vento (turbulência mecânica) tem um papel dominante e está restrita a alturas menores do que $z \leq |L|$. O comprimento de Monin-Obukhov, L , é definido como sendo:

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

onde Θ 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 Panofsky & Dutton (1984) [39], uma CLC é considerada bem desenvolvida quando valores de $|L|$ estão entre 10 e 100 metros e onde $\frac{z_i}{|L|} \geq 10$, esta razão pode ser considerada um parâmetro de estabilidade, já que expressa a importância da turbulência convectiva e da turbulência mecânica. A partir da razão

entre a altura da CLC (z_i) e o comprimento de Monin-Obukov (L) podemos saber se o experimento analisado é de convecção fraca, moderada ou alta, isto é:

- Convecção fraca: $\frac{z_i}{|L|} < 5$;
- Convecção moderada: $5 < \frac{z_i}{|L|} < 10$;
- Convecção alta: $\frac{z_i}{|L|} > 10$.

3.1.2 Camada de Convecção Livre (CCL):

Esta camada compreende a parte da CLC entre $|L| < z < 0,1z_i$, nesta camada a velocidade u_* não é importante, mas a escala z ainda é. De fato, u_* nunca chega a zero na prática, mas a condição de convecção livre local determina a escala da estrutura da turbulência.

3.1.3 Camada de Mistura (CM):

Esta camada compreende a maior parte da CLC: $0,1z_i < z < z_i$, e tem este nome 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.

Devido a esta mistura, a turbulência nesta região pode ser considerada quase homogênea, e insensível a z e a u_* . Sendo assim, os parâmetros mais importantes para a descrição desta camada são z_i e w_* , isto foi mostrado através dos modelos numéricos [14], observações de campo [23] e os experimentos de laboratório [64]. A escala de velocidade característica w_* , é dada 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_* . 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.

3.1.4 Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE):

A camada interfacial de entranhamento estende-se de aproximadamente $0,8z_i$ até $1,2z_i$ e pode ser muito espessa (em média aproximadamente 40% da profundidade da camada de mistura) devido ao processo de entranhamento.

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. Nesta zona, a estrutura da turbulência pode ser dominada por efeitos de entranhamento, pelas características da camada de inversão e pela atmosfera estável acima.

Durante a convecção livre (o fluxo de calor é o principal forçante da turbulência) ocorre a penetração de convecção, onde plumas térmicas provenientes da superfície ganham momentum e se elevam através da camada de mistura. Estas buscam o ar da atmosfera livre e encontram um empuxo negativo, fazendo com que penetrem a uma curta distância devido a seu momentum.

Há pouca turbulência 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.

3.2 Camada Residual (CR):

Pouco antes do pôr-do-sol ocorre um decaimento dos grandes turbilhões que formam a CLC, resultando numa Camada Residual, que é uma camada na qual a turbulência existente é um resíduo daquela gerada convectivamente, durante o dia. Na ausência de advecção, traçadores passivos dispersados durante o dia dentro da camada de mistura permanecerão durante a noite na CR. Na Camada Residual, a turbulência existente é aproximadamente igual em todas as direções. Como resultado, plumas de fumaça emitidas dentro da CR tendem a se dispersar em razões iguais nas direções lateral e vertical, apresentando uma forma cônica, como mostra a Figura 3.2.

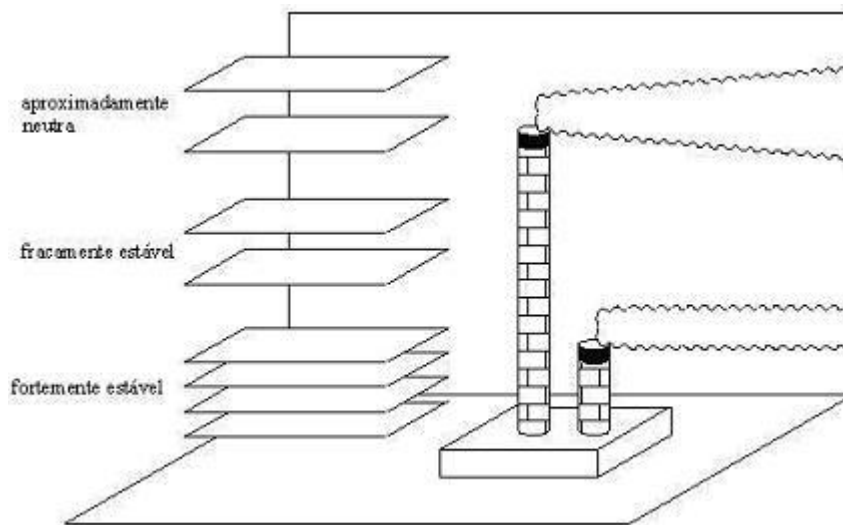


Figura 3.2: Diferença entre o comportamento de uma pluma dispersada na CLE e outra na Camada Residual. Fonte: Stull; 1988, p14. figura adaptada. [57]

No caso de fumaça ser emitida dentro da CR, dificilmente esta vai ser dispersada em direção ao solo, devido a turbulência limitada. Segundo Stull (1988) [57], plumas de fumaça na CR podem se dispersar até onde a base da pluma colide com o topo da Camada Limite Estável (CLE). A forte estabilidade estática e a

redução freqüente na turbulência reduzem a mistura para baixo dentro da CLE. O topo da pluma de fumaça algumas vezes pode continuar a subir dentro do ar neutro. Isto é chamado lofting.

Freqüentemente a Camada Residual aparece durante um período de tempo nas manhãs, antes de entranhar-se dentro da nova Camada de Mistura. Durante este tempo, a radiação solar pode desencadear reações fotoquímicas.

A Camada Residual não fica em contato com o solo, mas tem sua base modificada pelo avanço da Camada Limite Estável, que surge durante a noite. O restante da CR não é afetado pelo transporte das propriedades da superfície, o que faz com que esta camada não se adapte completamente às definições de Camada Limite Planetária, as quais afirmam que a atmosfera é considerada CLP até a altura na qual há influência da superfície no escoamento do ar. Portanto, deve-se considerar a Camada Residual como uma exceção das regras nos estudos da CLP.

3.3 Camada Limite Estável (CLE):

A Camada Limite Estável surge antes do pôr-do-Sol, quando a atmosfera está cedendo calor para a Terra, ou seja, a superfície terrestre está mais fria do que o ar em contato com ela. O ar em contato com a superfície passa então a ceder calor por condução, fazendo com que a superfície esfrie-se e, conseqüentemente, se estabilize.

O tipo de estrutura desta CLE depende basicamente de dois tipos de resfriamento: o radiativo (de onda longa, denominado infravermelho) e o turbulento (caracterizado pelo transporte turbulento de calor sensível). Na situação de domínio do resfriamento radiativo, a inversão é acentuada e a turbulência é fraca e intermitente, levando a um desacoplamento entre as diferentes partes da CLE e colaborando para a formação de jatos de baixos níveis. Neste caso, tem-se uma CLE considerada muito estável, onde os jatos de baixos níveis contribuem para a

formação de turbulência mecânica. Na situação oposta, quando o resfriamento turbulento é dominante, a presença de turbilhões tende a gerar uma camada de mistura contínua que acopla as diferentes partes da CLE, e esta é considerada pouco estável.

Devido à natureza física da CLE, pode-se distinguir algumas diferenças sensíveis de profundidade entre a altura da inversão e a camada de mistura turbulenta. A camada de mistura turbulenta pode ser bem menor do que a profundidade da inversão, no caso de perfil de resfriamento radiativo, e também podem ocorrer casos em que a camada de mistura turbulenta seja bem desenvolvida, com a mesma ordem de grandeza da inversão, no caso de perfil de resfriamento turbulento. Quanto mais desenvolvida for a Camada Limite Estável, maior será a sua profundidade, e, conseqüentemente, menor será a espessura da Camada Residual.

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

3.4 A Estrutura da Turbulência na Camada Limite Convectiva

Na CLC, o fluxo de calor sensível turbulento gerado pelo aquecimento solar da superfície terrestre produz uma forte mistura vertical e 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 até a superfície. Para condições suficientemente instáveis, estas estruturas são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional, com escalas de tempo da ordem de 15 minutos.

As observações na atmosfera indicam que 40% da área de uma CLC é ocupada por plumas térmicas (updrafts), enquanto 60% é ocupada por ar mais frio que desce (downdrafts). 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 [28]. Esta assimetria na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de poluentes abandonados por altas chaminés na CLC. A circulação convectiva, incluindo o "downdraft" (ar descendo) e "updraft" (ar subindo), tem escalas horizontais de $1.5z_i$ [9]. As velocidades verticais das termas podem alcançar 5 m/s ou mais, embora updrafts de 1 a 2 m/s sejam mais comuns.

4 DESCRIÇÃO DO MÉTODO

Para solucionar problemas pelo método GITT, a equação diferencial a ser resolvida e suas condições iniciais ou de contorno devem ter as seguintes condições:

1. O operador diferencial da equação que se quer resolver tem que ter um termo laplaciano. Se a equação não tiver este termo, isto pode ser contornado acrescentando um termo condutivo multiplicado por um coeficiente ε , com a solução final obtida fazendo-se o limite de ε tender a zero.

2. O método deve ser aplicado em problema de dimensão finita.

3. As condições iniciais ou de contorno têm que ser homogêneas. Esta limitação pode ser contornada com o uso do filtro nas condições não-homogêneas.

Com estas condições satisfeitas, ilustrar-se-á o método GITT mostrando os principais passos da solução de um problema unidimensional.

4.1 GITT:

Seja a equação

$$A^*\vartheta(x, y) = F^*, \quad (4.1)$$

em $a < x < b$ e $y > 0$, sujeitas às condições de contorno homogêneas,

$$\alpha_1 \frac{\partial \vartheta(x, y)}{\partial x} \Big|_{x=a} + \alpha_2 \vartheta(a, y) = 0 \quad (4.1a)$$

$$\beta_1 \frac{\partial \vartheta(x, y)}{\partial x} \Big|_{x=b} + \beta_2 \vartheta(b, y) = 0, \quad (4.1b)$$

onde A^* é o operador diferencial parcial associado ao problema unidimensional, F^* é o termo fonte e α_1 , α_2 , β_1 e β_2 são constantes dependentes das propriedades físicas do problema.

O primeiro passo é expandir $\vartheta(x, y)$ em uma base adequada. Para isto, precisamos reescrever o operador A^* ,

$$A^*\vartheta(x, y) = B^*\vartheta(x, y) + L^*\vartheta(x, y), \quad (4.2)$$

onde L^* é o operador associado ao problema de Sturm-Liouville e B^* é o operador associado aos termos restantes. Assim, L^* tem a forma:

$$L^*\Psi(\lambda, x) = \nabla \cdot [p(x)\nabla\Psi(\lambda, x) + q(x)\Psi(\lambda, x)]. \quad (4.3)$$

As funções $p(x)$ e $q(x)$ devem ser reais e contínuas, e ainda $p(x) > 0$ em todo o intervalo (a, b) , definido nos problemas representados pelas equações (4.1), (4.1a) e (4.1b).

O problema auxiliar (problema de Sturm Liouville) é definido pelas seguintes equações

$$L^*\Psi(\lambda, x) + \lambda^2\Psi(\lambda, x) = 0 \quad em \quad a < x < b, \quad (4.4)$$

$$\alpha_1 \frac{\partial\Psi(\lambda, x)}{\partial x} \Big|_{x=a} + \alpha_2\Psi(\lambda, a) = 0 \quad (4.4a)$$

$$\beta_1 \frac{\partial\Psi(\lambda, x)}{\partial x} \Big|_{x=b} + \beta_2\Psi(\lambda, b) = 0, \quad (4.4b)$$

onde α_1 , α_2 , β_1 e β_2 são as mesmas constantes das condições (4.1a) e (4.1b). A equação (4.4) pode ser reescrita para um λ_i qualquer, uma vez que o parâmetro λ_i é independente das constantes α_1 , α_2 , β_1 e β_2 . Assim,

$$L^*\Psi(x) + \lambda_i^2\Psi(x) = 0, \quad (4.5)$$

onde $\Psi_i(x) \equiv \Psi(\lambda_i, x)$. Logo, os autovalores e autovetores do operador L^* são respectivamente λ_i e $\Psi_i(x)$, os quais formam uma base para o espaço onde o operador L^* está contido, cuja ortogonalidade é dada por Özisik (1980) [69]:

$$\frac{1}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} \int_v \Psi_i(x)\Psi_j(x)dx = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (4.6)$$

onde N_i é definida como:

$$N_i = \int_v \Psi_i^2(x) dx. \quad (4.7)$$

A base de autofunções é usada para expandir a variável $\vartheta(x, y)$ da equação (4.1) na seguinte forma, conhecida como fórmula da inversa:

$$\vartheta(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\bar{\vartheta}_i(y) \Psi_i(x)}{\sqrt{N_i}}. \quad (4.8)$$

Uma vez determinado o problema de autovalores e os autovetores associados ao problema original e expandida a sua variável dependente, deve-se aplicar o seguinte operador, que é a transformada integral propriamente dita:

$$\frac{1}{\sqrt{N_j}} \int_v \Psi_j(x) dx. \quad (4.9)$$

Assim, fazendo todas as integrações, o resultado é um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), cuja variável dependente é $\bar{\vartheta}_i(y)$. A obtenção desta variável é feita solucionando este sistema de equações, e a partir disto, o somatório da equação (4.8) pode ser truncado em um número de termos suficientemente grande para se determinar aproximadamente o potencial original $\vartheta(x, y)$.

4.2 Solução do sistema de equações diferenciais ordinárias transformado:

Nas aplicações típicas da GITT, a solução do sistema de EDOs transformado é obtida numericamente. Alguns trabalhos recentes mostram [67], [6], [66] e [5] que estas EDOs podem ser resolvidas analiticamente, gerando uma solução totalmente analítica para a equação (4.1). O método empregado para resolver a EDO é o uso da Transformada de Laplace juntamente com a diagonalização. Assim,

este método pode ser chamado de GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique).

Seja a equação diferencial ordinária:

$$F \frac{\partial Z(y)}{\partial y} + G \cdot Z(y) = 0, \quad 0 < y < \infty \quad (4.10)$$

$$Z(0) = f(x) \quad (4.10a)$$

onde F e G são matrizes e $Z(y)$ um vetor. Primeiramente faz-se

$$\frac{\partial Z(y)}{\partial y} + H \cdot Z(y) = 0, \quad 0 < y < \infty \quad (4.11)$$

$$Z(0) = f(x) \quad (4.11a)$$

onde $H \equiv F^{-1} \cdot G$; aplica-se a transformada de Laplace na equação (4.11). O resultado é

$$s \overline{Z(s)} - Z(0) + H \cdot \overline{Z(s)} = 0, \quad (4.12)$$

ou equivalentemente,

$$s \overline{Z(s)} + H \cdot \overline{Z(s)} = Z(0). \quad (4.13)$$

A barra superior indica potencial transformado, e s é a variável independente transformada. A seguir, decompõe-se a matriz H em seus autovalores e autovetores,

$$H = X_{ave} \cdot D_{av} \cdot X_{ave}^{-1}, \quad (4.14)$$

onde X_{ave} é a matriz de autovetores, e D_{av} é matriz diagonal de autovalores de H . Esta fatoração pode ser aplicada toda vez que os autovalores da matriz H sejam distintos, não nulos e linearmente independentes. Assim, substituindo a equação (4.14) em (4.13), obtem-se:

$$s \overline{Z(s)} + X_{ave} \cdot D_{av} \cdot X_{ave}^{-1} \cdot \overline{Z(s)} = Z(0), \quad (4.15)$$

ou ainda,

$$(sI + X_{ave}.D_{av}.X_{ave}^{-1}).\overline{Z(s)} = Z(0). \quad (4.16)$$

Aqui I é a matriz identidade, logo pode-se reescrevê-la como $I = X_{ave}.X_{ave}^{-1}$ e assim, a equação (4.16) assume a forma

$$(sX_{ave}.X_{ave}^{-1} + X_{ave}.D_{av}.X_{ave}^{-1}).\overline{Z(s)} = Z(0) \quad (4.17)$$

ou,

$$X_{ave}.(sI + D_{av}).X_{ave}^{-1}.\overline{Z(s)} = Z(0), \quad (4.18)$$

onde $(sI + D_{av})$ é uma matriz diagonal, cujos elementos da diagonal principal são $(s + d_i)$, sendo d_i os autovalores da matriz H .

Multiplicando ambos os lados da equação (4.18) por X_{ave}^{-1} , $(sI + D_{av})^{-1}$ e X_{ave} , tem-se

$$\overline{Z(s)} = X_{ave}.(sI + D_{av})^{-1}.X_{ave}^{-1}Z(0). \quad (4.19)$$

Aplicando a transformada de Laplace inversa na equação acima, representada aqui pelo operador \mathfrak{L}^{-1} temos

$$\mathfrak{L}^{-1}\{\overline{Z(s)}\} = \mathfrak{L}^{-1}\{X_{ave}.(sI + D_{av})^{-1}.X_{ave}^{-1}Z(0)\}. \quad (4.20)$$

Como X e $Z(0)$ são constantes, podemos escrever

$$Z(y) = X_{ave}.\mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D_{av})^{-1}\}.X_{ave}^{-1}Z(0) \quad (4.21)$$

e por fim, faz-se

$$Z(y) = X_{ave}.E(y).X_{ave}^{-1}Z(0), \quad (4.22)$$

onde

$$E(y) = \mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D_{av})^{-1}\}, \quad (4.23)$$

ou seja,

$$E(y) = \mathfrak{L}^{-1} \left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{s+d_n} \end{bmatrix} \right\} \quad (4.24)$$

e aplicando a transformada de Laplace Inversa, temos que

$$E(y) = \begin{bmatrix} \exp^{-yd_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \exp^{-yd_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \exp^{-yd_n} \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

e assim a solução de um sistema de EDO's com coeficientes constantes, representada pela equação (4.22) fica totalmente fechada.

Para diminuir o tempo computacional utiliza-se um procedimento alternativo para não fazer a inversão da matriz X_{ave} , sugerido por Segatto e Vilhena (1999) [51]. Primeiramente, é escolhido um vetor ξ como sendo

$$\xi = X_{ave}^{-1} \cdot Z(0) \quad (4.26)$$

substituindo na equação (4.22) para $y = 0$ tem-se

$$Z(0) = X_{ave} \cdot E(0) \cdot \xi, \quad (4.27)$$

como $E(0)$ neste caso é a matriz identidade, assim

$$X_{ave} \cdot \xi = Z(0) \quad (4.28)$$

onde os valores do vetor ξ são calculados a partir da decomposição LU, cujo custo computacional é menor do que uma inversão de matrizes.

Logo, a solução final passa a ser

$$Z(y) = X_{ave} \cdot E(y) \cdot \xi. \quad (4.29)$$

4.3 Inversão Numérica da Transformada de Laplace pelo método de Quadratura de Gauss:

A Transformada de Laplace é muitas vezes usada para resolver equações diferenciais ordinárias e parciais. Entretanto, a determinação da função original $f(t)$ a partir da transformada de Laplace

$$F(p) = \mathfrak{L}\{f(t)\} = \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt \quad (4.30)$$

pode ser muito complicada. Em muitos desses casos, métodos numéricos podem ser uma boa alternativa. Um método simples para fazer uma integração numérica é a fórmula de inversão de Bromwich

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{L'} e^{pt} F(p) dp \quad (4.31)$$

onde L' é definido como uma linha no plano complexo. Substituindo

$$pt = v \quad (4.32)$$

e

$$F\left(\frac{v}{t}\right) = v^{-s^*} G(v) \quad (4.33)$$

em (4.31), onde s^* é um parâmetro, obtém-se

$$tf(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{L''} e^v v^{-s^*} G(v) dv \quad (4.34)$$

onde L'' é uma linha.

A integral (4.34) é aproximadamente igual a

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{L''} e^v v^{-s^*} G(v) dv \approx \sum_{k=1}^M A_k^{(s^*)} G(v_k^{(s^*)}). \quad (4.35)$$

Os pesos A_k e as abscissas v_k são números complexos e têm sido tabulados por Salzer [48],[49] e Stroud e Secreste [56] para $s^* = 1$ e por Krylov e Skoblyya [25], e Piessens [42] outros valores de s^* , tal que (4.35) é exata quando $G(v)$ é um polinômio $\frac{1}{v}$ de grau $\leq 2M - 1$. Neste trabalho, usaremos $s^* = 1$.

Substituindo (4.35) em (4.34), nós obtemos

$$f(t) \simeq \sum_{k=1}^M \left(\frac{v_k}{t}\right) A_k F\left(\frac{v_k}{t}\right), \quad (4.36)$$

que é a fórmula da quadratura Gaussiana de M pontos.

5 O MODELO DE POLUIÇÃO DO AR

Seja uma fonte aérea de intensidade Q liberando um traçador químico, abandonado sem empuxo de um altura H_s , conforme a Figura (5.1), considerando que não há fluxo de poluentes no nível do solo e nem na altura da camada limite convectiva.

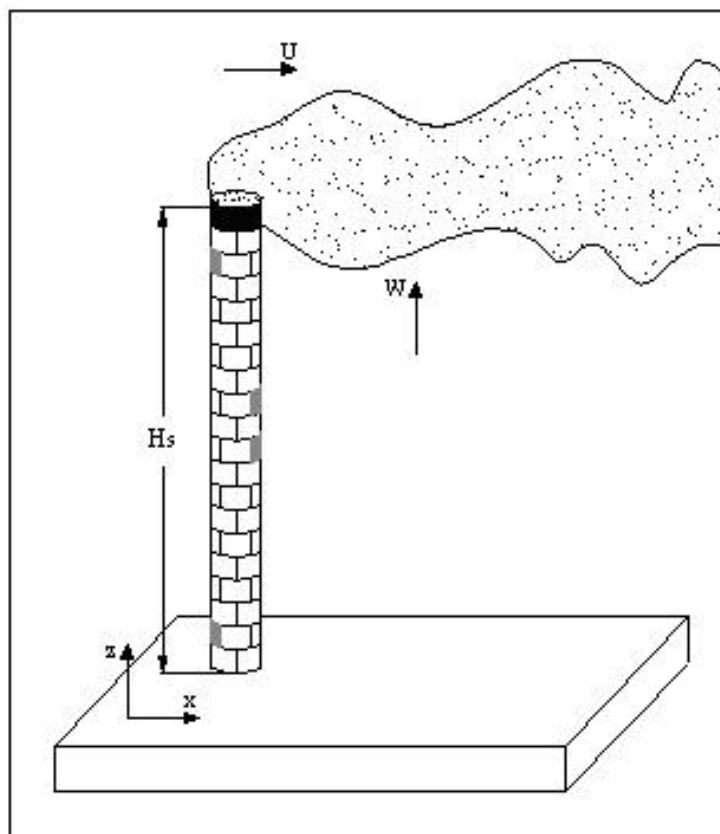


Figura 5.1: Esquema que representa o problema a ser estudado.

O modelo Euleriano de conservação de massa da espécie química, utilizando a aproximação da teoria K, que descreve esta situação física é:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -W \frac{\partial c}{\partial z} - U \frac{\partial c}{\partial x} - V \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (5.1)$$

onde $0 \leq x < \infty$, $-\infty < y < \infty$, $0 \leq z \leq z_i$ e $t > 0$; c é a concentração de poluentes; U , V e W são, respectivamente, a velocidade média do vento longitudinal, transversal e vertical; e K_x , K_y e K_z são, respectivamente, os coeficientes de difusão turbulenta longitudinal, transversal e vertical.

Integrando lateralmente a equação (5.1) temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -W \frac{\partial C}{\partial z} - U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (5.2)$$

onde C é a concentração integrada lateralmente, e considerando situações de vento forte ($|U \frac{\partial C}{\partial x}| \gg |\frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial C}{\partial x})|$), assim a equação proposta a ser resolvida será:

$$\frac{\partial C(x, z, t)}{\partial t} + W \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} + U \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} \right) \quad (5.3)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} = 0, \quad z = 0, \quad z = z_i \quad (5.3a)$$

$$C(x, z, 0) = 0 \quad (5.3b)$$

$$C(0, z, t) = \frac{Q \delta(z - H_s)}{U}, \quad (5.3c)$$

onde Q é a intensidade da fonte, δ é a função Delta de Dirac e H_s é a altura da fonte.

Aplicando a Transformada de Laplace na equação (5.3) em relação a t , tem-se

$$s\bar{C}(x, z, s) - C(x, z, 0) + W \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} + U \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} \right) \quad (5.4)$$

onde \bar{C} é a concentração C transformada e como $C(x, z, 0) = 0$, escreve-se

$$s\bar{C}(x, z, s) + W \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} + U \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} \right). \quad (5.5)$$

Para resolver esta equação é utilizada a técnica GILTT, que consiste em resolver a equação via GITT resultando numa EDO, a qual será resolvida pela Transformada de Laplace.

Portanto, aplicaremos a técnica da GITT em z , pois as condições em z são homogêneas, a equação apresenta o termo difusivo em z e o domínio em z é finito (condições necessárias para a aplicação da GITT). Assim, usando a regra da cadeia em (5.5), obtém-se:

$$s\bar{C}(x, z, s) + W \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} + U \frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, s)}{\partial z^2} + \frac{\partial K_z}{\partial z} \left(\frac{\partial \bar{C}(x, z, s)}{\partial z} \right). \quad (5.6)$$

Escolhendo $\frac{\partial^2 \bar{C}(x, z, s)}{\partial z^2}$ como o operador de Sturm-Liouville, e sendo $L^* \Psi(z) = \frac{\partial}{\partial z} \left(k(z) \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \right) + q(z) \Psi(z)$, onde $k(z) = 1$ e $q(z) = 0$, logo $L^* \Psi(z) = \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2}$ e assim as condições de contorno tornam-se $\frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \Big|_{z=z_i} = 0$ e $\frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0$.

Para determinar as autofunções de qualquer operador usamos

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi''(z) + \lambda^2 \Psi(z) = 0 \\ \Psi'(z) = 0, z = 0 \\ \Psi'(z) = 0, z = z_i \end{array} \right. \quad (5.7)$$

cuja solução é $\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$, onde $\lambda_i = \frac{i\pi}{z_i}$, para $i = 0, 1, 2, \dots$ [69].

Expandindo a variável \bar{C} em

$$\bar{C}(x, z, s) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{C}_i(x, s)} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \quad (5.8)$$

e substituindo na equação (5.6) temos

$$s \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{C}_i(x, s)} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + W \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{C}_i(x, s)} \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}} + U \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{C}_i(x, s)} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} = K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{\bar{C}_i(x, s)} \frac{\partial^2 \Psi_i(z)}{\partial z^2}}{\sqrt{N_i}} + \quad (5.9)$$

$$+ \frac{\partial K_z}{\partial z} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{C_i(x,s)} \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}}$$

Lembrando que $\Psi''(z) + \lambda^2 \Psi(z) = 0$, então $\Psi_i''(z) = -\lambda_i^2 \Psi_i(z)$ e substituindo na equação (5.9) temos

$$s \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{C_i(x,s)} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + W \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{C_i(x,s)} \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}} + U \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\frac{\partial \overline{C_i(x,s)}}{\partial x} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} = -K_z \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 \frac{\overline{C_i(x,s)} \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} + \frac{\partial K_z}{\partial z} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{C_i(x,s)} \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z}}{\sqrt{N_i}} \quad (5.10)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (5.10) pelo operador (4.9)

obtemos

$$s \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{zi} \frac{\overline{C_i(x,s)} \Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz + \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{zi} W \frac{\overline{C_i(x,s)} \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z} \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz + \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{zi} U \frac{\frac{\partial \overline{C_i(x,s)}}{\partial x} \Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz = - \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 \int_0^{zi} K_z \frac{\overline{C_i(x,s)} \Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz + \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{zi} \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\overline{C_i(x,s)} \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z} \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz \quad (5.11)$$

ou equivalentemente

$$\sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{zi} U \frac{\frac{\partial \overline{C_i(x,s)}}{\partial x} \Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz + \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{zi} (\lambda_i^2 K_z + s) \frac{\overline{C_i(x,s)} \Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz + \quad (5.12)$$

$$\sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{zi} (W - \frac{\partial K_z}{\partial z}) \frac{\overline{C_i(x,s)} \frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z} \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz = 0$$

Tomando:

$$Y(x, s) = \{\overline{C_i(x, s)}\}$$

$$A = \{a_{i,j}\} \text{ onde } a_{i,j} = \int_0^{zi} U \frac{\Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz$$

$$B = \{b_{i,j}\} \text{ onde } b_{i,j} = \int_0^{zi} (W - \frac{\partial K_z}{\partial z}) \frac{\frac{\partial \Psi_i(z)}{\partial z} \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz +$$

$$\int_0^{zi} (\lambda_i^2 K_z + s) \frac{\Psi_i(z) \Psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz$$

onde as integrais das matrizes A e B são resolvidas numericamente via Quadratura de Gauss-Legendre.

Logo, a equação (5.12) escrita na forma matricial torna-se

$$A.Y'(x, s) + B.Y(x, s) = 0. \quad (5.13)$$

Tomando $F = A^{-1}.B$, tem-se

$$Y'(x, s) + F.Y(x, s) = 0. \quad (5.14)$$

Se o coeficiente de difusão depender de x e z a equação (5.14) reduz-se a uma equação diferencial ordinária de coeficientes variáveis. Portanto, a equação (5.14) assume a forma:

$$Y'(x, s) + F(x).Y(x, s) = 0. \quad (5.15)$$

Para que se possa resolver a equação (5.15) pela técnica da transformada de Laplace, utilizam-se valores médios de x para o coeficiente de difusão. Assim, a matriz F torna-se constante, a equação diferencial ordinária a ser resolvida aparece como:

$$Y'(x, s) + F.Y(x, s) = 0. \quad (5.16)$$

Para saber a condição inicial da equação acima devemos aplicar o mesmo procedimento aplicado anteriormente na condição (5.3c), ou seja, primeiramente aplicamos a transformada de Laplace:

$$\overline{C}(0, z, s) = \frac{Q\delta(z - H_s)}{U.s}, \quad (5.17)$$

e em seguida aplicamos GITT, ou seja, expandimos a variável \overline{C} em

$$\overline{C}(0, z, s) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{C}_i(0, s)\Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} = \frac{Q\delta(z - H_s)}{U.s} \quad (5.18)$$

e aplica-se o operador transformada integral propriamente dito (4.9)

$$\sum_{i=1}^{\infty} \overline{C}_i(0, s) \int_0^{z_i} \frac{\Psi_i(z)\Psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz = \int_0^{z_i} \frac{Q\delta(z - H_s)\Psi_j(z)}{U.s\sqrt{N_j}} dz \quad (5.19)$$

Logo, resolvendo a integral temos que

$$\overline{C_j(0, s)} = \frac{Q\Psi_j(H_s)}{U(H_s).s\sqrt{N_j}} \quad (5.20)$$

e a condição inicial para a equação (5.16) aparece como é

$$Y(0, s) = \frac{Q\Psi_j(H_s)}{U(H_s).s\sqrt{N_j}}. \quad (5.21)$$

Para resolver a equação (5.16) e sua condição (??) utilizamos a idéia apresentada na seção (4.2) adotada por Wortmann (2003) [65] e o procedimento alternativo para não fazer a inversão da matriz X_{ave} , sugerido por Segatto e Vilhena (1999) [51]. Assim a solução é

$$Y(x, s) = X_{ave}.E(x, s).\xi. \quad (5.22)$$

Utilizando a fórmula da inversa (4.8) e invertendo numericamente a concentração transformada $\overline{C}(x, z, s)$ pelo método da quadratura de Gauss, usando a fórmula (4.36), chegamos à solução final do problema proposto:

$$C(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \left(\frac{v_k}{t}\right) A_k \sum_{i=0}^N \frac{\overline{C}_i(x, \frac{v_k}{t}) \Psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \quad (5.23)$$

com a seguinte condição de contorno

$$C(0, z, t) = \frac{t}{v_k} \frac{Q\Psi_j(H_s)}{U(H_s)\sqrt{N_j}}, \quad (5.24)$$

onde A_k , v_k , M são, respectivamente, os pesos, as abcissas e a ordem da quadratura considerada.

6 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA E PERFIL TURBULENTO

A escolha adequada da parametrização e do perfil turbulento representa um papel importante nos modelos de dispersão de poluentes. Neste capítulo mostraremos três coeficientes de difusão, para descrever a estrutura turbulenta da CLC, todos propostos por Degrazia et al [19], [18], [17] a partir da teoria de difusão de Taylor [58] combinada com o espectro de energia cinética turbulenta e dois perfis de vento: um logarítmico e outro potencial para a velocidade horizontal longitudinal.

6.1 Coeficientes de difusão:

6.1.1 Coeficiente para grandes tempos de difusão :

A formulação inicia a partir da equação para o parâmetro de dispersão generalizada σ_α^2 , com $\alpha = x, y, z$ e $i = u, v, w$, dado por Pasquill e Smith [40]:

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen}^2\left(\frac{\pi n t}{\beta_i}\right)}{n^2} dn \quad (6.1)$$

onde $F_i^E(n)$ é o valor do espectro de energia Euleriana normalizado pela variância da velocidade Euleriana, σ_i é o desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento, n é a frequência, t o tempo de viagem e β_i é a razão das escalas integrais de tempo Lagrangeana e Euleriana. A razão β_i , segundo Wandel e Kofoed-Hansen (1962) [62], pode ser escrita como:

$$\beta_i = \left(\frac{\pi U^2}{16\sigma_i^2}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (6.2)$$

Uma expressão para o coeficiente de difusão dependente do tempo pode ser expresso por [16]:

$$K_\alpha = \frac{d}{dt} \left(\frac{\sigma_\alpha^2}{2} \right) \quad (6.3)$$

Substituindo (6.1) em (6.3) obtém-se:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen} \left(\frac{2\pi n t}{\beta_i} \right)}{n} dn, \quad (6.4)$$

como $F_i^E(n)$ e a função seno são funções pares, então

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{4\pi} \int_{-\infty}^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen} \left(\frac{2\pi n t}{\beta_i} \right)}{n} dn. \quad (6.5)$$

Definindo $g = \frac{2\pi n}{\beta_i}$ a equação (6.5) pode ser reescrita na forma:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{4} \int_{-\infty}^\infty F_i^E \left(\frac{g \beta_i}{2\pi} \right) \frac{\text{sen} g t}{\pi g} dg. \quad (6.6)$$

Introduzindo-se o limite para $t \rightarrow \infty$ pode-se escrever

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{4} \int_{-\infty}^\infty F_i^E \left(\frac{g \beta_i}{2\pi} \right) \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{sen} g t}{\pi g} dg, \quad (6.7)$$

lembrando-se que $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{sen} g t}{\pi g}$ é a função delta de Dirac, obtém-se

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{4} \int_{-\infty}^\infty F_i^E \left(\frac{g \beta_i}{2\pi} \right) \delta(g) dg, \quad (6.8)$$

e assim,

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{4} F_i^E(0), \quad (6.9)$$

onde $F_i^E(0)$ é o valor do espectro Euleriano da velocidade turbulenta em uma dimensão na origem normalizado pela velocidade turbulenta, tendo a seguinte forma:

$$F_i^E(0) = \frac{z}{(f_m^*)_i U} \quad (6.10)$$

de modo que a frequência adimensional do pico espectral vertical seja

$$(f_m^*)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_w}, \quad (6.11)$$

onde o comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical é definido como

$$(\lambda_m)_w = 1.8 z_i \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right]. \quad (6.12)$$

Uma expressão para a variância da velocidade turbulenta é dada a partir do ajuste empírico das variâncias observadas em Minnesota e Ashchurch [53]:

$$\frac{\sigma_w}{w_*} = 1.16 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}. \quad (6.13)$$

Fazendo as devidas substituições na equação (6.8) tem-se o coeficiente de difusão vertical proposto por Degrazia et al (1997) [19] para grandes tempos de difusão:

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]. \quad (6.14)$$

6.1.2 Coeficiente de difusão em função da posição e da altura (formulação integral) :

A equação para o espectro da velocidade Euleriana sob condições instáveis, pode ser expressa como uma função de escalas convectivas como [15]:

$$\frac{n S_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1.06 c_i f \psi^{2/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3} \left[1 + 1.5 \left(\frac{f}{(f_m^*)_i}\right)\right]^{5/3}}, \quad (6.15)$$

onde $c_i = \alpha_i \alpha_p (2\pi k)^{-2/3}$, $\alpha_p = 0.5 \pm 0.05$ e $\alpha_i = 1, 4/3, 4/3$ para as componentes u , v e w respectivamente [10], $k = 0.4$ é a constante de Von Kármán, $f = \frac{nz}{U(z)}$, z é a altura acima do solo, ψ é a taxa de dissipação.

Integrando a equação (6.15) sobre todas as frequências, obtém-se a seguinte variância da velocidade Euleriana:

$$\sigma_i^2 = 1.06 c_i \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_i^{2/3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2, \quad (6.16)$$

sendo que esta equação é utilizada para normalizar o espectro. Sendo assim, o espectro Euleriano normalizado pode ser escrito como

$$F_i^E(n) = \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2} = \frac{z}{U (f_m^*)_i} \left[1 + 1.5 \frac{f}{(f_m^*)_i}\right]^{-5/3}. \quad (6.17)$$

Substituindo (6.16), (6.17) em (6.4) e considerando $\beta_i = 0.55 \frac{U}{\sigma_i}$, temos:

$$K_\alpha = \frac{0.09c_i^{1/2}\psi^{2/3}z^{4/3}w_*}{(f_m^*)_i^{4/3}z_i^{1/3}} \int \frac{\text{sen}(an)}{\left(1 + \frac{1.5nz}{(f_m^*)_i U}\right)^{5/3}} \frac{dn}{n}, \quad (6.18)$$

onde

$$\frac{2\pi t}{\beta_i} \equiv a = \frac{11.76c_i^{1/2}\psi^{1/3}}{(f_m^*)_i^{1/3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \frac{z_i}{U} X \quad (6.19)$$

e X é a distância adimensional definida pela razão entre o tempo de viagem $\frac{x}{U}$ e o tempo de escala convectiva, $\frac{z_i}{w_*}$, ou seja,

$$X = \frac{xw_*}{Uz_i} \quad (6.20)$$

e

$$\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 \left(\frac{z}{L}\right)^{-2/3} + 0.75\right]. \quad (6.21)$$

Seja

$$n' = bn \quad \text{onde} \quad b = \frac{1.5z}{U(f_m^*)_i}. \quad (6.22)$$

Portanto, reescrevendo a equação (6.18), obtemos o coeficiente de difusão em função da posição e da altura (formulação integral) proposto por Degrazia et al (2001) [18]

$$\frac{K_z}{w_*z_i} = \frac{0.09c_i^{1/2}\psi^{1/3}(z/z_i)^{4/3}}{(f_m^*)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\text{sen}\left(\frac{7.84c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_i^{2/3}n'X}{(z/z_i)^{2/3}}\right)}{(1+n')^{5/3}} \frac{dn'}{n'}. \quad (6.23)$$

6.1.3 Coeficiente de difusão em função da posição e da altura (formulação algébrica) :

O parâmetro de dispersão generalizado obtido por Weil (1988) [63], a partir de um conjunto de dados durante um estudo de campo, sugere o seguinte modelo para o parâmetro de dispersão em fontes elevadas na CLP:

$$\sigma_\alpha = \frac{\sigma_i t}{(1 + t/2T_{L_i})^{1/2}}, \quad (6.24)$$

onde σ_i é definido pela equação (6.16) e T_{L_i} é definido pela equação (??).

Substituindo $\beta_i = 0.55 \frac{U}{\sigma_i}$ e (6.10) em (6.24), temos

$$T_{L_i} = \frac{0.13z^{2/3}z_i^{1/3}}{c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_i^{2/3}w_*}. \quad (6.25)$$

A partir da equação (6.3) e (6.24) temos uma formulação para o coeficiente K_α como segue

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 t}{(1 + t/2T_{L_i})^2} (1 + t/4T_{L_i}). \quad (6.26)$$

Assim, substituindo (6.16), (6.20) e (6.25) em (6.26) temos uma equação algébrica para K_α sugerida por Degrazia (2002):

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = \frac{0.583c_i \psi^{2/3} (z/z_i)^{4/3} X [0.55(z/z_i)^{2/3} + 1.03c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)_i^{2/3} X]}{[0.55(z/z_i)^{2/3} (f_m^*)_i^{1/3} + 2.06c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)_i X]^2}. \quad (6.27)$$

6.1.4 Comparação entre os coeficientes de difusão:

Pode-se perceber no gráfico apresentado na figura (6.1) que à medida que x aumenta, os coeficientes de difusão tendem a um limite assintótico. É importante salientar que a equação (6.23) não tem solução analítica, sendo assim, sua solução é obtida numericamente. O artigo publicado por Degrazia et al (2002) [17] mostra uma comparação entre os coeficientes de formulação integral e de formulação algébrica, no qual mostra quando ambas formulações são aplicadas a modelos de poluição de ar apresentam resultados numéricos e estatísticos semelhantes. Desta forma, para facilitar a implementação computacional, vamos aplicar no modelo de poluição de ar proposto apenas das equações (6.14) e (6.27).

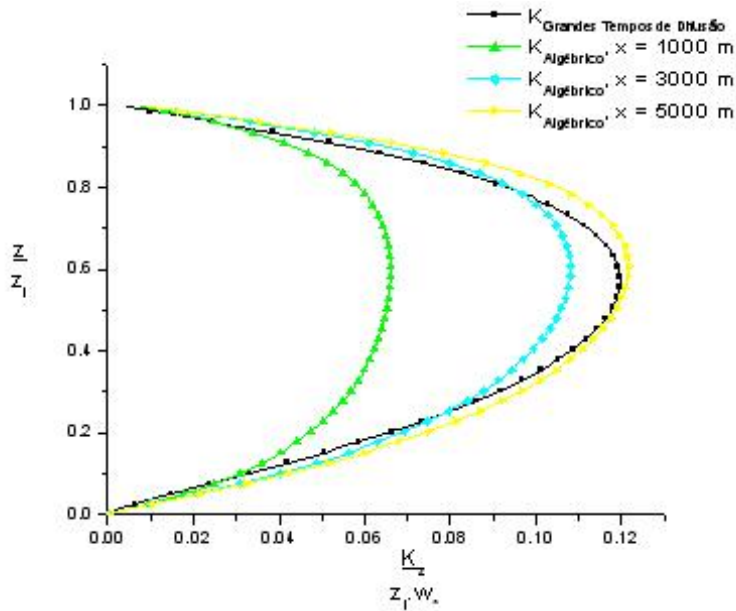


Figura 6.1: Comparação dos coeficientes de difusão propostos na secção (6.1.1) e (6.1.3) utilizando as distâncias $x = 1000m$, $x = 3000m$, $x = 5000m$

6.2 Perfil do Vento :

Neste estudo, foi utilizado um perfil logarítmico para a velocidade média do vento que foi parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML [2]:

$$U = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b \quad e \quad U = U(z_b) \quad \text{se } z > z_b, \quad (6.28)$$

onde $z_b = \min [|L|, 0.1z_i]$, $k = 0.4$ é a constante de Von Kármán, u_* é a velocidade de fricção, z_0 o comprimento de rugosidade e Ψ_m é a função estabilidade dada por Paulsen (1975) [41]:

$$\Psi_m = 2 \ln \left[\frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[\frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2}, \quad (6.29)$$

com A definido por:

$$A = \left(1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/4}. \quad (6.30)$$

Também foi utilizado, a velocidade do perfil do vento descrita por uma lei de potência [39]:

$$U = U_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \quad (6.31)$$

onde z_1 e U_1 são respectivamente a altura e a velocidade na altura em que foi medido o vento, o valor de n depende da estabilidade.

7 VALIDAÇÃO DO MODELO

Para a validação do modelo comparamos os dados experimentais do Experimento de Copenhagen com os dados obtidos a partir da solução analítica da equação de difusão-advecção transiente pela técnica GILTT.

7.1 Experimento de Copenhagen :

O experimento de Copenhagen, descrito nos artigos Gryning e Lyck (1984), e Gryning (1987), ocorreu na parte norte da cidade de Copenhagen em condições neutras e instáveis. O local era principalmente residencial, com rugosidade de aproximadamente $0,6\text{ m}$. O traçador SF_6 foi lançado sem empuxo a partir de uma torre de 115 m e coletado no nível do solo. O abandono de SF_6 começou uma hora antes do início da amostragem. Os dados do experimento são mostrados nas tabelas (7.1), (7.2) e (7.3), onde U foi medido numa altura de 10 m . Como na literatura não consta os dados de 10 em 10 minutos, para o experimento 6, da velocidade de fricção e do comprimento de Monin-Obukhov não será realizado o experimento 6.

Tabela 7.1: Parâmetros micrometeorológicos no experimento de Copenhagen

Exp.	U (m/s^{-1})	z_i (m)
1	3.4	1980
2	10.6	1920
3	5.0	1120
4	4.6	390
5	6.7	820
7	7.6	1850
8	9.4	810
9	10.5	2090

Tabela 7.2: Velocidade de fricção u_* em (m/s) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 minutos.

Passo de tempo	1	2	3	4	5	7	8	9
1	0.36	0.68	0.46	0.56	0.58	0.48	0.65	0.72
2	0.37	0.67	0.45	0.51	0.52	0.48	0.79	0.73
3	0.40	0.81	0.47	0.37	0.51	0.57	0.67	0.60
4	0.43	0.68	0.39	0.44	0.58	0.62	0.67	0.59
5	0.35	0.75	0.39	0.48	0.59	0.53	0.68	0.65
6	0.34	0.74	0.40	0.48	0.52	0.65	0.65	0.71
7	0.42	0.76	0.40	0.39	0.52	0.63	0.68	0.73
8	0.43	0.82	0.41	0.40	0.45	0.65	0.67	0.73
9	0.40	0.76	0.31	0.39	0.44	0.66	0.73	0.73
10	0.37	0.73	0.34	0.39	0.44	0.62	0.73	0.66
11	0.35	0.69	0.39	0.39	0.44	0.52	0.75	0.67
12	0.36	0.66	0.40	0.39	0.43	0.62	0.69	0.74

Tabela 7.3: Comprimento de Monin-Obukhov L em(m) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Todos os passos correspondem a 10 minutos.

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

Através das fórmulas (3.1) e (3.2) obtem-se a seguinte fórmula para w_* :

$$w_* = -u_* \left(\frac{z_i}{k.L} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (7.1)$$

Portanto, usando os valores da tabela (7.2) e (7.3) obtem-se um valor para w_* para diferentes passos de tempo (correspondentes a 10 minutos).

7.2 Índices Estatísticos

Os índices estatísticos servem para comparar os dados de concentração simulados no modelo utilizado com os dados observados no experimento de Copenhagen. Para tal comparação utilizou-se um programa desenvolvido por Hanna em 1989 [22], que é reconhecido pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera, como um procedimento padrão. Estes índices são definidos como:

1. Erro quadrático médio normalizado: informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos (C_p) e observadas (C_o). O seu valor ótimo deve ser 0. É definido como sendo

$$Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p}.$$

2. Coeficiente de correlação: descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. O seu valor ótimo deve ser 1. É definido como sendo

$$Cor = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p},$$

onde σ_o e σ_p são respectivamente o desvio padrão observado e o predito pelo modelo.

3. Fator de dois (*Fa2*): a razão entre C_p e C_o tem que estar entre 0.5 e 2.
4. Fração de Inclinação: informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero. É definido como sendo

$$Fb = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5 (\overline{C_o} + \overline{C_p})}.$$

5. Desvio fracional padrão: o valor ótimo é zero. É definido como sendo

$$Fs = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}.$$

7.3 Pontos de Quadratura

Neste trabalho, nos restringimos a valores de $M \leq 8$, para evitar o surgimento de 'overflow' e 'underflow'. Segundo Stroud-Secrest (1966) [56], o módulo da parte real das raízes do esquema de quadratura Gaussiana para a inversão da transformada de Laplace cresce conforme M aumenta (ordem de aproximação). Como a solução da equação de difusão-advecção apresentada no capítulo 5 apresenta termos exponenciais, é fácil perceber que a partir da solução numérica podem surgir para os argumentos positivos 'overflow' e para os negativos, 'underflow'. Vale a pena ressaltar que, os cálculos foram feitos em microcomputadores PC com dupla precisão (32 bits). A partir disso, podemos garantir que os resultados apresentados são de boa precisão sobre o ponto de vista estatístico.

A Figura (7.1) mostra a concentração C em função da distância x em $t = 1000$ s, para diferentes pontos de quadratura (2, 4, 6 e 8) e para $z = 1$ m, e 70 autovalores (na próxima seção será apresentada o porquê deste valor de autovalores). Para realização do mesmo foi utilizado o coeficiente de difusão em z proposto por Degrazia et al (1997) [19], o vento U descrito por uma lei de potência, W o valor médio zero, e os dados do Experimento 1 de Copenhagen. Pode-se notar que esta figura apresenta oscilações não-físicas para valores de $M = 4, 6, 8$. Já para $t = 5000$ s (Figura (7.2)) esta oscilação desaparece, porque a solução vai para o estacionário. No estacionário com qualquer número de pontos de quadratura não oscila mais, pois independe da inversão em t . Para evitar problemas de oscilações não-físicas na nossa solução, a partir de agora será adotado $M = 2$.

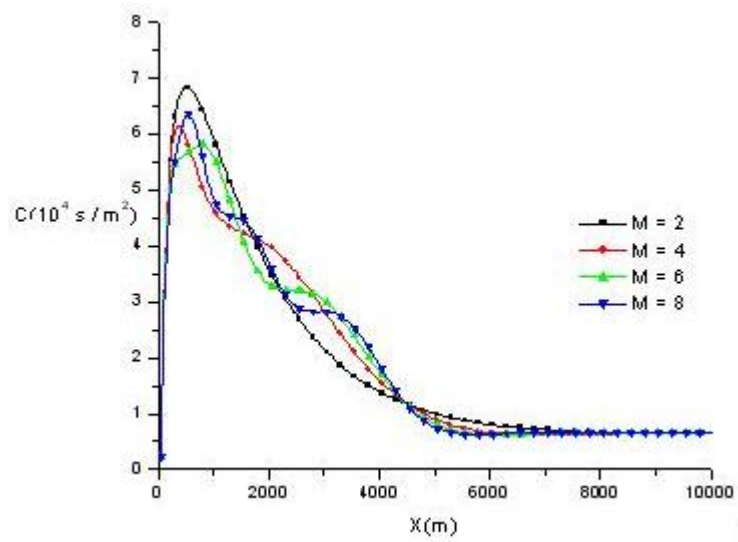


Figura 7.1: Concentração integrada lateralmente em função da distância para $t = 1000\text{s}$ e para diferentes pontos de quadratura Gaussiana.

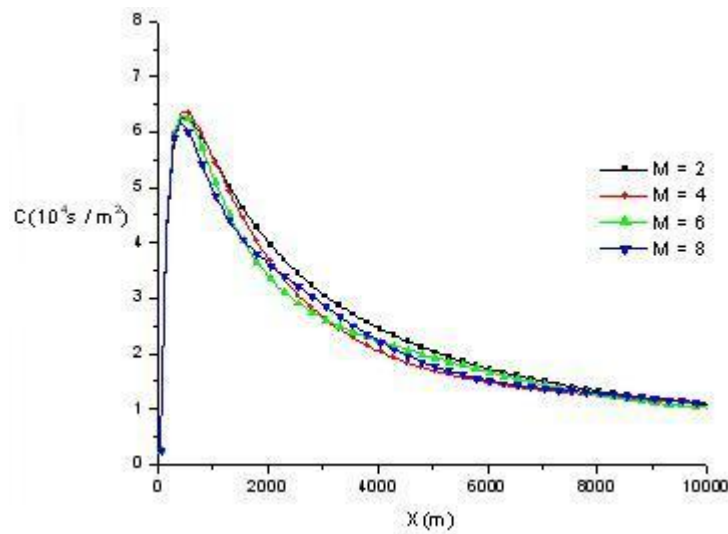


Figura 7.2: Concentração integrada lateralmente em função da distância para $t = 5000\text{s}$ e para diferentes pontos de quadratura Gaussiana.

7.4 Estabilidade Numérica

Para analisar a estabilidade numérica do método, foi feito os gráficos (Figuras (7.3) e (7.3)) da concentração C versus o número de autovalores N . Para realização dos mesmos foram utilizados o coeficiente de difusão em z proposto por Degrazia et al (1997) [19], o vento U descrito pela lei de potência, W o valor médio zero, e os dados do experimento 1 de Copenhagen para $x = 1900 \text{ m}$ (Figura(7.3)) e $x = 3700 \text{ m}$ (Figura(7.3)). Pode-se notar, para ambos os gráficos, que a variação da concentração em função dos autovalores é muito pequena a partir de $N = 70$, por isso, a partir de agora adota-se este valor.

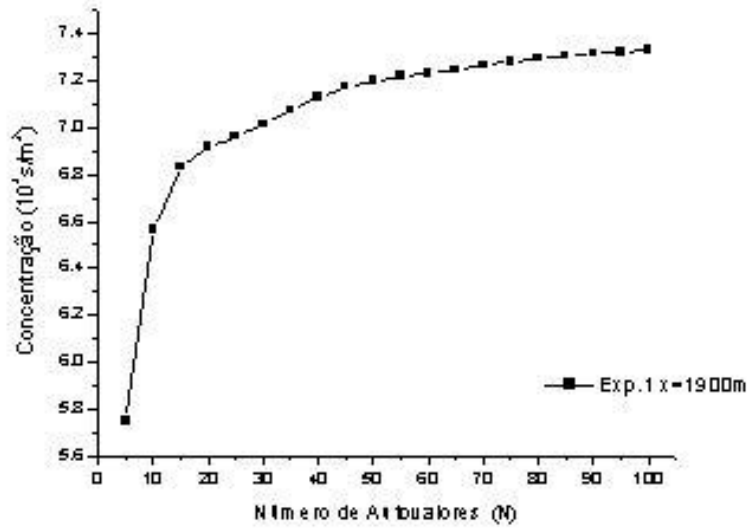


Figura 7.3: Estabilidade Numérica. Gráfico da Concentração Integrada Lateralmente pelo número de autovalores, para o Experimento 1 de Copenhagen para $x = 1900\text{ m}$.

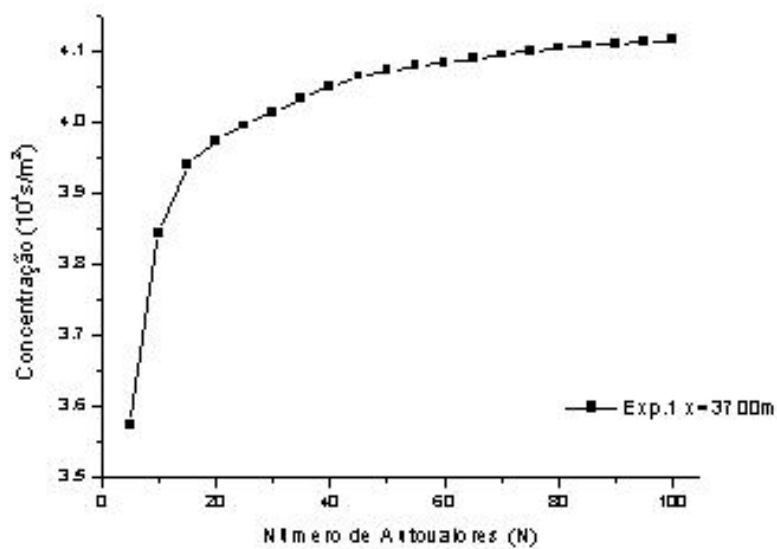


Figura 7.4: Estabilidade Numérica. Gráfico da Concentração Integrada Lateralmente pelo número de autovalores, para o Experimento 1 de Copenhagen para $x = 3700\text{ m}$.

8 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo apresentam-se os resultados numéricos e estatísticos obtidos nas simulações do modelo representado pela equação (5.23). Para a obtenção da concentração de poluentes utiliza-se os dados micrometeorológicos do experimento de Copenhague mostrados nas tabelas (7.1), (7.2) e (7.3), as parametrizações turbulentas e os perfis de vento mostrados no Capítulo 7.

Como os dados do Experimento de Copenhague foram coletados uma hora antes do início da amostragem, logo $t_o = 3600s$ e como os dados de L , u_* e w_* são de 10 em 10 minutos utiliza-se um passo de 600 segundos. A concentração obtida experimentalmente não é dependente do tempo, por isso foi feita uma média aritmética dos valores das concentrações encontrados de 10 em 10 minutos a partir de t_o . A concentração encontrada é normalizada pela taxa de emissão Q em diferentes distâncias da fonte.

Na Figura (8.1) pode-se observar o gráfico de espalhamento dos dados observados experimentalmente (Co) em comparação com os obtidos pelo modelo (Cp) para o experimento de Copenhague. Para este gráfico foi utilizado o perfil de vento U descrito pela lei de potência. Pode-se notar, tanto pela Figura (8.1) quanto pela tabela (8.1) os resultados foram mais próximos das concentrações experimentais quando utilizou-se o coeficiente para grandes tempos de difusão (Equação (6.14)).

Tabela 8.1: Concentrações integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando os coeficientes de difusão (6.14) e (6.27) e o vento descrito pela equação (6.31). As concentrações de poluentes são normalizadas dividindo pela intensidade Q .

Exp	Distância (m)	Concentração Experimental ($10^{-4}.s.m^{-2}$)	Concentração usando a Eq.(6.14) ($10^{-4}.s.m^{-2}$)	Concentração usando a Eq.(6.27) ($10^{-4}.s.m^{-2}$)
1	1900	6.48	7.26	6.77
	3700	2.31	4.09	3.69
2	2100	5.38	4.72	3.49
	4200	2.95	3.08	1.90
3	1900	8.20	9.06	8.57
	3700	6.22	5.73	4.98
	5400	4.30	4.22	3.72
4	4000	11.66	8.95	8.45
5	2100	6.72	9.01	7.91
	4200	5.84	6.71	4.83
	6100	4.97	5.20	3.81
7	2000	6.70	4.96	4.35
	4100	3.25	3.00	2.33
	5300	2.23	2.43	1.88
8	1900	4.16	4.91	4.72
	3600	2.02	3.29	3.01
	5300	1.52	2.61	2.42
9	2100	4.58	5.05	3.41
	4200	3.11	3.57	1.80
	6000	2.59	2.72	1.36

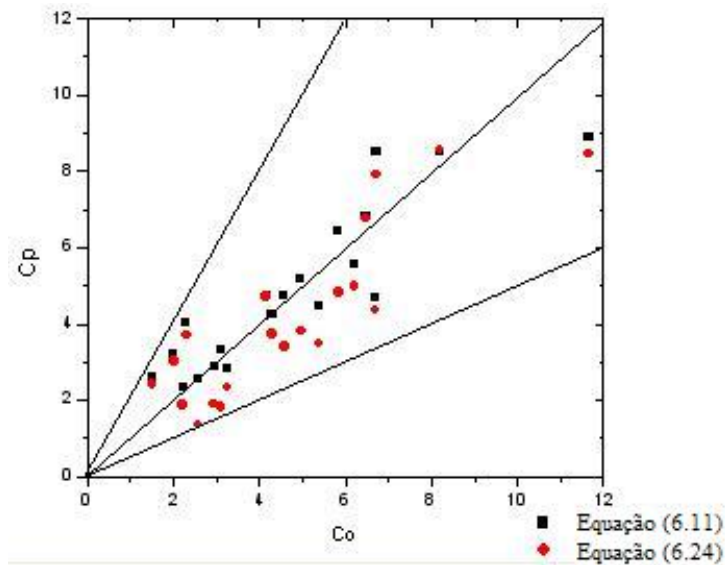


Figura 8.1: Gráfico de espalhamento de C_D em comparação com C_P , para o U como sendo uma lei de potência [39].

A partir da Figura (8.1) e da tabela (8.1), usando o perfil de vento logarítmico, novamente percebe-se que as concentrações integradas lateralmente utilizando o coeficiente para grandes tempos de difusão (Equação (6.14)) são mais próximas dos valores das concentrações obtidas experimentalmente .

Tabela 8.2: Concentrações integradas lateralmente para o Experimento de Copenhagen utilizando os coeficientes de difusão (6.14) e (6.27) e o vento descrito pela equação (6.28). As concentrações de poluentes são normalizadas dividindo pela intensidade Q .

Exp	Distância (m)	Concentração Experimental ($10^{-4}.s.m^{-2}$)	Concentração usando a Eq.(6.14) ($10^{-4}.s.m^{-2}$)	Concentração usando a Eq.(6.27) ($10^{-4}.s.m^{-2}$)
1	1900	6.48	6.42	6.00
	3700	2.31	3.98	3.46
2	2100	5.38	3.79	2.96
	4200	2.95	2.67	1.62
3	1900	8.20	7.57	7.37
	3700	6.22	5.18	4.48
	5400	4.30	3.92	3.37
4	4000	11.66	7.54	7.11
5	2100	6.72	7.19	6.81
	4200	5.84	5.82	4.24
	6100	4.97	4.67	3.34
7	2000	6.70	4.22	3.79
	4100	3.25	2.75	2.10
	5300	2.23	2.27	1.71
8	1900	4.16	4.06	3.99
	3600	2.02	2.89	2.62
	5300	1.52	2.28	2.07
9	2100	4.58	4.14	2.96
	4200	3.11	3.10	1.56
	6000	2.59	2.43	1.17

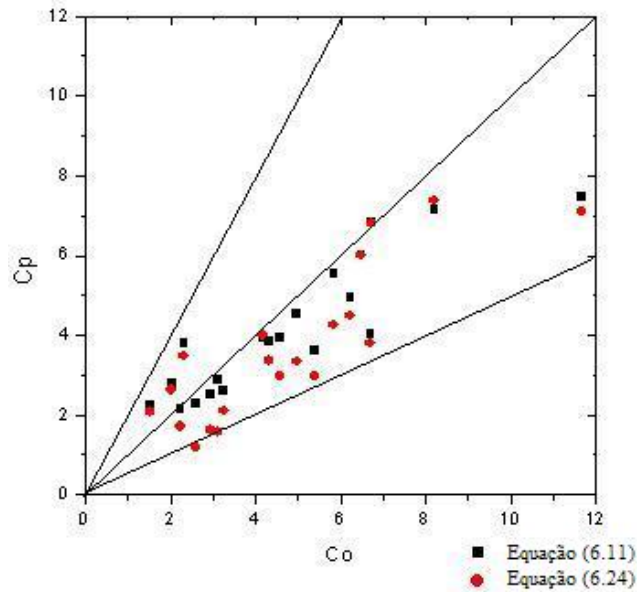


Figura 8.2: Concentração experimental versus concentração obtida através do modelo proposto utilizando o vento descrito pela equação (6.28).

Os dados estatísticos são apresentados na tabela (8.3). Os resultados obtidos pelo modelo podem ser considerados satisfatórios, pois, os valores de $NMSE$, FB e FS têm como valor ótimo o zero e todos os valores obtidos pelo modelo estão em torno deste valor. Para $FAT2$, espera-se um valor entre 0.5 e 2, e os resultados mostrados estão nessa faixa. Já para índice COR , os valores estão próximos de 1 (valor ótimo).

Tabela 8.3: Dados Estatísticos.

K_z	U_z	$NMSE$	COR	$FAT2$	FB	FS
Equação (6.14)	Equação (6.31)	0.05	0.89	1.00	-0.06	0.14
Equação (6.27)	Equação (6.31)	0.09	0.87	1.00	0.13	0.12
Equação (6.14)	Equação (6.28)	0.08	0.89	1.00	0.09	0.35
Equação (6.27)	Equação (6.28)	0.17	0.86	0.95	0.27	0.27

8.1 Análise da influência da velocidade vertical no comportamento da pluma

Para analisar a influência da velocidade vertical no comportamento da pluma, primeiramente utilizamos $Hs = 0.5z_i$ e $W = 0$ como é mostrado na Figura (8.3) em termos das variáveis adimensionais $X = \frac{x.w^*}{U.z_i}$ e $Z = \frac{z}{z_i}$. Como pode-se perceber, a pluma tem um simetria em relação a Z . Já nas Figuras (8.4) e (8.5) esta simetria não ocorre mais, devido à influência da velocidade vertical.

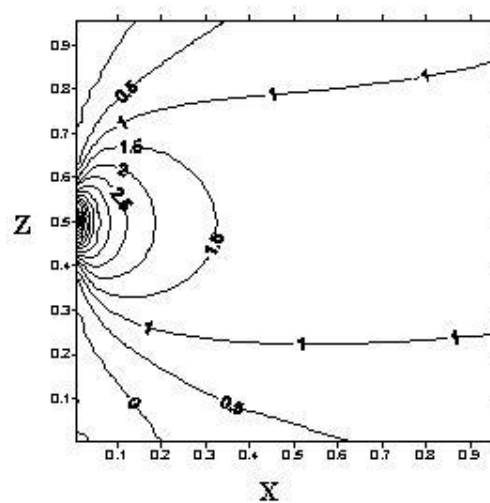


Figura 8.3: Concentração de poluentes em termos das variáveis adimensionais X e Z . Utilizando $W = 0$ m/s.

Apesar de considerar velocidades verticais constantes, pode-se verificar que quando a velocidade vertical é positiva (Figura (8.4)), a pluma tem um comportamento ascendente; já quando a velocidade é negativa (Figura (8.5)), a pluma tem um comportamento descendente. Velocidades verticais mais realísticas serão apresentadas na próxima seção.

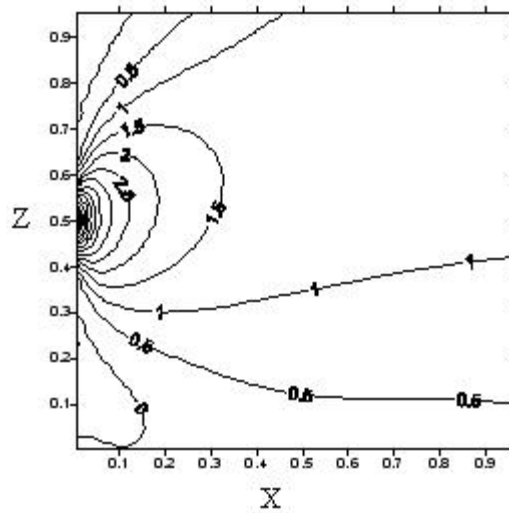


Figura 8.4: Concentração de poluentes em termos das variáveis adimensionais X e Z . Utilizando $W = 0.5 \text{ m/s}$.

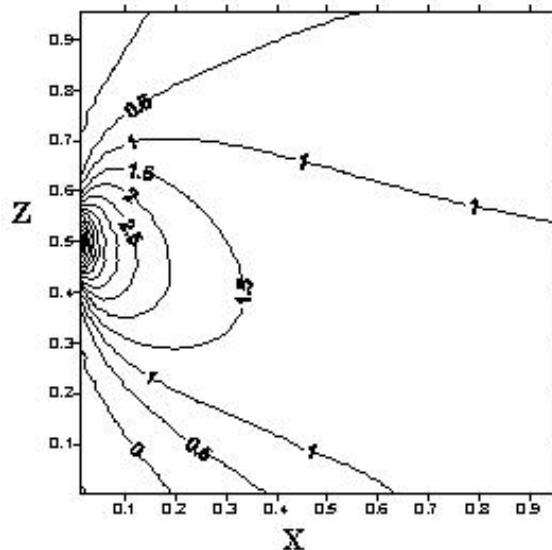


Figura 8.5: Concentração de poluentes em termos das variáveis adimensionais X e Z . Utilizando $W = -0.5 \text{ m/s}$.

8.2 Velocidade Vertical e Horizontal geradas pelo LES

Para simular um problema mais realístico na dispersão de poluentes na atmosfera é utilizado um experimento de dispersão no regime da camada turbulenta convectiva, com velocidades de vento geradas pelo Large Eddy Simulation (LES). Seguindo o trabalho de Moeng e Sullivan (1994) [31], foi gerado uma CLP com fluxo flutuante-dominante negligenciando o efeito fechado de cisalhamento no solo. Para que se possa colocar os dados gerados pelo LES, já que são dados discretos, foi feita uma interpolação polinomial do campo de vento ($U(x, z)$ and $W(x, z)$) na variável z e a média em x . A interpolação utilizada aqui foi a de mínimos quadrados de nona ordem.

Os cálculos foram gerados num domínio retangular combinado que acomoda muitos updrafts num dado tempo. A dimensão do quadrado é de $5 \times 5 \text{ Km}$ na direção horizontal e 2 Km na direção vertical. A resolução é 64 pontos da grade em cada três coordenadas. As simulações começaram a partir de fluxo laminar, com vento geotrópico constante durante todo o domínio numérico. Para ter uma forte camada de inversão acima da CLP simulada, o perfil da temperatura potencial

virtual média inicial é 300 K abaixo da altura da CLP inicial, com um aumento de 8 K através de 6 níveis de z num raio de decaimento de $3K/Km$ acima disso. Os parâmetros externos, como o domínio, tamanho da grade, vento geotrópico, superfície do fluxo de calor e altura da camada inicial de inversão são mostradas na tabela (8.4). Na tabela (8.5), mostra-se os parâmetros micrometeorológicos correspondentes. Estes representam o tempo inicial.

Tabela 8.4: Parâmetros externos gerados pelo LES

Tamanho do Domínio (L_x, L_y, L_z) (Km)	Vento Geotrópico (U, V) (m/s)	Fluxo de Calor na Superfície Q^* ($m.s - 1K$)	Altura da Inversão Inicial (z_i) ₀ (m)
(5, 5, 2)	(10, 0)	0.24	1000

Tabela 8.5: Parâmetros micrometeorológicos a partir da simulação do LES

U (m/s)	u_* (m/s)	L (m)	w_* (m/s)	z_i (m)
10	0.65	-12	2.1	1100

Foi obtida a condição quase-estacionária rodando o modelo LES para 4000 espaços de tempo (mais de quatro horas reais de tempo de simulação). A Figura (8.6) mostra a distribuição da concentração de poluentes integrada obtida para os parâmetros acima.

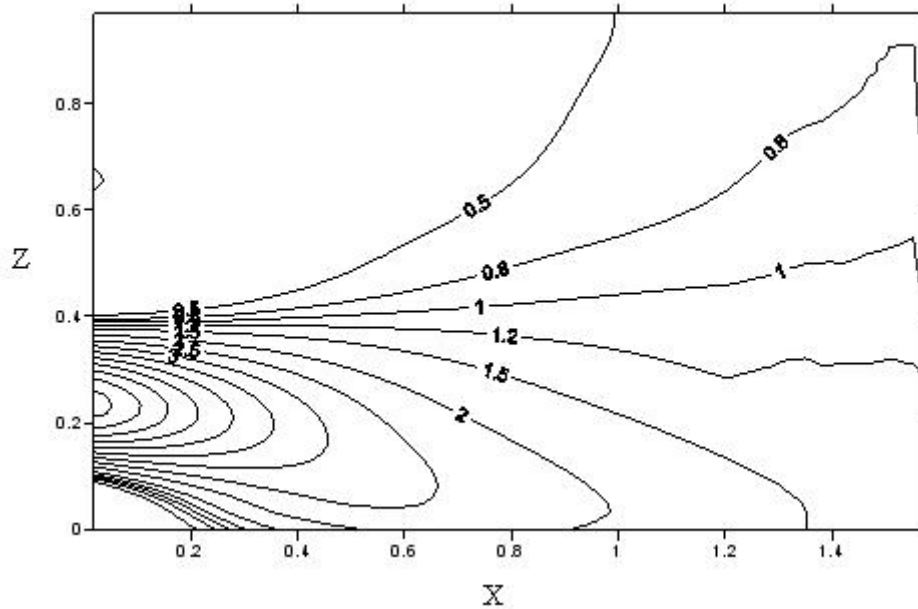


Figura 8.6: Distribuição da concentração de poluentes integrada usando os perfis de vento gerados pelo LES

Para validar este resultado pode-se comparar com o modelo numérico de Lamb (1978) ([27]) (Figura (8.8)) e com o modelo laboratorial de Willis e Deardorff (1978) ([64]) (Figura (8.7)). Na figura (8.6) nota-se um intervalo menor no eixo do x do que é mostrado nas figuras encontradas na literatura, isto ocorre porque o tamanho da grade utilizada foi menor (5 Km , 5 Km) do que a utilizada pelos outros modelos. Pode-se notar que a curva de concentração igual a 2 corta o eixo do x tanto na Figura (8.6) quanto na Figura (8.7) próximo de $X = 1$, e as curvas de concentração igual a 1.5 e 1.0 apresentam comportamento semelhante com os gráficos apresentados nas figuras (8.7) e (8.8). Assim, pode-se afirmar que o gráfico gerado pelo modelo apresentado é satisfatório.

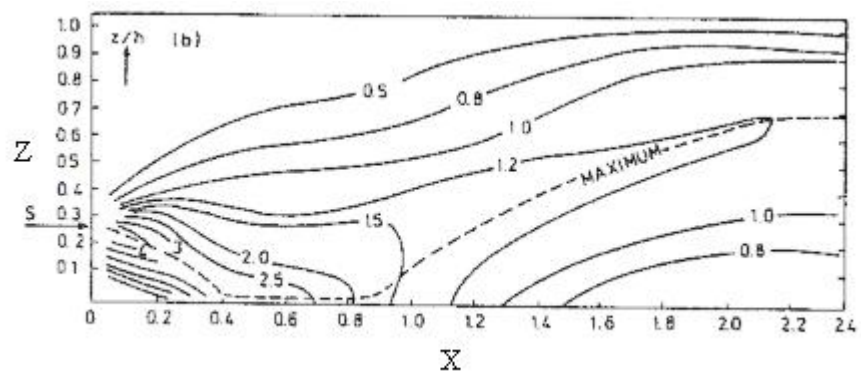


Figura 8.7: Distribuição da concentração de poluentes obtida por Willis e Deardorff (1978) ([64])

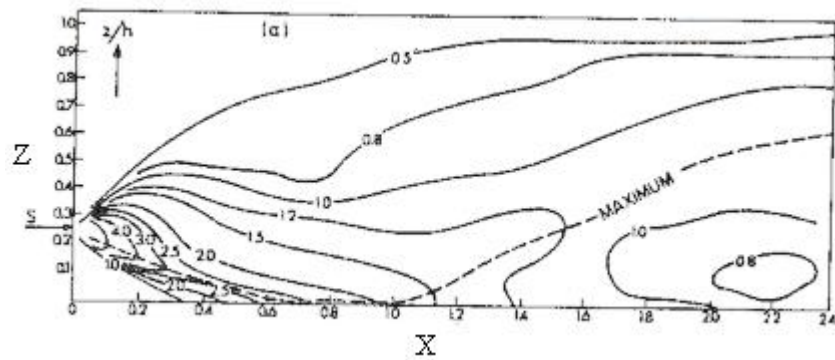


Figura 8.8: Distribuição da concentração de poluentes obtida por Lamb (1978) ([27])

9 CONCLUSÃO

Inicia-se a análise do método proposto, destacando que a solução encontrada é analítica, no sentido que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução exceto da inversão numérica de Laplace e erros de arredondamento. Mais do que isso, tem-se que dar atenção que os resultados alcançados pelo esquema de quadratura Gaussiana são exatos quando a função transformada é um polinômio de grau $2M - 1$. Além disso, é sabido que funções analíticas podem ser aproximadas por polinômios, com a característica principal: quanto maior o grau do polinômio, melhor a aproximação. A partir desses resultados é possível controlar a precisão dos resultados da GILTT pelo crescimento do grau de polinômio, ou seja, aumentando o M . Sendo ciente que com o aumento do M pode surgir os efeitos de overflow e underflow. Acredita-se que isso pode ser eliminado usando uma aritmética extensiva, ou seja, aumentando o número de dígitos significativos (32, 64, 128, ...).

Para entender melhor as vantagens do método de GILTT em comparação com um método numérico, faz-se uso do teorema de equivalência de LAX [26] declarando que a convergência de esquemas numéricos só ocorre se a estabilidade e a consistência existirem. Antes de tudo, a condição de estabilidade impõe uma restrição do método numérico em relação a questão de escolha do passo de tempo e das variáveis e a integração é feita por um procedimento a cada passo de tempo. Aqui aparece a vantagem da aproximação da GILTT. Devido a solução ser analítica, a concentração pode ser avaliada em qualquer tempo. Como consequência, este método demanda menos esforços computacionais e a consistência pode ser mostrada não pela análise numérica, mas pela comparação de dados experimentais.

Os resultados obtidos usando os perfis de vento gerados pelo LES são razoavelmente bons, pois apresentam comportamento similar com o encontrado na literatura. Estes resultados podem ser melhorados usando uma resolução maior que 64 pontos da grade em cada três coordenadas (como 96,128...). Vale lembrar que a interpolação usada foi polinomial, por isso espera-se melhores resultados usando

outras funções interpoladoras que melhor representam os valores numéricos gerados pelo LES.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ANFOSSI, D. Dispersão lagrangeana na camada limite planetária. *Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária* (2005), 81–102.
- [2] BERKOWICZ, R. R., O. 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).
- [3] BERLYAND, M. *Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere*. translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA, 1975.
- [4] 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.
- [5] BUSKE, D., MOREIRA, D. M., VILHENA, M. T. B. M., AND SEGATTO, C. F. Solução da equação de difusão-advecção dependente do tempo bidimensional pelo método gillt para simulação de contaminantes na camada limite planetária. *Revista Ciência e Natura* (2005), 281–284.
- [6] BUSKE, D., WORTMANN, S., AND VILHENA, M. T. B. M. Solução analítica para a dispersão de poluentes na camada limite planetária pelo método gitt. *Revista Ciência e Natura* (2003), 83–86.
- [7] CARVALHO, J. *Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva*. Dissertação (mestrado em meteorologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.

- [8] CATALDI, M., MARGALHO, M., VELLOSO, M., AND PIMENTEL, L. Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva. *XI Congresso Brasileiro de Meteorologia 1* (2000), 2890–2899.
- [9] CAUGHEY, S. J., AND PALMER, S. G. Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer. *Qurt. J. Roy. Meteor. Soc.* *105* (1979), 811–827.
- [10] CHAMPAGNE, F. H., FRIEHE, C. A., LARVE, J. C., AND WYNGAARD, J. C. Flux measurements, flux estimation techniques, and fine scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land. *J. Atmos. Society* *34* (1977), 515–520.
- [11] 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.
- [12] COTTA, R. *Integral transforms in computational heat and fluid flow*. CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [13] COTTA, R., AND MIKHAYLOV, M. *Heat conduction lumped analysis, integral transforms, symbolic computation*. John Wiley & Sons, Banffins Lane, 1997.
- [14] DEARDORFF, J. W. Theoretical expression for the counter-gradient vertical heat flux. *J. Geophys. Res.* *77* (1972), 5900–5904.
- [15] 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.
- [16] DEGRAZIA, G. A., AND MORAES, O. L. L. Uma revisão da teoria estatística da difusão turbulenta. *Ciência e Natura* *14* (1992), 65–70.
- [17] DEGRAZIA, G. A., MOREIRA, D. M., CAMPOS, C. R. J., CARVALHO, J. C., AND VILHENA, M. T. B. M. Comparison between an integral

- and algebraic formulation for the eddy diffusivity using the copenhagen experimental dataset. *Il Nuovo Cimento* 25, 2 (2002), 207–218.
- [18] DEGRAZIA, G. A., MOREIRA, D. M., AND VILHENA, M. T. B. M. 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] GARRAT, J. R. *The atmospheric boundary layer*. Cambridge University Press, 1992.
- [22] HANNA, S. R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment* 23 (1989), 1385–1395.
- [23] KAIMAL, J. C., AND WYNGAARD, J. C. Turbulence structure in the convective boundary layer. *J. Atmos. Sci.* 33 (1976), 2152–2169.
- [24] 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.
- [25] KRYLOV, V. I., AND SKOBLYA, N. S. on numerical inversion of the laplace transform. *Inzh.-Fiz. Zh.* 4 (1961), 85–101.
- [26] KYTHE, P. K., PURI, P., AND SCHÄFERKOTTER, M. *Partial differential equation and mathematics*. CRC Press, 1997.

- [27] 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.
- [28] LAMB, R. G. Diffusion in the convective boudary layer. *Atmospheric Turbulence and air Pollution Modelling*, F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, Eds., Reidel (1982), 159–229.
- [29] LIN, J. S., AND HILDEMANN, L. M. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. *Atmos. Environ.* 31 (1997), 59–71.
- [30] MIKHAYLOV, M., AND ÖZISIK. *Ünified analysis and solutions of heat and mass difusion*. John Wiley & Sons, New York, 1984.
- [31] MOENG, C. H., AND SULLIVAN, P. P. A comparison of shear and buoyancy driven planetary boundary layer flows. *J.Atm.Sci.* 51 (1994), 999–1022.
- [32] MOREIRA, D. M. *Modelos multidimensionais analíticos de dispersão de contaminantes na atmosfera: coeficientes de disusão dependentes da distância da fonte*. Dissertação de mestrado(mestrado em física), UFSM, Santa Maria, 1996.
- [33] 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.
- [34] MOURA, A. B. D. *Modelos multidimensionais analíticos de dispersão de contaminantes na atmosfera: coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte*. Tese (doutorado em engenharia mecânica), UFRGS, Porto Alegre, 1999.

- [35] NICKOLA, P. W. *The Hanford 67 series: a volume of atmospheric field diffusion measurements*. Pnl-2433 Battelle, Pacific Northwest Laboratories, Richland, WA (USA), 1977.
- [36] 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.
- [37] 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.
- [38] 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.
- [39] PANOFSKY, H. A., AND DUTTON, J. A. *Atmospheric Turbulence*, 397 ed. Wiley-Interscience, J. Wiley and Sons, 1984.
- [40] PASQUILL, F., AND SMITH, F. B. *Atmospheric diffusion*. Ellis Howood Ltd., Chichester, 1983.
- [41] PAULSEN, C. A. The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer. *J. Appl. Met.* 9 (1975), 857–861.
- [42] PIESSENS, R. *Gaussian quadrature formulas for the numerical integration of the Bromwich integral and the inversion of Laplace transform*. Inst. Applied Math., University of Louvain, 1969.
- [43] 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.
- [44] RIBEIRO, M., CATALDI, M., GUERREIRO, J., AND PIMENTEL, L. Estudo de poluentes na atmosfera via transformação integral. *XI Congresso Brasileiro de Meteorologia 1* (2000), 2969–2975.
- [45] RIBEIRO, M., FERREIRA, M., GUERREIRO, J., AND PIMENTEL, L. Efeito do mecanismo de reação química sobre o transporte de contaminantes na região da camada limite atmosférica. *XII Congresso Brasileiro de Meteorologia* (2002).
- [46] ROBERTS, O. F. T. The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. *Proc. Roy. Soc.* 104 (1923), 640–648.
- [47] ROUNDS, W. Solutions of the two-dimensional diffusion equation. *Trans. Am. Geophys. Union* 36 (1955), 395–405.
- [48] SALZER, H. E. Orthogonal polynomials arising in the numerical evaluation of inverse laplace transform. *M. T. A. C.* 9 (1955), 164–177.
- [49] SALZER, H. E. Additional formulas and tables for orthogonal polynomials originating from inversion integrals. *Math. Phys* 9 (1961), 72–86.
- [50] 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.
- [51] SEGATTO, C. F., AND VILHENA, M. T. B. M. The state of art of the lts_N method. *Proceedings of Mathematics and Computational Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications* (1999), 1618–1631.
- [52] SMITH, F. The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere. *J. Fluid Mech.* 2 (1957), 49–76.

- [53] SORBJAN, Z. *Structure of the atmospheric boundary layer*. Prentice Hall, New Jersey, pp. 317, 1989.
- [54] STORCH, R., GUERRERO, J. S. P., AND PIMENTEL, L. C. G. Atmospheric dispersion simulation via generalizes integral transform technique and sign-count method. *Revista Ciência e Natura* (2005), 277–280.
- [55] STORCH, R., AND PIMENTEL, L. C. G. Desenvolvimento de um modelo euleriano de dispersão de poluentes atmosféricos via gitt e modelos algébricos para os fluxos turbulentos. *Revista Ciência e Natura* (2003), 103–106.
- [56] STROUD, A., AND SECREST, D. *Gaussian Quadrature Formulas*. Prentice Hall, Englenwood Cliffs, N.J., 1966.
- [57] STULL, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (Olanda), 1988.
- [58] TAYLOR, G. I. Diffusion by continuos movements. *Procedings London Mathematical Society* 20, Series 2 (1921), 196–211.
- [59] VAN ULDEN, A. P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. *Atmos. Environ.* 12 (1978), 2125–2129.
- [60] 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.
- [61] VELLOSO, M., BARBARIOLI, A., GUERRERO, J., AND PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo computacional para estudo do efeito do mecanismo de deposição sobre a dispersão de poluentes atmosféricos. *Revista Ciência e Natura* (2003), 25–28.
- [62] WANDEL, C. F., AND HOFOED-HANSEN, O. On the eulerian-lagrangian transform in the statistical theory of turbulence. *J. Geophys. Res.* 67 (1962), 3089–3093.

- [63] WEIL, J. C., AND BROWER, R. P. An update gaussian plume model for tall stacks. *JAPCA* 34, 1984, 818–827.
- [64] WILLIS, G. E., AND DEARDORFF, J. W. A laboratory model of the unstable planetary boundary layer. *J. Atmos. Society* 31 (1974), 1297–1307.
- [65] WORTMANN, S. *Formulação semi-analítica para equação transformada resultante da aplicação de GITT em problemas difusivos-advectivos*. Tese (doutorado em engenharia mecânica), UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [66] WORTMANN, S., MOURA, A., AND M.VILHENA, M. T. B. Solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável. *Anais ENCIT* (2000).
- [67] WORTMANN, S., VILHENA, M. T. B. M., MOREIRA, D. M., AND BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the pbl. *Atmospheric Environment* 39 (2005), 2171–2178.
- [68] YEH, G., AND HUANG, C. Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere. *Boun. Layer Meteor.* 9 (1975), 381–390.
- [69] ÖZISIK, M. N. *Heat Conduction*. John Wiley, New York, 1980.