

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

**SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES ATRAVÉS DA SOLUÇÃO
DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRIDIMENSIONAL
TRANSIENTE PELA TÉCNICA GIADMT**

por

Camila Pinto da Costa

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, dezembro de 2007

**SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES ATRAVÉS DA SOLUÇÃO
DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRIDIMENSIONAL
TRANSIENTE PELA TÉCNICA GIADMT**

por

Camila Pinto da Costa

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena (UFRGS)

Co-Orientadores: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira (UFPEL/Unipampa)

Dr. Tiziano Tirabassi(CNR-ISAC/Itália)

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Carlos Alberto Diogo Soares Borrego (Universidade de Aveiro/Portugal)

Prof. Dr. Sérgio Bogado Leite (CNEN/RJ)

Prof. Dr. Paulo Schneider (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Flávio José Lorini

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 10 de dezembro de 2007

Para meus pais, meus irmãos e minhas avós que ainda não entendem porque eu estudo tanto, afinal não é difícil de entender que dois mais dois são quatro.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em especial à minha família, principalmente aos meus pais Cezar e Marinice que sempre me incentivaram me apoiaram e sempre respeitaram minhas decisões não somente durante o curso de doutorado mas no decorrer de toda a minha vida.

Queria agradecer também meus irmãos Cristiano e Carina, pelo carinho manifestado durante todo o curso e pela compreensão à minha ausência.

Agradeço também aos meus avôs pelo entusiasmo demonstrado nas minhas evoluções que, para eles, eram vistas como conquistas.

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

Agradeço ao doutor Tiziano Tirabassi pelos seus ensinamentos, pelo o “fazer” pesquisa, sua contribuição foi decisiva para a obtenção dos resultados deste trabalho. Agradeço-o também por ter me recebido cordialmente na Itália durante o meu estágio e principalmente pela sua amizade!

Agradeço ao Prof. Dr. Davidson Martins Moreira pela co-orientação prestada.

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

Agradeço ao CNR pela oportunidade.

Agradeço ao CNPq e à CAPES pelo suporte financeiro.

Agradeço sobretudo aos meus amigos e colegas que sempre estiveram ao meu lado mesmo recebendo pouca atenção, pela paciência e palavras de incentivo e apoio.

Agradeço a todos que de alguma forma contribuíram para a realização e conclusão deste trabalho.

Agradeço a Deus.

RESUMO

SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES ATRAVÉS DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO TRIDIMENSIONAL TRANSIENTE PELA TÉCNICA **GIADMT**

Neste trabalho é apresentada uma solução para a equação de difusão-advecção tridimensional transiente para simular a dispersão de poluentes na atmosfera. A novidade deste trabalho, baseia-se no caráter analítico da solução, não disponível anteriormente na literatura. Para atingir este objetivo a equação de difusão-advecção tridimensional é resolvida combinando o método **ADMM** (*Advection Diffusion Multilayer Method*) e a técnica **GITT** (*Generalized Integral Transform Technique*). O método GITT é um método híbrido que resolve uma ampla classe de problemas diretos e inversos principalmente na área de Transferência de Calor e Mecânica dos Flúidos. No presente trabalho, o problema transformado é resolvido pelo método ADMM, uma solução analítica da forma integral baseada na discretização da CLP em subcamadas onde a equação de difusão-advecção é resolvida pela técnica da transformada de Laplace. Esse novo método foi denominado **GIADMT** (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*).

Autor: Camila Pinto da Costa

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena (UFRGS)

Co-Orientadores: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira (UFPEL/Unipampa)

Dr. Tiziano Tirabassi(CNR-ISAC/Itália)

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, dezembro de 2007.

ABSTRACT

POLLUTANTS DISPERSION SIMULATION BY THE SOLUTION OF THE THREE-DIMENSIONAL ADVECTION-DIFFUSION EQUATION BY GIADMT TECHNIQUE

In this work, is presented a solution for the nonstationary three-dimensional advection-diffusion equation in order to simulate pollutant dispersion in atmosphere. The novelty of this work relies on the analytical character of the solution, not available before in the literature. To accomplish this objective the three-dimensional advection-diffusion equation is solved combining the **ADMM** (Advection Diffusion Multilayer Method) method and **GITT** (Generalized Integral Transform Technique) technique. The **GITT** (Generalized Integral Transform Technique) is a hybrid method that solves a wide class of direct and inverse problems, mainly in the area of Heat Transfer and Fluid Mechanics. In this work, the transformed problem is solved by the **ADMM** (Advection-Diffusion Multilayer Model) method, an analytical integral solution based on a discretization of the PBL in sub-layers where the advection-diffusion equation is solved by the Laplace transform technique. That new method was denominated **GIADMT** (Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique).

Author: Camila Pinto da Costa

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena (UFRGS)

Co-Orientadores: Prof. Dr. Davidson Martins Moreira (UFPEL/Unipampa)

Dr. Tiziano Tirabassi(CNR-ISAC/Itália)

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, dezembro de 2007.

ÍNDICE

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica	7
3	Descrição do método GIADMT	15
3.1	Problema de Fechamento	17
3.2	O Modelo Matemático	18
3.3	Solução via GITT	19
3.4	Técnica ADMM	23
3.4.1	Solução homogênea	28
3.4.2	Solução Particular	28
3.4.3	Solução geral	30
3.5	Inversão da Solução: <i>Quadratura de Gauss</i>	34
3.6	Inversão pelo algoritmo de <i>Talbot</i>	36
4	Fechamento Não-Fickiano	38
4.1	Solução do problema não-Fickiano via GITT	41
4.2	Solução do problema não-Fickiano transformado via ADMM	44
4.3	Inversão da Solução com Fechamento Não-local	49
5	Solução analítica tridimensional transiente para a dispersão de poluentes	52
5.1	Inversão da Solução	58
6	Tratamento não-fickiano para o caso tridimensional dependente do tempo	61
6.1	Inversão da Solução	66
7	Ascensão da pluma (<i>plume rise</i>)	69

8	Parametrização da turbulência	73
8.1	Coeficientes de difusão turbulentos	73
8.2	Perfil do vento	76
9	Descrição dos experimentos e dos índices estatísticos	78
9.1	Dados experimentais	79
9.1.1	O Experimento de Copenhagen	80
9.1.2	O Experimento de Kinkaid.....	84
9.2	Índices Estatísticos	90
10	Resultados Numéricos	92
10.1	Solução tridimensional fechamento local	92
10.2	Solução tridimensional fechamento não-local	101
10.3	Solução tridimensional transiente com fechamento local	106
10.4	Solução tridimensional transiente fechamento não-local.....	109
10.5	Comentários gerais	113
11	Conclusão	115
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	117
	APÊNDICES	133
I	Camada Limite Planetária	133
I.1	Estrutura da Camada Limite Convectiva	136

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

$ADMM$	Advection Diffusion Multilayer Method
A_v	pesos da <i>Quadratura de Gauss</i>
C	concentração de um contaminante passivo (g/m^3)
\bar{c}	concentração média de um contaminante passivo (g/m^3)
c'	parte turbulenta da concentração
$\bar{c}_j(x, z)$	variável dependente do problema difusivo
$c(x, y, z)$	variável dependente original
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CO	Monóxido de Carbono
CO_2	Gás carbônico
Cor	coeficiente de correlação
c^y	concentração integrada lateralmente ($10^{-4} sm^{-2}$)
EIA	Estudos de Impactos Ambientais
EDP	equação diferencial parcial
EDO	equação diferencial ordinária
F	força de empuxo
Fa_2	Fator de 2
Fb	<i>Fractional Bias</i>
$(f_m^*)_i$	freqüência adimensional do pico espectral
$(f_m)_v$	pico de onda lateral
g	aceleração da gravidade (m/s^2)
$g(z, \xi)$	função de <i>Green</i>
$GITT$	Generalized Integral Transform Technique
$GILTT$	Generalized Integral Laplace Transform Technique
$GIADMT$	Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique

H	função de Heaviside
h	altura da Camada Limite Convectiva (m)
h_e	altura efetiva da fonte (m)
H_s	altura da fonte (m)
k	constante de von Kármán
K_α	coeficiente difusivo onde α indica a direção x , y , ou z (m^2/s)
K_x	coeficiente de difusão na direção x (m^2/s)
K_y	coeficiente de difusão na direção y (m^2/s)
K_z	coeficiente de difusão na direção z (m^2/s)
L	comprimento de Monin-Obukov (m)
L_y	ponto do eixo y suficientemente grande onde o fluxo é nulo (m)
N	número de subcamadas
\hat{n}	frequência
N_a	número de autovalores
N_j	Norma
$Nmse$	erro quadrático médio normalizado
N_p	número de inversões da <i>Quadratura de Gauss</i>
NO	Óxido de nitrogênio
n^*	região de emissão
P_k	raízes da <i>Quadratura de Gauss</i>
P_v	raízes da <i>Quadratura de Gauss</i>
Q	intensidade da fonte (g/s)
q_v	função estabilidade
r_i	raio da fonte (m)
S	termo fonte
SF_6	hexafluoreto de enxofre
S_k	assimetria (<i>skewness</i>)
t	variável temporal (s)
T_a	temperatura ambiente (k)
T_i	temperatura da pluma na saída da chaminé (k)
T_{L_w}	escala de tempo Lagrangeana vertical (s)

u	velocidade do vento (m/s)
U	velocidade do vento na direção x (m/s)
\bar{u}	velocidade média do vento orientado na direção x (m/s)
u'	parte turbulenta do vento na direção x (m/s)
u_*	velocidade de fricção (m/s)
$\overline{u'c'}$	fluxo turbulento na direção longitudinal $g/(sm^2)$
V	velocidade do vento na direção y (m/s)
\bar{v}	velocidade média do vento orientado na direção y (m/s)
v'	parte turbulenta do vento na direção y (m/s)
$\overline{v'c'}$	fluxo turbulento na direção lateral $g/(sm^2)$
V_i	velocidade vertical da pluma na saída da chaminé (m/s)
W	velocidade do vento na direção z (m/s)
\bar{w}	velocidade média do vento orientado na direção z (m/s)
w'	parte turbulenta do vento na direção z g/m^3
$\overline{w'c'}$	fluxo turbulento na direção vertical $g/(sm^2)$
w_d	velocidade média do <i>downdraft</i> (m/s)
w_k	pesos da <i>Quadratura de Gauss</i>
w_*	velocidade de convectiva (m/s)
x	distância longitudinal da fonte (m)
X	distância longitudinal da fonte adimensional
y	distância lateral da fonte (m)
y_0	posição da fonte no eixo y (m)
z	altura acima da superfície (m)
z_i	altura da camada limite convectiva (m)
z_0	comprimento da rugosidade (m)

2. Caracteres Gregos

α	indica a direção x , y , ou z
β	representa os termos adicionais
δ	função delta de Dirac
Δh	ascensão da pluma
Δz	discretização da altura (m)
γ	representa o termo contra-gradiente
λ ou λ_j	autovalor do problema de Sturm-Liouville
$(\lambda_m)_i$	comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical turbulento (m)
φ	taxa de dissipação molecular adimensional associada a produção da pluma
ψ	dissipação molecular da velocidade turbulenta
ψ_j	autofunção do problema de Sturm-Liouville
ψ_ϵ	função da taxa de dissipação molecular adimensional
Ψ_m	função estabilidade
σ_v	desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal
σ_w	desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical
τ	tempo de relaxação (s)

ÍNDICE DE FIGURAS

3.1	Desenho esquemático do modelo	24
3.2	Aproximação <i>stepwise</i> para o coeficiente de difusão vertical adimensional.	25
4.1	(a) efeito local na dispersão e (b) efeito não-local na dispersão	40
7.1	A altura efetiva da pluma h_e (elevação do centro da pluma relativa ao nível do solo) resulta da soma da altura da fonte H_s e da ascensão da pluma Δh :	70
9.1	Experimento de Copenhague	80
10.1	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhague dos dados observacionais de concentração integrada lateralmente (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo integrada lateralmente(Cp). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}^y/Q)	93
10.2	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhague dos dados observacionais de concentração máxima (Co) em comparação com os resultados de concentração máxima do modelo (Cp). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q)	93
10.3	Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo (ng/m^3). Experimento 8 de Copenhague.	95
10.4	Convergência numérica da solução proposta para a concentração com o aumento dos números dos autovalores e da discretização vertical que considera o esquema da Quadratura Gaussiana com pontos da quadratura $N_p = 2, 8, 20$ e distâncias da fonte de: (a) $x = 500m$ e (b) $x = 4000m$. Experimento 8 de Copenhague.	96

10.5	Convergência numérica da solução proposta para a concentração com o aumento dos números dos autovalores e da discretização vertical que considera o algoritmo de Talbot com número de termos no somatório $M^* = 5, 50, 100$ e distâncias da fonte de: (a) $x = 500m$ e (b) $x = 4000m$. Experimento 8 de Copenhagen.	97
10.6	Perfil vertical da concentração a nível do solo normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) para o experiento 8 de Copenhagen com $\Delta z = 5m$ e $\Delta z = 2m$, utilizando os esquemas numéricos de inversão: a) <i>Quadratura de Gauss</i> , b) <i>Algoritmo de Talbot</i>	100
10.7	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração máxima (C_o) em comparação com os resultados de concentração máxima do modelo com fechamento não-local (C_p). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q)	102
10.8	Gráfico de espalhamento para o experimento de Kinkaid dos dados observacionais de concentração máxima (C_o) em comparação com os resultados de concentração máxima do modelo com fechamento não-local (C_p). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q)	102
10.9	Concentração integrada lateralmente c^y adimensional na superfície como função da distancia adimensional próximo a fonte $z/z_i = 0.07$ na CLP comparados com dados do experimento de tanque de Willis e Deardorff.	104
10.10	Concentração integrada lateralmente c^y adimensional como função da altura adimensional para as quatro distâncias adimensionais X na direção do vento, comparados com dados do experimento de tanque de Willis e Deardorff.....	105
10.11	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q)	107
10.12	Evolução temporal da concentração para diferentes distâncias da fonte, para diversos experimentos de Copenhagen.	108

10.13	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo não-Fickiano transiente (C_p). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q).	110
10.14	Evolução temporal da concentração do modelo tridimensional transiente não-Fickiano para diferentes distâncias da fonte, para diversos experimentos de Copenhagen.	111
10.15	Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo com taxa de emissão normalizada (c/Q) para $t = 3600s$, (a) Fickiano e (b) não-Fickiano. Experimento 8 de Copenhagen.	113
10.16	Comportamento do erro em função de Δz	114
I.1	Estrutura da Troposfera ([Stull, 1988])	133
I.2	Ciclo diurno evolutivo da CLP.	134
I.3	Representação do fluxo vertical da dispersão de um contaminante no interior de uma camada de mistura.	137
I.4	Deslocamento vertical de massas de ar causado pela convecção térmica.	138
I.5	Comportamento da temperatura potencial e da velocidade do vento na CLC.	138

ÍNDICE DE TABELAS

9.1	Médias dos parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen [Gryning, 2002]	81
9.2	Velocidade de fricção u_* (m/s) para diferentes intervalos de tempo do experimento de Copenhagen. Cada intervalo corresponde a 10 min.....	82
9.3	Comprimento de Monin-Obukhov L (m) para diferentes intervalos de tempo do experimento de Copenhagen. Cada intervalo corresponde a 10 min.....	82
9.4	Concentrações observadas lateralmente ($c^y(x, 0)/Q$) ($10^{-4} sm^{-2}$) e as concentrações máximas observadas ($c(x, 0, 0)/Q$) ($10^{-7} sm^{-3}$) do Experimento de Copenhagen, x é a distância da fonte.....	83
9.5	Parâmetros micrometeorológicos para o experimento de Kinkaid	85
9.6	Concentrações máximas observadas ($c(x, 0, 0)/Q$) ($10^{-7} sm^{-3}$) do Experimento de Kinkaid.	87
10.1	Índices estatísticos para os dados de Copenhagen com coeficientes difusivos dado pela equação (8.1)	99
10.2	Índices estatísticos para os dados de Copenhagen para diferentes valores de S_k	103
10.3	Índices estatísticos para os dados de Kinkaid para diferentes valores de S_k ..	103
10.4	Índices estatísticos para os dados tridimensionais transientes de Copenhagen.	107
10.5	Índices estatísticos para os dados de Copenhagen	112

1. Introdução

A poluição atmosférica, nas regiões urbanas, tem aumentado devido à crescente atividade industrial e ao aumento do número de veículos motorizados em circulação. Estes poluentes provêm de várias fontes, algumas emitidas diretamente de veículos automotores, outras formadas indiretamente através de reações fotoquímicas no ar. Elevadas concentrações de poluentes advindos de atividades industriais e do processo de descarga da combustão de veículos automotores, partículas sólidas em suspensão, gotículas de óleo expelidas pelos motores, altas concentrações de CO , CO_2 , SO_2 e NO e compostos de Flúor e Cloro são algumas das causas da baixa qualidade do ar.

As fontes de poluição atmosférica são inúmeras e inúmeras são também as formas de impedir ou de aliviar a poluição. A legislação ambiental é rica em detalhes que começam por dois grandes ramos: o controle das emissões e a qualidade do ar. Como a preocupação em preservar a qualidade do ar tem aumentado nas últimas décadas, diferentes grupos de pesquisa vêm investigando a modelagem dos processos de dispersão de poluentes atmosféricos.

Esta investigação é fundamental na busca de alternativas que minimizem os impactos dos poluentes ao meio ambiente. Somente com a estimativa da concentração de poluentes é possível ir ao encontro dessas alternativas que são necessárias nos Estudos de Impactos Ambientais (EIA) para a avaliação de fontes existentes e a implantação de novas indústrias.

No estudo da dispersão de poluentes na atmosfera, duas fases devem ser consideradas: observação de campo e simulação. A primeira consiste em medir os valores de concentração e dos principais parâmetros meteorológicos que influenciam a dispersão. A segunda consiste no desenvolvimento de modelos para simular as medidas efetuadas, dando uma interpretação suficientemente correta do fenômeno físico observado. As observações de campo são muitas vezes dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos. Como consequência, a simulação torna-se uma fonte de informação importante para descrever os processos de dispersão na atmosfera.

A dispersão turbulenta na Camada Limite Planetária (CLP*) tem sido investigada basicamente de duas maneiras: com a aproximação Euleriana e Lagrangeana. A diferença básica entre o modelo Euleriano e Lagrangeano é o sistema de referência. O primeiro considera o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço. Os modelos Lagrangeanos se diferenciam dos Eulerianos porque utilizam um sistema de referência que segue o movimento de poluentes.

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera emprega-se, normalmente, a equação de difusão-advecção que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade. Sob certas condições pode-se obter expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma [Monin e Yaglom, 1971]; [Pasquill, 1974].

Existem numerosos modelos matemáticos de dispersão de poluentes na atmosfera diferentes uns dos outros, onde são considerados hipóteses diversas para o fechamento das equações dos fluxos turbulentos tais como: modelos de primeira ordem ou teoria K e segunda ordem.

A maneira mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de difusão-advecção está baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) que, em analogia com a difusão molecular, assume, obedecendo a lei de Fick para a difusão de massa, que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média através de um coeficiente de difusão turbulento “ K ”, o qual é uma propriedade do fluxo turbulento. É este coeficiente de difusão turbulento que será responsável pela complexidade da turbulência.

O fechamento da turbulência tradicional torna-se questionável sob certas condições, particularmente quando movimentos convectivos dominam o transporte e o processo difusivo, ou seja, a teoria K não leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência da camada limite convectiva (CLC)[†] não caracterizando o transporte assimétrico das partículas.

Diferentemente do modo tradicional, a equação genérica para a difusão turbulenta, com o fechamento da turbulência não-Fickiano, (fechamento não-local) que leva em conta a

*A porção da atmosfera afetada pela presença da superfície terrestre é denominada Camada Limite Planetária (CLP), e é amplamente afetada pelo fenômeno da turbulência. [Costa, 2004]

[†]É a camada que começa a se formar depois do nascer do sol, dura o dia todo e cessa com o pôr do sol.

assimetria no processo de dispersão de poluentes atmosféricos, considera que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio [van Dop e Verver, 2001], [Wyngaard e Weil, 1991], [Costa et al., 2003], [Costa, 2004], [Costa et al., 2004], surgindo um termo adicional na equação que é o termo de contra-gradiente.

Existem soluções analíticas da equação de difusão-advecção bidimensional. Nenhuma solução geral é conhecida para equações que descrevem o transporte e dispersão de poluentes atmosféricos. Existem algumas soluções específicas, as conhecidas soluções Gaussianas, que não são, entretanto, realísticas para descrever a concentração de poluentes no ar [Tirabassi, 2005]; de fato, os modelos Gaussianos usam parâmetros de dispersão empíricos que permitem que a solução Gaussiana represente o campo de concentração.

O presente trabalho tem como principal objetivo modelar a dispersão de poluentes na atmosfera através da resolução analítica da equação de difusão-advecção tridimensional, utilizando a hipótese do transporte por gradiente (ou teoria K). E também investigar o efeito do transporte assimétrico no cálculo de concentração de poluentes, utilizando a hipótese do fechamento não-local.

A busca de soluções analíticas para os problemas de dispersão ainda é uma das principais direções da pesquisa nesta área, pois nenhuma aproximação é feita durante a derivação da solução além do mais, todos os parâmetros aparecem explicitamente na solução, facilitando a investigação de suas influências. O teorema de Cauchy-Kowaleski garante a existência e unicidade de uma solução analítica para a equação de difusão-advecção [Courant e Hilbert, 1989]. Sabe-se que as soluções analíticas podem ser expressas ou na forma integral, como é o caso da solução encontrada pelo método ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*), ou com uma formulação em série, como na técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*).

O método ADMM[‡] vem sendo amplamente empregado na resolução da equação de difusão-advecção. Uma vasta gama de modelos foram resolvidos com este método, tais como: unidimensional dependente do tempo, bidimensional estacionário, bidimensional não-estacionário, todos com fechamento fickiano, com o fechamento não-fickiano tem-se unidimensional dependente do tempo e bidimensional estacionário.

Este método consiste em dividir a CLP em subcamadas considerando-a como um

[‡]Maiores detalhes na *Seção 3.4*

sistema multicamadas, ou seja, o domínio da variável z é dividido em vários subdomínios. Em cada um deles são tomados valores médios dos parâmetros que dependem da altura, tais como: o coeficiente difusivo K_z e o perfil da velocidade do vento u , resultando em N problemas do mesmo tipo (tanto quanto forem o número de subdomínios). Assim, o problema com coeficiente difusivo e perfil da velocidade do vento variáveis é substituído por um conjunto de problemas com coeficientes e perfis da velocidade do vento constantes (coeficientes e perfis médios) acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de poluentes nas interfaces. A solução de cada um deles é obtida pelo uso da transformada de Laplace. A solução analítica é dada em forma integral.

A resolução da equação tridimensional via ADMM, para nosso conhecimento, é desconhecida, e o objetivo do presente trabalho é encontrá-la. A idéia básica é utilizar da técnica GITT[§] para alcançar um problema transformado semelhante a um problema que já foi resolvido pelo método ADMM.

A GITT é uma técnica de transformação integral que combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão, é usada uma base trigonométrica determinada com o auxílio de um problema auxiliar, problema de Sturm-Liouville. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. Este procedimento resulta em um sistema de equações diferenciais com ordem inferior a do problema original, que é resolvido numericamente. Quando o problema transformado é resolvido analiticamente, usando a transformada de Laplace, tem-se a GILTT, maiores detalhes ver trabalhos de Wortman et al. [Wortmann et al., 2005]. A solução analítica é dada em forma de série.

Sabe-se que em todos os problemas resolvidos via GITT e/ou GILTT o problema transformado é um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's). Já no presente trabalho, o problema transformado será um sistema de equações diferenciais parciais (EDP's), isto é, o problema original é tridimensional e o sistema resultante da transformação integral é um sistema de EDP's bidimensional, que será resolvido pelo método ADMM. A esse novo procedimento intitulou-se: **GIADMT** (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*).

No presente trabalho apresenta-se uma modelagem Euleriana para a dispersão de

[§]Maiores detalhes na *Seção 3.3*

poluentes na atmosfera. O principal objetivo é determinar a solução analítica tridimensional da equação de difusão-advecção muito empregada para estimar o campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera. Essa solução será obtida utilizando o método **GIADMT**, considerando uma CLP não-homogênea verticalmente. O método será estendido para o caso tridimensional transiente.

Com a finalidade de mostrar a performance da solução em cenários reais, será introduzido algumas parametrizações da turbulência e comparados os valores preditos pela solução com dados experimentais.

Para o experimento de Kinkaid em que a fonte libera material ativo, ou seja, menos densos que o ar, será considerado a ascensão da pluma (*“plume rise”*). Paralelamente a isso, se investigará também o efeito da assimetria no processo de dispersão considerando o fechamento da turbulência não-local.

O método **GIADMT** além de ser aplicado na resolução da equação de difusão-advecção para modelar a dispersão de poluentes, também será estudado, a fim de se descobrir as possibilidades de aplicações e as limitações deste método.

A solução encontrada pelo método **GIADMT** é uma uma solução analítica dada por uma integral. Devido a complexidade da integral de linha presente na solução encontrada pelo método **GIADMT**, proveniente da aplicação do **ADMM**, optou-se em resolvê-la numericamente, tornando assim, o **GIADMT** um método semi-analítico. Deste modo, no presente trabalho considerou-se tanto o método da *Quadratura Gaussiana* [Stroud e Secrest, 1966] como o algoritmo de *Talbot* [Abate e Valkó, 2004] porque, segundo a literatura, este método de *Talbot* fornece resultados com a precisão desejada.

Portanto, esta proposta de tese encontra-se estruturada em onze capítulos. No capítulo 2, apresenta-se uma revisão bibliográfica sobre os modelos matemáticos existentes na literatura, com enfoque maior nos modelos analíticos. No capítulo 3 apresenta-se o modelo de poluição do ar derivando-se o método de solução **GIADMT**, da equação de difusão-advecção tridimensional com o fechamento fickiano. Apresenta-se ainda, de forma detalhada, o método **ADMM** e a técnica **GITT**. No capítulo 4 é apresentada a resolução da equação de difusão-advecção tridimensional com o fechamento não-fickiano através da técnica **GIADMT**. No capítulo 5, apresenta-se uma formulação fechada para a dispersão de poluentes na atmosfera, onde a equação de difusão-advecção tridimensional dependente do

tempo com o fechamento fickiano é resolvida utilizando a técnica GIADMT. No capítulo 6 apresenta-se um tratamento não-Fickiano para o caso tridimensional dependente do tempo resolvido via GIADMT. No capítulo 7, apresenta-se o comportamento da pluma (“plume rise”) para o caso de fontes com a liberação de poluentes ativos. No capítulo 8, tem-se a parametrização da turbulência empregada no presente trabalho. No capítulo 9, apresentam-se os passos para a validação do modelo e, descrevem-se os experimentos de dispersão de Copenhagen e Kinkaid a serem confrontados com o modelo. No capítulo 10, confronta-se as concentrações preditas pelo modelo com dados observacionais para efetuar a validação do mesmo e discutem-se os resultados. No capítulo 11, finaliza-se o trabalho com a conclusão.

2. Revisão Bibliográfica

Na tentativa de encontrar relações empíricas entre difusão atmosférica e fatores meteorológicos foram realizadas, na década de cinquenta, medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e parâmetros meteorológicos. O experimento mais significativo foi o de Prairie Grass [Barad, 1958]. Os parâmetros de dispersão lateral e vertical eram medidos diretamente ou estimados a partir de medidas de concentração na superfície. Baseado na teoria estatística de Hay e Pasquill [Hay e Pasquill, 1959] e nos experimentos de Prairie Grass, em 1961, Pasquill [Pasquill, 1961] conseguiu um modelo para os parâmetros de dispersão lateral e vertical.

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

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

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

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

A compreensão da difusão turbulenta na CLC teve considerável avanço a partir dos experimentos de tanque de Willis e Deardorff ([Willis e Deardorff, 1974], [Willis e Deardorff, 1976], [Willis e Deardorff, 1978], [Willis e Deardorff, 1981]). Estes experimentos demonstraram que a estrutura vertical da turbulência nesta camada não obedece a uma distribuição Gaussiana. Os primeiros suportes para as observações de laboratório de Willis e Deardorff foram obtidos a partir de modelos numéricos de Lamb [Lamb, 1978], [Lamb, 1982] que usou resultados do modelo de “*Large Eddy Simulation*” de Deardorff [Deardorff, 1972a]. Em 1975 Briggs [Briggs, 1975] propôs uma expressão para a distribuição de concentração vertical obtida a partir dos resultados de laboratório de Willis e Deardorff.

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

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

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

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

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

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

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

A equação bidimensional de transporte e difusão sendo u e K_z funções de potência

da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$) foi resolvida em 1957 por Smith [Smith, 1957]. Em seguida, Smith obteve uma solução para o caso de u constante, mas com K_z da seguinte forma:

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

onde K_0 é uma constante, α e β valem 0 ou 1 (nunca ao mesmo tempo) de acordo com a altura da camada limite z_i .

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

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

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

onde z_t é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada limite superficial). A solução de Scriven e Fisher foi amplamente utilizada no Reino Unido para o transporte de longa escala de poluentes. Tem sido utilizada na Europa para o transporte e deposição de contaminantes.

Yeh e Huang [Yeh e Huang, 1975] e Berlyand [Berlyand, 1975], divulgaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com u e K_z seguindo os perfis de potência, porém para uma atmosfera sem contorno superior ($k_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$). Estas soluções foram obtidas em termos de funções de Green. Já em 1978, Demuth [Demuth, 1978] avançou na solução, dada em termos de função de Bessel, com as mesmas condições, mas para uma camada verticalmente limitada (isto é, $k_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z = z_i$).

Adaptando a teoria de similaridade de Monin-Obukhov à difusão, Van Ulden [Van Ulden, 1978] expressou, em 1978, a solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, somente com a hipótese que u e K_z seguem os perfis de potência.

Nieuwstadt [Nieuwstadt, 1980] apresentou uma solução dependente do tempo, utilizando os polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado por:

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

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

Um ano mais tarde, Nieuwstadt e Haan [Nieuwstadt e Haan, 1981] ampliaram esta solução, em termos de polinômios de Jacobi considerando o fato do crescimento da camada limite.

Hinrichsen [Hinrichsen, 1986], desenvolveu um modelo com a solução de Berlyand [Berlyand, 1975] e tem verificado uma melhor eficácia comparado com o modelo de pluma Gaussiana utilizando três diferentes parametrizações.

Brown e Arya (1989) [Brown e Arya, 1989] tem comparado a eficácia do modelo usando as soluções de Yeh e Huang [Yeh e Huang, 1975] com os dados de Hanford 67 [Nickola, 1977], apresentando uma boa concordância entre os resultados do modelo e dados experimentais.

Uma solução analítica bidimensional para o nível do solo com perfis de potência da velocidade do vento e coeficiente de difusão, incluindo os efeitos de absorção ao nível do solo, foi apresentada por Koch [Koch, 1989] em 1989. A deposição foi imaginada em termos de funções hipergeométricas.

Já em 1992, Chrysikopoulos et al. [Chrysikopoulos et al., 1992] desenvolveram uma solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo de uma fonte área contínua ao nível do solo para os mesmos perfis de U e K_z dados pelas equações (2.2), mas incluindo deposição como um mecanismo de remoção. Sendo que as funções de Bessel e hipergeométricas foram incorporadas à solução.

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

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

Em 1996, Sharan et al. [M. Sharan e Yadav, 996a], [M. Sharan e Nigam, 996b], desenvolveram modelos matemáticos para a dispersão tridimensional atmosférica, usando coeficientes de difusão constantes e parametrizações em termos da distância da fonte respectivamente. Esses modelos apresentam soluções em termos de função de Bessel e combinações lineares de função de Green.

Em 1997, Lin e Hildeman [Lin e Hildeman, 1997] estenderam a solução de Yeh e Huang [Yeh e Huang, 1975] e Berlyand [Berlyand, 1975], de 1975, para o caso de deposição para o solo. Estas soluções foram apresentadas em termos de funções modificadas de Bessel.

Existem muitos modelos baseados em soluções analíticas como os apresentados anteriormente. Em particular, a solução de Berlyand [Berlyand, 1975] tem sido usada na Rússia, enquanto que o modelo de Scriven e Fisher [Scriven e Fisher, 1975] tem sido empregado para o transporte de poluentes e deposição na Europa [Fisher, 1978].

Uma grande variedade de soluções numéricas da equação de difusão-advecção pode ser encontrada na literatura [Nieuwstadt e Van Ulden, 1978]; [Lamb, 1978]; [Carvalho, 1996]. Porém, a busca de soluções analíticas para os problemas de dispersão ainda é uma das principais direções da pesquisa nesta área, pois todos os parâmetros aparecem explicitamente na solução, facilitando a investigação de suas influências. Neste trabalho são de interesse particular as soluções analíticas obtidas através das técnicas ADMM e GILTT. O teorema de Cauchy-Kowaleski garante a existência e unicidade de uma solução analítica para a equação de difusão-advecção [Courant e Hilbert, 1989]. Sabe-se que as soluções analíticas podem ser expressas ou na forma integral, como é o caso da solução encontrada via ADMM, ou com uma formulação em série, como na GILTT. Considerando a equivalência destas soluções, conseqüentemente, o enfoque a partir deste momento serão os modelos que utilizam estes métodos para obtenção da solução.

Moura et al. [Moura et al., 1995] propuseram uma solução analítica da equação de difusão-advecção unidimensional dependente do tempo, para a dispersão de contaminantes passivos em uma camada limite estável. Para a obtenção dos resultados, foi aplicado o método ADMM e usou-se um coeficiente de difusão K_z médio para cada subcamada dado por Degrazia e Moraes [Degrazia e Moraes, 1992]. Após, Pires [Pires, 1996] apresentou uma solução similar para uma CLC, utilizando o coeficiente difusivo de Degrazia [Degrazia et al., 1995]. Moreira [Moreira, 1996] foi além, propondo a solução para o caso bidimensional estacionário usando o método ADMM também na CLC. Em 1999, Moreira et al. [Moreira et al., 1999] utilizaram os dados do experimento de Praire-Grass e o coeficiente difusivo de Degrazia et al. [Degrazia et al., 1997] na mesma equação.

Em 1999, Moura [Moura, 1999] resolveu analiticamente a equação de difusão-advecção estacionária bidimensional e tridimensional numa geometria cartesiana, pela GITT. Sendo

que para encontrar a solução tridimensional, foi considerado um coeficiente de difusão K_z constante válido em toda CLC. Ainda, foi considerado que a magnitude da componente de difusão longitudinal é muito menor que a componente de advecção na mesma direção, ou seja $|\frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial c}{\partial x})| \ll |u \frac{\partial c}{\partial x}|$, podendo assim, ser negligenciada.

O problema transiente difusivo unidimensional com coeficiente de difusão variável foi resolvido por Wortmann et al. [Wortmann et al., 2000], [Wortmann, 2003] através da técnica da GILTT. De acordo com o conhecimento dos autores, foi a primeira vez que a GILTT foi aplicada para simular a dispersão de poluentes na atmosfera com coeficiente difusivo K_z variável. Utilizando essa mesma idéia, Buske et al. [Buske et al., 2003], resolveram a equação de difusão-advecção bidimensional estacionário também com coeficiente de difusão variável através do método GILTT, apresentando resultados numéricos em 2004 comparando com os modelos ADMM e KAPP-G [Wortmann et al., 2005], [Buske, 2004].

Ferreira Neto [Ferreira Neto, 2003], utilizou o método ADMM, em 2003, para estimar o campo de concentração de poluentes na CLC resolvendo a equação de difusão-advecção bidimensional não-estacionária. Resultados deste trabalho também são apresentados em [Moreira et al., 2005b].

Em 2003, Costa et al. [Costa et al., 2003] estendeu o método ADMM resolvendo a equação de difusão-advecção bidimensional considerando o fechamento da turbulência não-Fickiano, o que fez surgir um termo adicional na equação de difusão-advecção. Este termo leva consigo informações sobre o transporte assimétrico na CLC. Os parâmetros que envolvem a turbulência assumem um valor médio constante em cada subcamada. Aplicando a um único experimento de Copenhagen. Resultados deste trabalho também são apresentados em [Moreira et al., 2005d].

Em 2004, Costa et al. [Costa, 2004], [Costa et al., 2004], e Moreira et al. [Moreira et al., 2004] apresentaram um estudo completo do modelo não-Fickiano bidimensional. A performance do modelo foi avaliada utilizando-se dados observados de concentrações superficiais obtidos nos experimentos de Copenhagen e Prairie Grass.

No mesmo ano, Buligon [Buligon, 2004] também utilizou o método ADMM e o fechamento da turbulência não-Fickiano para resolver a equação unidimensional dependente do tempo, [Buligon et al., 2006].

Em 2005, Gevaldo [Gevaldo, 2005] apresentou um análise da dispersão de poluentes

na atmosfera usando a técnica GITT, onde todos os problemas transformados resultantes da transformação integral são resolvidos numericamente. Enquanto, Moreira et al. [Moreira et al., 2005e] realizou simulações próximas a fonte de poluentes através da técnica GILTT.

No mesmo ano, Costa et al. [Costa et al., 2005b] aplicou o método ADMM em uma Camada Limite Estável (CLE) testando diversas parametrizações, e Moreira et al. [Moreira et al., 2005c], também usando o método ADMM para modelar condições de vento fraco. E Moreira et al. [Moreira et al., 2005f] simulou a dispersão de poluentes radioativos de Angra I. Em seguida Buske et al. [Buske et al., 2005a] apresentaram uma comparação entre os métodos ADMM e GILTT. No confronto das duas soluções foram utilizados os dados experimentais da CLE de Minnessota e Cabauw, sendo verificados resultados similares.

Ainda no mesmo ano, Costa et al. [Costa et al., 2005a] e [Costa et al., 2005c] expressaram a solução semi-analítica para equação de difusão-advecção tridimensional, combinando, pela primeira vez, os métodos GITT e ADMM.

A solução para o problema transiente difusivo bidimensional com coeficiente de difusão variável pelo método GILTT foi apresentada [Buske et al., 2005b], [Moreira et al., 2006a], [Buske et al., 2006a].

Os estudos de dispersão de poluentes na atmosfera modelados pela técnica GITT e ADMM avançaram, a técnica GILTT foi utilizada para modelar condições de vento fraco [Mello et al., 2005], [Buske et al., 2006c], [Buske et al., 2007b] e [Buske et al., 2007e]. Em 2006, Costa et al. [Costa et al., 2006] formalizaram a técnica que combina os métodos GITT e ADMM nomeando-a de GIADMT (Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique). Apresentaram a solução tridimensional e aplicaram em uma CLP não homogênea confrontando os dados gerados pelo modelo com dados do experimento de Copenhagen. No mesmo ano, Moreira et al. [Moreira et al., 2006b] apresentaram as aplicações do método ADMM, exibindo todos os problemas de dispersão de poluentes na atmosfera até então resolvidos pelo método. Buske et al. [Buske et al., 2006b] aplicaram o método GILTT na simulação de tritium radioativo e na simulação de poluentes com deposição no solo [Buske et al., 2007d] [Buske et al., 2007c], também apresentaram a solução do problema bidimensional não-Fickiano [Buske et al., 2006d].

Em 2007, a solução do modelo não-Fickiano tridimensional via GIADMT foi determinada [Costa et al., 2007a]. E a ascensão da pluma (“*plume rise*”) também foi considerada

em simulações com o método GIADMT [Costa et al., 2007d].

Um maneira de confrontar os dados gerados pela técnica GILTT com dados tridimensionais é utilizar a solução analítica bidimensional da equação de difusão-advecção pela aproximação GILTT enquanto a dispersão lateral é simulada por um termo *Gaussiano* [Buske et al., 2007a]. O método GIADMT também foi aplicado na simulação de poluentes radioativos na atmosfera [Costa et al., 2007c], e na simulação de poluentes considerando a deposição no solo [Costa et al., 2007b], em ambos os casos os dados gerados pelo método com solução tridimensional foram confrontados com dados experimentais existentes na literatura e foram comparados também com resultados obtidos pelo método GILTT que resolve um problema bidimensional com uma gaussiana em y apresentando assim, uma solução tridimensional.

Recentemente, Pereira [Pereira, 2007] realizou um estudo comparativo entre os métodos ADMM e GILTT para simular a dispersão de poluentes na CLP resolvendo um problema lagrangeano bidimensional transiente descrevendo o modelo a *puff*. Os resultados obtidos pelas metodologias adotadas foram comparados entre si.

Como se pode ver, são muitos os intuitos de se chegar a uma solução mais abrangente da equação de difusão-advecção. Espera-se, com o presente trabalho, uma evolução na obtenção de soluções analíticas desta equação, principalmente devido ao acréscimo da terceira dimensão, sendo que em trabalhos anteriores que utilizaram a mesma técnica (ADMM) foi obtida somente solução para o caso bidimensional.

3. Descrição do método GIADMT

A turbulência na atmosfera é caracterizada por movimentos de grandes escalas de tempo e extensão. Na CLP as escalas de extensão variam da ordem de milímetros ($10^{-3}m$) e chegam a atingir toda a sua profundidade ou altura ($10^2 - 10^3m$). A escala de tempo varia de 10^{-3} a $10^{+4}s$. Os movimentos turbulentos de pequena escala são os principais responsáveis pela dissipação viscosa da energia cinética. Os movimentos turbulentos de grande escala contêm a energia cinética turbulenta e são os principais responsáveis pela variação turbulenta do *momentum*, calor e massa, tanto quanto pela dispersão de poluentes na atmosfera.

A superfície do planeta tem um papel instabilizador para o escoamento: causa uma grande variação da velocidade do vento com a altura (cisalhamento), e é aquecida pela radiação solar durante o dia. Estes dois processos são responsáveis pela grande variação da velocidade do escoamento que caracteriza a turbulência atmosférica. Ou seja, toda substância emitida na atmosfera se dispersa através da difusão turbulenta causada pela variação de temperatura na CLP. Esta variação provoca o aquecimento e resfriamento da superfície da terra, fazendo com que o transporte das partículas e gases seja dominado na horizontal e na longitudinal pelo vento médio (transporte advectivo) e na vertical pelos fluxos turbulentos (transporte turbulento). Conseqüentemente, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera é, geralmente, descrito pela equação de difusão-advectação.

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

O equacionamento da difusão atmosférica pode ser obtido pela aplicação da equação de conservação de massa (equação da continuidade). Considerando uma espécie genérica C

que se conserve na atmosfera:

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

onde U , V e W representam as componentes do campo de velocidade do vento nas direções x , y e z respectivamente. O primeiro termo na equação (3.1) representa a variação local, ou Euleriana de C e os demais representam o transporte, ou advecção de C em cada uma das direções pelas componentes do vento e S o termo fonte.

Fluxos turbulentos são altamente irregulares, quase aleatórios e imprevisíveis de detalhes. A turbulência é manifestada de forma irregular com as flutuações de velocidades, temperatura e concentrações escalares sobre seus valores principais. Na modelagem matemática, de difusão e turbulência, todas as variáveis de interesse são geralmente expressas como a decomposição de uma parte média (denotada pela barra superior) e uma parte turbulenta (denotada pelo apóstrofo) com o objetivo de se definir equações para a evolução média das variáveis:

$$\begin{aligned} C &= \bar{c} + c' \\ U &= \bar{u} + u' \\ V &= \bar{v} + v' \\ W &= \bar{w} + w' \end{aligned} \quad (3.2)$$

Este procedimento de decomposição é conhecido como decomposição de Reynolds e tem por objetivo definir equações para a evolução média das variáveis, ao invés de seu valor exato. Neste contexto, introduzindo a equação (3.2) na equação (3.1), e aplicando as regras do método de Reynolds [Stull, 1988], a equação de difusão-advecção que descreve concentrações a partir de uma fonte contínua pode ser escrita como:

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

onde \bar{c} é a concentração média de poluentes, \bar{u} , \bar{v} , \bar{w} são as componentes do vento médio na direção x , y e z respectivamente, e $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam os fluxos turbulentos de poluentes nas direções longitudinal, lateral e vertical. Fisicamente, entretanto, os fluxos

turbulentos nada mais são que advecções da componente turbulenta de C pela velocidade turbulenta e caracterizam o processo físico de transporte de quantidades devido à mistura entre camadas adjacentes de ar imposta pela variabilidade do escoamento turbulento.

3.1 Problema de Fechamento

A equação (3.3) apresenta quatro variáveis e, dessa forma não pode ser resolvida. Tem-se então, o chamado problema de fechamento da turbulência. Uma maneira de solucionar o problema de fechamento da equação (3.3) está baseada na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a Lei de *Fick* da difusão molecular, os fluxos turbulentos são proporcionais à magnitude do gradiente de concentração média. Assim, a chamada teoria K estabelece que os fluxos devem ser diretamente proporcionais aos gradientes médios, mas de sinais inversos. O coeficiente de proporcionalidade (K) é o chamado coeficiente de difusividade turbulenta, o qual é uma propriedade do fluxo turbulento.

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

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

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

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta nas direções x , y e z respectivamente. São estes coeficientes de difusividade turbulenta que serão responsáveis pela complexidade da turbulência.

Desta forma, introduzindo-se as equações (3.4), (3.5) e (3.6) na equação (3.3) obtém-se:

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

A teoria K é bastante empregada como um modelo prático de estimativa de dispersão de poluentes na atmosfera. A vantagem da teoria K é que condições realísticas (variação

tridimensional dos campos de vento e dos coeficientes de difusão) podem ser simulados. Geralmente, a desvantagem deste modelo reside no fato de que, em contraste com a difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente de escala. Isto quer dizer que a taxa de difusão de uma pluma de material é geralmente dependente da dimensão da pluma e da densidade da turbulência. Na medida que a pluma cresce grandes turbilhões são incorporados no processo de expansão, assim como progressivamente uma grande fração da energia cinética turbulenta é disponível para a expansão da pluma. Mas devido à flexibilidade do modelo K , isso pode ser superado tendo-se em mente que os coeficientes de difusão K_x , K_y e K_z podem ser especificados como uma função não somente da estabilidade, mas também da distância da fonte [Arya, 1995].

3.2 O Modelo Matemático

Um poluente inerte começa a ser contínua e regularmente liberado de uma fonte elevada sem qualquer empuxo vertical na atmosfera, e se deseja determinar a distribuição espacial de sua concentração. Processos de difusão turbulenta vertical, lateral e longitudinal dispersam o material nessas direções enquanto um vento horizontal alinhado com a direção longitudinal realiza uma advecção a sotavento do ponto de emissão. Como a componente vertical do vento \bar{w} é muito menor que a demais componentes, ela pode ser desprezada assim: ($\bar{w} = 0$), e por comodidade, considera-se o perfil de velocidade do vento apenas na direção do eixo x , ou seja, ($\bar{v} = 0$). Ou seja, a equação (3.7) passa a ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + S \quad (3.8)$$

Além disso, considera-se um modelo estacionário isto é, ($\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = 0$), portanto a equação (3.8) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + S \quad (3.9)$$

Muitas vezes os coeficientes de difusão são considerados constantes para resolver a equação de difusão-advecção, e o termo fonte não é considerado como um termo da equação e sim como condição de entrada, sendo assim a equação (3.9) pode ser reescrita da seguinte

forma:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \quad (3.10)$$

Toma-se como fronteiras a superfície terrestre e a altura da CLC, supondo que não há passagem de qualquer poluente; ou seja, o fluxo é zero no solo e no topo da CLC. Portanto, a equação (3.10) está sujeita às condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0, z_i \quad (3.10a)$$

Ainda, tem-se concentração máxima em $y = y_0$ e fluxo nulo quando $y \rightarrow \infty$:

$$K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0 \quad em \quad y = y_0, \infty \quad (3.10b)$$

E tem-se uma fonte contínua com taxa de emissão contínua Q na altura H_s , descrita por

$$\bar{u} \bar{c}(0, y, z) = Q \delta(z - H_s) \delta(y - y_0) \quad em \quad x = 0 \quad (3.10c)$$

onde δ é a função generalizada Delta de Dirac, H_s e y_0 indicam a posição da fonte.

3.3 Solução via GITT

Para se resolver a equação diferencial (3.10), aplica-se o método **GITT** [Cotta, 1993]. Segundo esse método que faz uso de uma expansão em série de autofunções ortogonais, a EDP original é transformada em um sistema infinito de equações diferenciais parciais ou ordinárias acopladas. Um truncamento realizado em uma ordem adequada permite a resolução aproximada do sistema finito resultante, também chamado de problema transformado, por uma técnica numérica ou eventualmente algébrica apropriada.

Até o momento, todos os problemas resolvidos via **GITT** e/ou **GILTT** o problema transformado é um sistema de EDO's. Já no presente trabalho, o problema transformado será um sistema de EDP's, isto é, o problema original é uma EDP tridimensional e o sistema resultante da transformação integral é um sistema de EDP's bidimensionais, que será resolvido pelo método **ADMM**.

Seguindo-se o formalismo da **GITT** postula-se que o potencial $\bar{c}(x, y, z)$ pode ser

expresso como uma expansão em série de autofunções ortogonais $\psi_j(y)$ para a direção y onde j é a ordem dos correspondentes autovalores λ ,

$$\bar{c}(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_j(x, z) \psi_j(y)}{\sqrt{N_j}}. \quad (3.11)$$

onde N_j é a norma dada por

$$N_j = \int_y \psi_j^2(y) dy. \quad (3.12)$$

Os autovalores e correspondentes autofunções são determinados resolvendo-se um problema auxiliar o mais similar possível ao problema original, para a variável espacial analisada.

Assim, o sistema (3.10) requer uma transformação para eliminar y , i.e., um problema auxiliar nesta variável e seus correspondentes autovalores e autofunções. Lembrando que a equação (3.10) apresenta um termo Laplaciano em y e as condições de contorno são homogêneas nessa mesma direção, dadas pela equação (3.10b), supondo um L_y suficientemente grande ($L_y \rightarrow \infty$), tal que o fluxo seja nulo; e considerando que a fonte está posicionada em $y = 0$, ou seja, $y_0 = 0$, determina-se o seguinte problema auxiliar de Sturm-Liouville:

$$\frac{d^2 \psi_j(y)}{dy^2} + \lambda_j^2 \psi_j(y) = 0 \quad (3.13)$$

com suas respectivas condições de contorno:

$$\psi_j'(y) = 0 \quad em \quad y = 0 \quad e \quad y = L_y. \quad (3.13a)$$

A solução do problema auxiliar da equação (3.13) tem a seguinte solução, [Özisk, 1974]:

$$\psi_j(y) = \cos(\lambda_j y), \quad (3.14)$$

onde λ_j são as raízes positivas da expressão $\sin(\lambda_j L_y) = 0$. Assim $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_j = \frac{j\pi}{L_y}$.

Conhecendo-se as autofunções, precisa-se determinar o potencial ainda desconhecido,

para tanto substitui-se (3.11) na equação (3.10) e obtém-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial x} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} = \sum_{j=0}^{\infty} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial x^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_y \bar{c}_j(x, z) \frac{\psi_j''(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial z^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} \quad (3.15)$$

onde "'' é usado para indicar derivada de segunda ordem.

Pela equação (3.13) pode-se concluir que: $\psi_j''(y) = -\lambda_j^2 \psi_j(y)$. Assim a equação (3.15), pode ser reescrita:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial x} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} = \sum_{j=0}^{\infty} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial x^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_y \lambda_j^2 \bar{c}_j(x, z) \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial z^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} \quad (3.16)$$

É importante lembrar que a EDP (3.16) obtida pela derivação em y da expansão em série do potencial (ainda desconhecido) só conterá os coeficientes desconhecidos $\bar{c}_j(x, z)$, suas derivadas, parâmetros físicos do problema como velocidade do vento, difusividade, etc., as autofunções e suas derivadas. Para fazer uso da propriedade da ortogonalidade, define-se um operador integrador que *colapsa* somatórios reduzindo-os à um único termo deixando a variável independente e suas derivadas devidamente explícitas. Nesse processo, todo o resto (autofunções, suas derivadas, parâmetros e funções expressando grandezas físicas etc.) são integrados e reduzidos a números.

Isto significa que o próximo passo é aplicar o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{\sqrt{N_i}} dy$ na equação (3.16). Assim:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y) \psi_i(y)}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy = \sum_{j=0}^{\infty} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial x^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y) \psi_i(y)}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy + \sum_{j=0}^{\infty} K_y \lambda_j^2 \bar{c}_j(x, z) \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y) \psi_i(y)}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial z^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y) \psi_i(y)}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy \quad (3.17)$$

Como as autofunções são ortogonais as integrais presentes na equação (3.17) se anulam para $j \neq i$ e valem 1 quando $i = j$. Abrindo os somatórios da equação (3.17) para

uma melhor vizualização tem-se:

$$\begin{aligned}
& -\bar{u} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{c}_0}{\partial x} \\ \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{c}_{N_a-1}}{\partial x} \end{bmatrix} + K_x \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \bar{c}_0}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_{N_a-1}}{\partial x^2} \end{bmatrix} + \\
& -K_y \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_0^2 \bar{c}_0 \\ \lambda_1^2 \bar{c}_1 \\ \vdots \\ \lambda_{N_a-1}^2 \bar{c}_{N_a-1} \end{bmatrix} + K_z \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \bar{c}_0}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial z^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_{N_a-1}}{\partial z^2} \end{bmatrix} = 0
\end{aligned} \tag{3.18}$$

onde N_a indica número de autovalores.

Desta forma, se obteve apenas matrizes diagonais. Assim, temos na realidade N_a problemas do mesmo tipo:

$$-\bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial x^2} - K_y \lambda_j^2 \bar{c}_j(x, z) + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial z^2} = 0 \tag{3.19}$$

onde $j = 0, 1, 2, \dots, (N_a - 1)$

Para a condição de entrada, o procedimento é análogo. Primeiramente a variável $\bar{c}(x, y, z)$ é expandida usando-se a equação (3.10c) na equação (3.11)

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_j(0, z) \psi_j(y)}{N_j^{1/2}} = \frac{Q \delta(z - H_s) \delta(y)}{\bar{u}} \tag{3.20}$$

Em seguida é usado o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} dy$, produzindo

$$\sum_{j=0}^{\infty} \bar{c}_j(0, z) \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y) \psi_i(y)}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy = \frac{Q \delta(z - H_s)}{\bar{u}} \int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y) \delta(y)}{N_i^{1/2}} dy \tag{3.21}$$

executadas as devidas substituições e integrações obtém-se

$$\bar{c}_j(0, z) = \frac{Q \delta(z - H_s)}{\bar{u}} \frac{\psi_j(0)}{N_j^{1/2}} \quad (3.22)$$

Para a condição de contorno (3.10a) o procedimento é idêntico ao realizado anteriormente para a condição de entrada, porém como seu valor é nulo, não se altera.

O que foi apresentado até aqui segue basicamente os passos da **GITT**. Tipicamente, os problemas transformados como a equação (3.18), são resolvidos numericamente. Neste trabalho esta equação terá um tratamento analítico através da técnica **ADMM**, conforme será visto a seguir.

3.4 Técnica ADMM

Para resolver a equação de difusão-advecção, muitas vezes os coeficientes de difusão são considerados constantes, assim a solução encontrada pode ser aplicada somente em casos de turbulência homogênea. Quando se trata de uma turbulência não-homogênea, deve-se considerar que a velocidade do vento e as difusividades turbulentas variam com a altura acima do solo segundo uma parametrização especificada.

O método **ADMM** resolve a equação de difusão-advecção para uma turbulência não-homogênea. A idéia básica deste método consiste em dividir a CLP em subcamadas considerando-a como um sistema multicamadas, ou seja, o domínio da variável z é dividido em vários subdomínios, como pode ser visto na figura (3.4), sendo n^* a camada onde ocorre a emissão do poluente. Em cada uma delas são tomados valores médios dos parâmetros que dependem da altura, tais como: os coeficientes difusivos (K_α) (onde α indica a direção x , y , ou z) e o perfil da velocidade do vento (\bar{u}), ou seja, toma-se uma aproximação “*stepwise*” [Costa et al., 2006] [Moreira et al., 2006b]. Sendo assim, tem-se N problemas do mesmo tipo (tanto quanto forem o número de subdomínios), acoplados por condições de interfaces de continuidade de concentração e de fluxo.

Levando-se em consideração a dependência dos coeficientes de difusão K_α e do perfil da velocidade do vento \bar{u} com relação a variável z , e a altura z_i da CLC discretizada em N

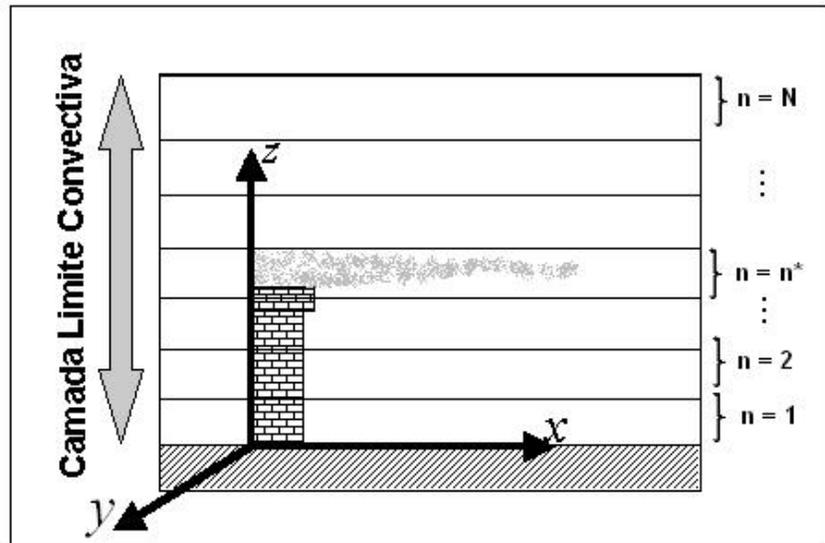


Figura 3.1 – Desenho esquemático do modelo

subintervalos, obtêm-se os seguintes valores médios para K_α e \bar{u} dentro de cada intervalo:

$$K_{\alpha_n} = \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} K_\alpha(z) dz$$

$$\bar{u}_n = \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} \bar{u}_z(z) dz \quad (3.23)$$

Na figura (3.2) abaixo, a aproximação *stepwise* é ilustrada para o coeficiente de difusão vertical K_z .

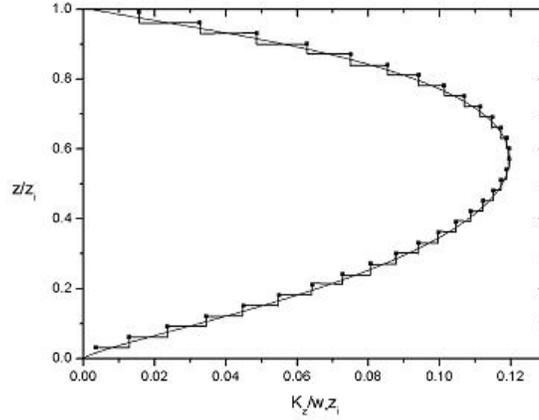


Figura 3.2 – Aproximação *stepwise* para o coeficiente de difusão vertical adimensional.

Sendo assim, considerando a CLP como um sistema de multicamadas, a equação (3.19) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$-\bar{u}_n \frac{\partial \bar{c}_{j n}(x, z)}{\partial x} + K_{x_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}(x, z)}{\partial x^2} - K_{y_n} \lambda_j^2 \bar{c}_{j n}(x, z) + K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}(x, z)}{\partial z^2} = 0 \quad (3.24)$$

com $z_{n-1} \leq z \leq z_n$; $x > 0$; $0 < y < L_y$ e $n = 1, 2, \dots, N$, onde N denota o número total de subcamadas e \bar{c}_n representa a concentração na n ésima subcamada.

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

$$\bar{c}_{j n} = \bar{c}_{j n+1} \quad z = z_n \quad e \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (3.25)$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \frac{\partial \bar{c}_{j n+1}}{\partial z} \quad z = z_n \quad e \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (3.26)$$

Portanto, a solução da equação (3.24), juntamente com a condição de contorno (3.10a) e a condição de entrada (3.22), é obtida resolvendo N problemas do tipo:

$$\bar{u}_n \frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial x} = K_{x_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}}{\partial x^2} - K_{y_n} \lambda_j^2 \bar{c}_{j n} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}}{\partial z^2} \quad (3.27)$$

com $z_{n-1} \leq z \leq z_n$, para $n = 1 : N$, onde $\overline{c_{j n}}$ representa a concentração na enésima subcamada;

$$\overline{c_{j n}}(0, z) = \frac{Q \delta(z - H_s)}{\overline{u_n}} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}} \quad \text{em } x = 0 \text{ e } n = n^* \quad (3.27a)$$

onde n^* representa a região de emissão;

$$K_{z_n} \frac{\partial \overline{c_{j n}}}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } n = 1, \text{ ou } z = z_i \text{ e } n = N \quad (3.27b)$$

nas demais camadas tem-se as condições de interface dadas por (3.25) e (3.26).

Para resolver a equação (3.27), aplica-se a transformada de Laplace denotando $\mathcal{L} \{ \overline{c_{j n}}(x, z) \} = F_{j n}(s, z)$. Seguem abaixo os cálculos realizados:

$$\mathcal{L} \left\{ \overline{u_n} \frac{\partial \overline{c_{j n}}}{\partial x} \right\} = \mathcal{L} \left\{ K_{x_n} \frac{\partial^2 \overline{c_{j n}}}{\partial x^2} \right\} - \mathcal{L} \left\{ K_{y_n} \lambda_j^2 \overline{c_{j n}} \right\} + \mathcal{L} \left\{ K_{z_n} \frac{\partial^2 \overline{c_{j n}}}{\partial z^2} \right\} \quad (3.28)$$

$$\frac{\overline{u_n}}{K_{x_n}} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \overline{c_{j n}}}{\partial x} \right\} = \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 \overline{c_{j n}}}{\partial x^2} \right\} - \frac{K_{y_n}}{K_{x_n}} \lambda_j^2 \mathcal{L} \left\{ \overline{c_{j n}} \right\} + \frac{K_{z_n}}{K_{x_n}} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 \overline{c_{j n}}}{\partial z^2} \right\} \quad (3.29)$$

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 \overline{c_{j n}}}{\partial x^2} \right\} - \frac{\overline{u_n}}{K_{x_n}} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \overline{c_{j n}}}{\partial x} \right\} - \frac{K_{y_n}}{K_{x_n}} \lambda_j^2 \mathcal{L} \left\{ \overline{c_{j n}} \right\} + \frac{K_{z_n}}{K_{x_n}} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 \overline{c_{j n}}}{\partial z^2} \right\} = 0 \quad (3.30)$$

$$\left[s^2 F_{j n}(s, z) - s \overline{c_{j n}}(0, z) - \frac{\partial \overline{c_{j n}}}{\partial x} \Big|_{x=0} \right] - \frac{\overline{u_n}}{K_{x_n}} [s F_{j n}(s, z) - \overline{c_{j n}}(0, z)] + \\ - \frac{K_{y_n}}{K_{x_n}} \lambda_j^2 [F_{j n}(s, z)] + \frac{K_{z_n}}{K_{x_n}} \left[\frac{\partial^2 F_{j n}(s, z)}{\partial z^2} \right] = 0 \quad (3.31)$$

Aplicando a condição de entrada (3.27a), e lembrando que $\frac{\partial \overline{c_{i n}}}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0$, a equação (3.31) torna-se:

$$\begin{aligned}
s^2 F_{j n}(s, z) - s \frac{Q \delta(z - H_s)}{\bar{u}_n} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}} - \frac{\bar{u}_n s}{K_{x_n}} F_{j n}(s, z) + \\
+ \frac{\bar{u}_n}{K_{x_n}} \frac{Q \delta(z - H_s)}{\bar{u}_n} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}} - \frac{K_{y_n}}{K_{x_n}} \lambda_j^2 F_{j n}(s, z) + \frac{K_{z_n}}{K_{x_n}} \frac{\partial^2 F_{j n}(s, z)}{\partial z^2} = 0 \quad (3.32)
\end{aligned}$$

Reordenando a equação (3.32):

$$\begin{aligned}
\frac{K_{z_n}}{K_{x_n}} \frac{\partial^2 F_{j n}(s, z)}{\partial z^2} + \left(s^2 - \frac{\bar{u}_n s}{K_{x_n}} - \frac{K_{y_n}}{K_{x_n}} \lambda_j^2 \right) F_{j n}(s, z) = \\
= \left(\frac{Q \delta(z - H_s)}{\bar{u}_n} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}} \right) \left(-\frac{\bar{u}_n}{K_{x_n}} + s \right) \quad (3.33)
\end{aligned}$$

Para facilitar a notação, define-se:

$$\begin{aligned}
A_n &= \frac{K_{z_n}}{K_{x_n}} \\
B_{j n} &= B_{j n}(s) = - \left(s^2 - \frac{\bar{u}_n s}{K_{x_n}} - \frac{K_{y_n}}{K_{x_n}} \lambda_j^2 \right) \\
D_{j n} &= D_{j n}(s) = - \left(\frac{Q \psi_j(0)}{\bar{u}_n} \frac{1}{N_j^{1/2}} \right) \left(-\frac{\bar{u}_n}{K_{x_n}} + s \right) \quad (3.34)
\end{aligned}$$

reescrevendo a equação (3.33) usando (3.34):

$$A_n \frac{\partial^2 F_{j n}(s, z)}{\partial z^2} - B_{j n} F_{j n}(s, z) = -D_{j n} \delta(z - H_s) \quad (3.35)$$

Dividindo (3.35) por A_n :

$$\frac{\partial^2 F_{j n}(s, z)}{\partial z^2} - \frac{B_{j n}}{A_n} F_{j n}(s, z) = \frac{-D_{j n}}{A_n} \delta(z - H_s) \quad (3.36)$$

Considerando que a equação (3.36) só depende de z , pois s é complexo, tem-se uma equação diferencial ordinária não-homogênea (EDO) com coeficientes constantes que é

facilmente resolvida. A solução geral da equação (3.36) pode ser escrita sob a forma:

$$F_{j_n} = F_{j_{n_h}} + F_{j_{n_p}} \quad (3.37)$$

onde $F_{j_{n_h}}$ é a solução homogênea da equação homogênea associada e $F_{j_{n_p}}$ é a solução particular.

3.4.1 Solução homogênea

A equação homogênea associada a equação (3.36) é dada por:

$$\frac{\partial^2 F_{j_n}(s, z)}{\partial z^2} - \frac{B_{j_n}}{A_n} F_{j_n}(s, z) = 0 \quad (3.38)$$

resolvendo:

$$\gamma^2 - \frac{B_{j_n}}{A_n} = 0 \quad \Rightarrow \quad \gamma^2 = \frac{B_{j_n}}{A_n} \quad \Rightarrow \quad \gamma = \pm \sqrt{\frac{B_{j_n}}{A_n}}$$

Assim, a solução de (3.38) é dada por:

$$F_{j_{n_h}} = C_{1_n} e^{\sqrt{\frac{B_{j_n}}{A_n}} z} + C_{2_n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j_n}}{A_n}} z} \quad (3.39)$$

3.4.2 Solução Particular

Um caminho para se chegar a solução particular $F_{j_{n_p}}$, é relacioná-la com a expressão de $F_{j_{n_h}}$. De forma que $F_{j_{n_p}}$ pode ser escrita sob a forma integral como segue, conforme Kreider et al. [Kreider et al., 1972]:

$$F_{j_{n_p}} = \int_0^{z_i} G(z, \xi) h(\xi) d\xi \quad (3.40)$$

onde $z, \xi \in [0, z_i]$, $h(\xi)$ é uma função impluso; neste caso, $h(\xi) = \frac{-D_{j_n}}{A_n} \delta(\xi - H_s)$, e $G(z, \xi)$ é a função de *Green* definida por:

$$G(z, \xi) = \frac{y_2(z)y_1(\xi) - y_1(z)y_2(\xi)}{W[y_1(\xi), y_2(\xi)]} \quad (3.41)$$

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

$$W[y_1(\xi), y_2(\xi)] = \begin{vmatrix} y_1(\xi) & y_2(\xi) \\ y_1'(\xi) & y_2'(\xi) \end{vmatrix} \quad (3.42)$$

Como:

$$\begin{aligned} y_1(z) &= e^{\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} z} \\ y_2(z) &= e^{-\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} z} \end{aligned}$$

encontra-se $W[y_1(\xi), y_2(\xi)]$:

$$\begin{aligned} W[y_1(\xi), y_2(\xi)] &= \begin{vmatrix} e^{\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} & e^{-\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} \\ \sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} e^{\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} & -\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} e^{-\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} \end{vmatrix} \\ &= -\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \left(e^{\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} e^{-\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} \right) - \sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \left(e^{\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} e^{-\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}} \xi} \right) \\ &= -2\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

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

$$G(z, \xi) = \frac{e\left[-\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}}\right] z e\left[+\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}}\right] \xi - e\left[+\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}}\right] z e\left[-\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}}\right] \xi}{-2\sqrt{\frac{B_j n}{A_n}}} \quad (3.44)$$

Assim:

$$\begin{aligned}
F_{j n_P} &= \int_0^{z_i} \frac{e^{\left(-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}\right)z} e^{\left(+\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}\right)\xi} - e^{\left(+\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}\right)z} e^{\left(-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}\right)\xi}}{-2\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}} \left(\frac{-D_{j n}}{A_n} \delta(\xi - H_s)\right) d\xi \\
&= -\frac{-D_{j n}}{2\sqrt{B_{j n}A_n}} \left[e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}z} \left(\int_0^{z_i} e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}\xi} \delta(\xi - H_s) d\xi \right) - \right. \\
&\quad \left. e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}z} \left(\int_0^{z_i} e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}\xi} \delta(\xi - H_s) d\xi \right) \right] \\
&= \frac{D_{j n}}{2\sqrt{B_{j n}A_n}} \left[e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}z} e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}H_s} - e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}z} e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}H_s} \right] H(z - H_s) \\
&= \frac{D_{j n}}{2\sqrt{B_{j n}A_n}} \left[e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} \right] H(z - H_s) \tag{3.45}
\end{aligned}$$

onde H é a função de Heaviside.

3.4.3 Solução geral

Assim, com as equações encontradas em (3.39) e (3.45) a solução geral da equação (3.36) é:

$$F_{j n} = F_{j n_h} + F_{j n_P} \tag{3.46}$$

ou seja:

$$\begin{aligned}
F_{j n} &= C_{1_n} e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}z} + C_{2_n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}z} + \\
&\quad + \frac{D_{j n}}{2\sqrt{B_{j n}A_n}} \left[e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} \right] H(z - H_s) \tag{3.47}
\end{aligned}$$

Para se determinar as constantes C_{1_n} e C_{2_n} , aplica-se as $(2N - 2)$ condições de

continuidade de interface (3.25 e 3.26):

$$\begin{aligned}
\text{em } z = 0: & \quad K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j1}(s, 0) = 0 \\
\text{em } z = z_1: & \quad \begin{cases} \overline{c}_{j1}(s, z_1) = \overline{c}_{j2}(s, z_1) \\ K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j1}(s, z_1) = K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j2}(s, z_1) \end{cases} \\
\text{em } z = z_2: & \quad \begin{cases} \overline{c}_{j2}(s, z_2) = \overline{c}_{j3}(s, z_2) \\ K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j2}(s, z_2) = K_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j3}(s, z_2) \end{cases} \\
\text{em } z = z_3: & \quad \begin{cases} \overline{c}_{j3}(s, z_3) = \overline{c}_{j4}(s, z_3) \\ K_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j3}(s, z_3) = K_{z_4} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j4}(s, z_3) \end{cases} \\
\vdots & \quad \vdots \\
\text{em } z = z_{(N-1)}: & \quad \begin{cases} \overline{c}_{j(N-1)}(s, z_{(N-1)}) = \overline{c}_{jN}(s, z_{(N-1)}) \\ K_{z_{(N-1)}} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{j(N-1)}(s, z_{(N-1)}) = K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{jN}(s, z_{(N-1)}) \end{cases} \\
\text{em } z = z_i: & \quad K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \overline{c}_{jN}(s, z_i) = 0
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Com as expressões obtidas em (3.48) chega-se a um sistema linear de dimensão ($d = 2N$) dado por $\mathbf{MX}=\mathbf{b}$:

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & M_{46} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{53} & M_{54} & M_{55} & M_{56} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{65} & M_{66} & M_{67} & M_{68} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{75} & M_{76} & M_{77} & M_{78} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d-1,d-3} & M_{d-1,d-2} & M_{d-1,d-1} & M_{d-1,d} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d,d-1} & M_{d,d} \end{bmatrix} \tag{3.49}$$

$$\mathbf{X} = [C_{11} \quad C_{21} \quad C_{12} \quad C_{22} \quad C_{13} \quad C_{23} \quad \dots \quad \dots \quad C_{1N} \quad C_{2N}]^T \tag{3.50}$$

$$\mathbf{b} = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad -Sp_{n^*} \quad -Sp'_{n^*} \quad \dots \quad 0 \quad 0]^T \quad (3.51)$$

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

$$Sp_{j n^*} = \frac{D_{j n^*}}{2\sqrt{B_{j n^*} A_{n^*}}} \left[e^{-\sqrt{\frac{B_{j n^*}}{A_{n^*}}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j n^*}}{A_{n^*}}}(z-H_s)} \right] \quad (3.52)$$

$$Sp'_{j n^*} = \frac{D_{j n^*}}{2A_{n^*}} \left[e^{-\sqrt{\frac{B_{j n^*}}{A_{n^*}}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j n^*}}{A_{n^*}}}(z-H_s)} \right] \quad (3.53)$$

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

$$\begin{aligned} M_{11} &= R_{j 1} \\ M_{12} &= -R_{j 1} \end{aligned}$$

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

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

e, por fim:

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

onde:

$$R_{j n} = \sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}} \quad (3.54)$$

O sistema $\mathbf{MX}=\mathbf{b}$ é resolvido numericamente utilizando o método da *Eliminação de Gauss*.

Para se obter o valor de $\bar{c}_{j n}(x, z)$ é necessário aplicar a transformada inversa de Laplace na solução dada pela equação (3.47). Sendo assim obtem-se a seguinte solução integral para o problema proposto:

$$\begin{aligned} \bar{c}_{j n}(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{s x} \left[C_{1n} e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}} z} + C_{2n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}} z} + \right. \\ \left. + \frac{D_{j n}}{2\sqrt{B_{j n} A_n}} \left(e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} \right) H(z - H_s) \right] ds \quad (3.55) \end{aligned}$$

Agora já se pode escrever a expressão de $\bar{c}(x, y, z)$, voltando em (3.11):

$$\bar{c}_n(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_{j n}(x, z) \psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}};$$

uma vez que já se tem a expressão para $\psi_j(y)$ dada pela equação (3.14) e a expressão para $\bar{c}_{j n}(x, z)$ dada pela equação (3.55), assim:

$$\begin{aligned} \bar{c}_n(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{\sqrt{N_j}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{s x} \left[C_{1n} e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}} z} + C_{2n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}} z} + \right. \\ \left. + \frac{D_{j n}}{2\sqrt{B_{j n} A_n}} \left(e^{-\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j n}}{A_n}}(z-H_s)} \right) H(z - H_s) \right] ds \quad (3.56) \end{aligned}$$

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

É importante ressaltar que, nenhuma aproximação foi feita durante a derivação da solução (3.56) via **GIADMT** exceto a aproximação “*stepwise*”.

3.5 Inversão da Solução: *Quadratura de Gauss*

Devido a complexidade da integral de linha presente na solução dada pela equação (3.56), optou-se resolvê-la numericamente pelo método da *Quadratura de Gauss* face o caráter exponencial da solução pois sabe-se que este método não funciona bem para funções oscilatórias [Stroud e Secrest, 1966]. Desta forma, a solução (3.55) pode ser aproximada na forma:

$$\overline{c}_{j\ n}(x, z) = \mathcal{L}^{-1} \{F_{j\ n}(s, z)\} = \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k F_{j\ n} \left(\frac{P_k}{x}, z \right) \quad (3.57)$$

onde w_k e P_k são, respectivamente, os pesos e as raízes da *Quadratura de Gauss* e N_p representa o número de inversões.

Portanto:

$$\overline{c}_{j\ n}(x, z) = \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left(C_{1n} e^{\sqrt{\frac{B_{j\ n}^*}{A_n}} z} + C_{2n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j\ n}^*}{A_n}} z} \right) \quad (3.58)$$

onde não há fonte, e:

$$\overline{c}_{j\ n}(x, z) = \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left[\begin{aligned} & C_{1n} e^{\sqrt{\frac{B_{j\ n}^*}{A_n}} z} + C_{2n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j\ n}^*}{A_n}} z} + \\ & + \frac{D_{j\ n}^*}{2\sqrt{B_{j\ n}^* A_n}} \left(e^{-\sqrt{\frac{B_{j\ n}^*}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j\ n}^*}{A_n}}(z-H_s)} \right) H(z - H_s) \end{aligned} \right] \quad (3.59)$$

onde há emissão de fonte.

Sendo que:

$$B_{j\ n}^* = B_{j\ n}^* \left(\frac{P_k}{x} \right) = - \left(-\frac{\bar{u}_n \frac{P_k}{x}}{K_{x_n}} - \frac{K_{y_n}}{K_{x_n}} \lambda_j^2 + \left(\frac{P_k}{x} \right)^2 \right) \quad (3.60)$$

$$D_{j\ n}^* = D_{j\ n}^* \left(\frac{P_k}{x} \right) = - \left(\frac{Q}{\bar{u}_n} \frac{\psi_j(0)}{N_j^{1/2}} \right) \left(-\frac{\bar{u}_n}{K_{x_n}} + \frac{P_k}{x} \right)$$

Portanto, a concentração final em termos da *Quadratura Gaussiana* pode ser descrita como:

$$\bar{c}_n(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{N_j^{1/2}} \left\{ \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left[C_{1_n} e^{\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}} z} + C_{2_n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}} z} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{D_{j_n}^*}{2\sqrt{B_{j_n}^* A_n}} \left(e^{-\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}}(z-H_s)} \right) H(z - H_s) \right] \right\} \quad (3.61)$$

onde $H(z - H_s)$ é a função de Heaviside. A parte da equação (3.61) na qual aparece a Heaviside é considerada somente na subcamada que contém a fonte.

Esse método que combina o método **GITT** com o método **ADMM**, e que denominou-se **GIADMT**, é um método simples porque generaliza, a solução bidimensional resolvido pelo **ADMM** para o problema tridimensional. Da mesma forma, a solução tridimensional apresentada pode ser reduzida a solução bidimensional resolvida pelo método **ADMM**. Para tal integra-se lateralmente a solução (3.61), ou seja:

$$\bar{c}_n^y(x, z) = \int_0^{L_y} \bar{c}_n(x, y, z) dy \quad (3.62)$$

$$\begin{aligned} \bar{c}_n^y(x, z) &= \int_0^{L_y} \bar{c}_n(x, y, z) dy \\ &= \int_0^{L_y} \left[\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{N_j^{1/2}} \left\{ \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left[C_{1_n} e^{\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}} z} + C_{2_n} e^{-\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}} z} + \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{D_{j_n}^*}{2\sqrt{B_{j_n}^* A_n}} \left(e^{-\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{j_n}^*}{A_n}}(z-H_s)} \right) H(z - H_s) \right] \right\} \right] dy \quad (3.63) \end{aligned}$$

mas:

$$\int_0^{L_y} \frac{\cos(\lambda_j y)}{N_j^{1/2}} dy = \begin{cases} \int_0^{L_y} \frac{\cos(0)}{N_j^{1/2}} dy = \sqrt{L_y} & \text{para } j = 0 \\ \int_0^{L_y} \frac{\cos(\frac{j\pi}{L} y)}{N_j^{1/2}} dy = 0 & \text{para } j = 1, 2, \dots \end{cases} \quad (3.64)$$

daí:

$$\begin{aligned} \bar{c}^y(x, z) = \sqrt{L_y} \left\{ \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left[C_{1_n} e^{\sqrt{\frac{B_{0_n}^*}{A_n}} z} + C_{2_n} e^{-\sqrt{\frac{B_{0_n}^*}{A_n}} z} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{D_{0_n}^*}{2\sqrt{B_{0_n}^* A_n}} \left(e^{-\sqrt{\frac{B_{0_n}^*}{A_n}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{B_{0_n}^*}{A_n}}(z-H_s)} \right) H(z - H_s) \right] \right\} \quad (3.65) \end{aligned}$$

que é a solução bidimensional determinada pelo método **ADMM**.

3.6 Inversão pelo algoritmo de *Talbot*

Para testar o método de inversão da Transformada de Laplace pelo esquema da *Quadratura Gaussiana* apresentado, também resolveu-se o problema (3.56) pelo algoritmo de *Talbot* (também conhecido como FT algoritmo) proposto por Abate e Valkó [Abate e Valkó, 2004]. A justificativa por esta escolha decorre do fato que, segundo os autores, o algoritmo de *Talbot* é um método robusto de inversão pois fornece resultados com precisão de até M^* dígitos significativos (M^* representa o número de termos do somatório).

Dessa forma, a solução da integral que aparece na equação (3.56) pode ser descrita pelo método de *Talbot* como:

$$\begin{aligned} \bar{c}_n(x, y, z) = \\ = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{N_j^{1/2}} \left\{ \frac{r}{M^*} \left[\begin{aligned} & \frac{1}{2} \bar{c}_{j_n}(r, z) e^{rx} + \\ & + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re} \left[e^{x S(\theta_k)} \bar{c}_{j_n}(S(\theta_k), z) (1 + i\varpi(\theta_k)) \right] \end{aligned} \right] \right\} \quad (3.66) \end{aligned}$$

onde \bar{c}_{j_n} é definida pela equação (3.55), e os demais parâmetros são:

$$s(\theta_k) = r\theta(\cot\theta + i) \quad -\pi < \theta < +\pi \quad (3.67)$$

$$\varpi(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot\theta_k - 1) \cot\theta_k \quad (3.68)$$

$$\theta_k = \frac{k\pi}{M^*} \quad (3.69)$$

$i \in \mathbf{C}$ e r é um parâmetro experimental.

4. Fechamento Não-Fickiano

A simplicidade da teoria K na difusão turbulenta a tem tornado base na modelagem matemática da dispersão de poluentes. Mas a teoria K tem seus limites, em contraste com a difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente de escala. Isto quer dizer que a taxa de difusão de uma pluma de material é geralmente dependente da dimensão da pluma e da densidade da turbulência. Na medida que a pluma cresce grandes turbilhões são incorporados no processo de expansão, assim como progressivamente uma grande fração da energia cinética turbulenta é disponível para a expansão da pluma.

Outro problema é que a hipótese do transporte por gradiente é inconsistente com as características da difusão turbulenta na parte superior da camada de mistura, para os casos convectivos onde o fluxo de contragradiente ocorre [Deardoff e Willis, 1975]. Como os fluxos contragredientes são caracterizados pelas escalas dos grandes turbilhões presentes na camada limite, ao contrário dos de menores escalas, tais fluxos são freqüentemente chamados de fluxo não-local.

A teoria K é um método para parametrizar os efeitos da turbulência mista baseada em como os pequenos turbilhões serão quantidades misturadas através de um gradiente local das quantidades transportadas. Em algumas décadas atrás, já se percebeu que na parte superior da CLC o fluxo de temperatura potencial é ao contrário do gradiente de perfil de temperatura potencial do meio; [Deardoff, 1972b]. O gradiente de temperatura potencial do meio e o fluxo trocam de sinal em diferentes níveis introduzindo uma certa região na CLC, onde eles tem o mesmo sinal. Isto entra em contraste com fechamento da turbulência tradicional, de primeira ordem, pois ele, não leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência da CLC. Para descrever e caracterizar a difusão também nessa região, Ertel [Ertel, 1942] e Deardoff [Deardoff, 1966] [Deardoff, 1972a] propuseram modificar a aplicação usual do fluxo-gradiente na aproximação da teoria K, i.e., em vez da equação

(3.6), a expressão para o fluxo é dada por:

$$\overline{w'c'} = -K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right) \quad (4.1)$$

onde γ representa o termo contra-gradiente.

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

$$\left(1 + \frac{S_k \sigma_w T_{Lw}}{2} \frac{\partial}{\partial z} \right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (4.2)$$

onde S_k é a *assimetria (skewness)*, T_{Lw} é a escala de tempo Lagrangeana vertical e σ_w é o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical.

Assim, o problema de fechamento da turbulência foi solucionado sem obedecer a lei de Fick e, por isso também é chamado de não-Fickiano. Combinando equação (4.2) mais as equações (3.4) e (3.5) com a equação (3.3), considerando o modelo estacionário ($\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = 0$), e desprezando os componentes \bar{v} e \bar{w} do vento e o termo fonte S , tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = & K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \\ & -\bar{u} \left(\frac{S_k \sigma_w T_{Lw}}{2} \right) \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z \partial x} + K_x \left(\frac{S_k \sigma_w T_{Lw}}{2} \right) \frac{\partial^3 \bar{c}}{\partial z \partial x^2} + K_y \left(\frac{S_k \sigma_w T_{Lw}}{2} \right) \frac{\partial^3 \bar{c}}{\partial z \partial y^2} \end{aligned} \quad (4.3)$$

ou

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} - \bar{u} \beta \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z \partial x} + K_x \beta \frac{\partial^3 \bar{c}}{\partial z \partial x^2} + K_y \beta \frac{\partial^3 \bar{c}}{\partial z \partial y^2} \quad (4.4)$$

onde β representa os termos adicionais da equação:

$$\beta = \frac{S_k \sigma_w T_{L_w}}{2} \quad (4.5)$$

Esses termos adicionais que aparecem na equação (4.2) levam em conta o caráter não-local na dispersão, sendo assim, modelos não-Fickianos também são conhecidos como modelos com fechamento não-local. O caráter local indica que apenas partículas vizinhas se relacionam, enquanto que o caráter não-local significa que quaisquer partículas podem se relacionar entre si. A figura (4.1) abaixo mostra um diagrama destes processos:

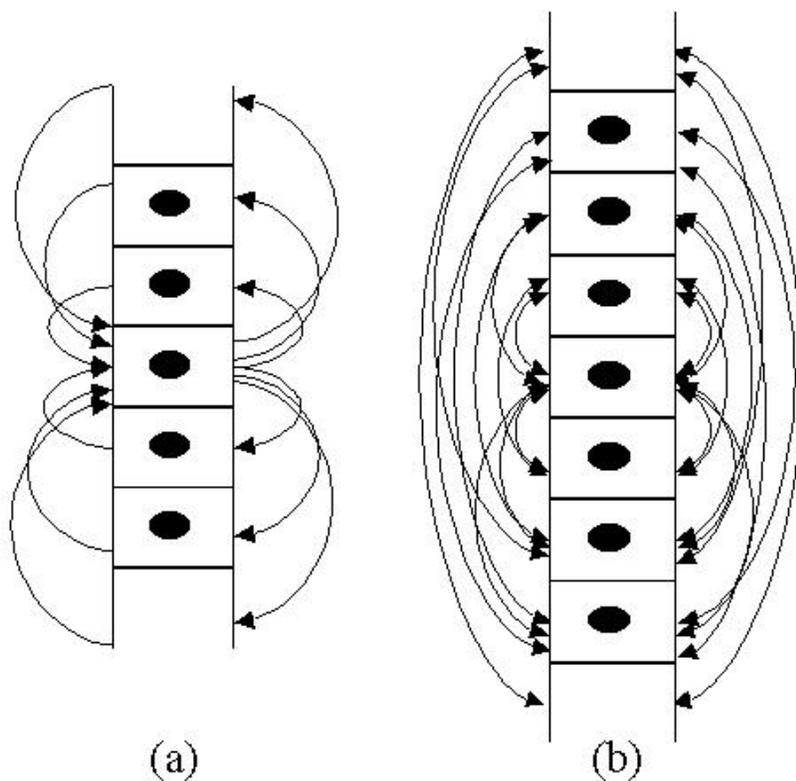


Figura 4.1 – (a) efeito local na dispersão e (b) efeito não-local na dispersão

Observa-se que quando $(S_k \rightarrow 0)$ na equação (4.4) tem-se que $(\beta \rightarrow 0)$, recaindo na equação original (3.10) que não considera o caráter não-local na dispersão de poluente. Dessa forma, o presente modelo estima de um modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta.

Sendo assim, o fechamento da turbulência não-Fickiano oportuniza investigar o efeito dos turbilhões mais energéticos em diferentes alturas e o efeito de transporte assimétrico no cálculo de concentração de poluentes considerando de um modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta. A turbulência, agora não é modelada apenas no coeficiente de difusão K_α .

O método de resolução é o mesmo que apresentado anteriormente, aplicando a técnica GILTT e depois o método ADMM.

4.1 Solução do problema não-Fickiano via GITT

As condições de contorno e de entrada para o problema não-Fickiano, dado pela equação (4.4), são as mesmas do problema (3.10), i.e., fluxo nulo no solo e no topo da CLC;

$$K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right) = 0 \quad em \quad z = 0, z_i \quad (4.4a)$$

supõe-se, L_y suficientemente grande, tal que o fluxo seja nulo em $y = L_y$, e concentração máxima em $y = 0$;

$$K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0 \quad em \quad y = 0, L_y \quad (4.4b)$$

e tem-se uma fonte contínua com taxa de emissão contínua Q na altura H_s , descrita por:

$$\bar{c}(0, y, z) = \frac{Q}{u} \delta(z - H_s) \delta(y) \quad em \quad x = 0. \quad (4.4c)$$

De maneira análoga à *seção 3.3*, postula-se que o potencial $\bar{c}(x, y, z)$ da equação (4.4) pode ser expresso como uma expansão em série de autofunções ortogonais $\psi_j(y)$ para a direção y onde j é a ordem dos correspondentes autovalores λ ,

$$\bar{c}(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_j(x, z) \psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.6)$$

onde, seguindo o formalismo do método GITT, $\psi_j(y) = \cos(\lambda_j y)$ e $\lambda_j = j\pi/L_y$, são, respectivamente, as autofunções e autovalores do problema auxiliar de Sturm-Liouville.

Substituindo (4.6) em (4.4) tem-se:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial x} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \beta \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial z \partial x} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} = \\
& = \sum_{j=0}^{\infty} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial x^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_y \bar{c}_j(x, z) \frac{\psi_j''(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j(x, z)}{\partial z^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} + \\
& \quad + \sum_{j=0}^{\infty} K_x \beta \frac{\partial^3 \bar{c}_j(x, z)}{\partial z \partial x^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_y \beta \frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial z} \frac{\psi_j''(y)}{N_j^{1/2}} \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Lembrando que: $\psi_j'' = -\lambda_j^2 \psi_j$ a equação (4.7) torna-se:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial x} \frac{\psi_j}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \beta \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial z \partial x} \frac{\psi_j}{N_j^{1/2}} = \\
& = \sum_{j=0}^{\infty} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial x^2} \frac{\psi_j}{N_j^{1/2}} - \sum_{j=0}^{\infty} K_y \lambda_j^2 \bar{c}_j \frac{\psi_j}{N_j^{1/2}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial z^2} \frac{\psi_j}{N_j^{1/2}} + \\
& \quad + \sum_{j=0}^{\infty} K_x \beta \frac{\partial^3 \bar{c}_j}{\partial z \partial x^2} \frac{\psi_j}{N_j^{1/2}} - \sum_{j=0}^{\infty} K_y \beta \lambda_j^2 \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial z} \frac{\psi_j}{N_j^{1/2}} \quad (4.8)
\end{aligned}$$

O próximo passo é aplicar o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} dy$ na equação (4.8). Assim:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j \psi_i}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy + \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u} \beta \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial z \partial x} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j \psi_i}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy = \\
& = \sum_{j=0}^{\infty} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial x^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j \psi_i}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy - \sum_{j=0}^{\infty} K_y \lambda_j^2 \bar{c}_j \int_0^{L_y} \frac{\psi_j \psi_i}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy + \\
& \quad + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial z^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j \psi_i}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy + \sum_{j=0}^{\infty} K_x \beta \frac{\partial^3 \bar{c}_j}{\partial z \partial x^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j \psi_i}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy + \\
& \quad - \sum_{j=0}^{\infty} K_y \beta \lambda_j^2 \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j \psi_i}{N_j^{1/2} N_i^{1/2}} dy \quad (4.9)
\end{aligned}$$

Pela ortogonalidade, as integrais acima valem 0 quando $i \neq j$ e valem 1 quando $i = j$. Assim, tem-se um sistema resultante representado por EDP's do mesmo tipo, tantas quanto forem o número de autovalores (N_a). Então a equação (4.9) pode ser escrita da

segue a forma:

$$-\bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial x^2} - K_y \lambda_j^2 \bar{c}_j + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial z^2} = \bar{u} \beta \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial z \partial x} - K_x \beta \frac{\partial^3 \bar{c}_j}{\partial z \partial x^2} + K_y \beta \lambda_j^2 \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial z} \quad (4.10)$$

onde $j = 0, 1, 2, \dots, (N_a - 1)$

Reescrevendo (4.10):

$$\begin{aligned} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial x^2} + K_x \beta \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial x^2} \right) - \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial x} - \bar{u} \beta \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \bar{c}_j}{\partial x} \right) + \\ - K_y \lambda_j^2 \bar{c}_j + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_j}{\partial z^2} - K_y \lambda_j^2 \beta \frac{\partial \bar{c}_j}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (4.11)$$

para $j = 1, 2, \dots, (N_a - 1)$.

Para tornar o sistema resultante (4.11) representável por EDP's, a variável independente, ou seja os coeficientes $\bar{c}_j(x, z)$ e suas derivadas, devem aparecer de forma explícita. Isso é conseguido através da propriedade da ortogonalidade das autofunções utilizadas na expansão. E por isso é fundamental que elas sejam ortogonais entre si.

Analogamente, aplica-se a técnica da GITT na condição de contorno e de entrada (4.4a), e (4.4c), e obtém-se:

$$\bar{c}_j(0, z) = \frac{Q \delta(z - Hs)}{\bar{u}} \frac{\psi_j(0)}{N_j^{1/2}} \quad (4.12)$$

para a condição de entrada, conforme descrito na seção **3.3**.

Para a condição de contorno dada pela equação (4.4c), o procedimento é análogo, primeiramente a variável $\bar{c}(x, y, z)$ para $z = 0, z_i$ é expandida usando-se a equação (4.4c) na equação (4.6):

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left[-K_z \left(\frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial z} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} - \gamma \right) \right] = 0 \quad (4.13)$$

Em seguida é usado o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} dy$, produzindo:

$$\sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y) \psi_j(y)}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} dy = K_z \gamma \int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} dy \quad (4.14)$$

Como as autofunções são ortogonais as integrais do lado esquerdo da equação (4.14) se anulam para $j \neq i$ e valem 1 quando $i = j$.

Já a integral do lado direito vale:

- Se $i = 0$

$$\int_0^{L_y} \frac{\psi_0(y)}{N_0^{1/2}} dy = \int_0^{L_y} \frac{1}{\sqrt{L_y}} dy = \left[\frac{y}{\sqrt{L_y}} \right]_0^{L_y} = \frac{L_y}{\sqrt{L_y}} = \sqrt{L_y}$$

- Se $i \neq 0$

$$\int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} dy = \int_0^{L_y} \frac{\cos(\lambda_i y)}{N_i^{1/2}} dy = \left[\frac{\text{sen}(\lambda_i y)}{\lambda_i \sqrt{N_i}} \right]_0^{L_y} = \frac{1}{\lambda_i} \left(\text{sen}(\lambda_i L_y) - \text{sen}(0) \right) = 0$$

Assim, a condição de contorno em $z = 0, z_i$ para o fechamento não-local vale:

$$-K_z \left(\frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial z} - \sqrt{L_y} \gamma \right) = 0 \quad \text{quando } j = 0 \quad (4.15)$$

$$-K_z \left(\frac{\partial \bar{c}_j(x, z)}{\partial z} \right) = 0 \quad \text{quando } j \neq 0 \quad (4.16)$$

4.2 Solução do problema não-Fickiano transformado via ADMM

Para resolver a equação de difusão-advecção (4.11) para uma turbulência não-homogênea, deve-se considerar que a velocidade do vento e os parâmetros turbulentos variam com a altura (variável z) segundo uma parametrização especificada. Portanto utiliza-se agora o método **ADMM** discretizando a CLP em N subcamadas, assim, têm-se N equações do mesmo tipo para ser resolvidas, uma para cada subcamada.

Considerando a dependência dos parâmetros turbulentos com a variável z , calcula-se um valor médio para cada um deles em cada subcamada:

$$\begin{aligned}
K_{\alpha_n} &= \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} K_{\alpha}(z) dz \\
\bar{u}_n &= \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} \bar{u}_z(z) dz \\
\beta_n &= \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} \beta_z(z) dz
\end{aligned} \tag{4.17}$$

onde α indica a direção x , y , ou z do coeficiente de difusão, e n indica a subcamada e varia de $n = 1, 2, \dots, N$

Dessa forma, a equação (4.11) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
K_{x_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}}{\partial x^2} + K_{x_n} \beta_n \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}}{\partial x^2} \right) - \bar{u}_n \frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial x} - \bar{u}_n \beta_n \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial x} \right) + \\
- K_{y_n} \lambda_j^2 \bar{c}_{j n} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}}{\partial z^2} - K_{y_n} \lambda_j^2 \beta_n \frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial z} = 0 \tag{4.18}
\end{aligned}$$

sujeita às condições de contorno e entrada:

$$K_{z_n} \left(\frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial z} - \sqrt{L_y} \gamma_n \right) = 0 \quad \text{em } z = 0, z_i \text{ quando } j = 0 \tag{4.18a}$$

$$- K_z \left(\frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial z} \right) = 0 \quad \text{em } z = 0, z_i \text{ quando } j \neq 0$$

$$\bar{c}_{j n}(0, z) = \frac{Q \delta(z - Hs)}{\bar{u}_n} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}} \quad \text{em } x = 0 \tag{4.18b}$$

e as condições de interface:

$$\bar{c}_{j n} = \bar{c}_{j n+1} \quad \text{em } z = z_n \text{ e } n = 1, 2, \dots, (N - 1) \tag{4.18c}$$

$$K_{z_n} \left(\frac{\partial \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial z} - \gamma_n \right) = K_{z_{n+1}} \left(\frac{\partial \overline{\overline{c_{j n+1}}}}{\partial z} - \gamma_{n+1} \right) \quad \text{em } z = z_n \quad e \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (4.18d)$$

Aplica-se, agora a transformada de Laplace em x na equação (4.18). Denotando: $\mathcal{L} \{ \overline{\overline{c_{j n}}}(x, z) \} = F_{j n}(s, z) = F_{j n}$, assim:

$$\begin{aligned} K_{x_n} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial x^2} \right\} + K_{x_n} \mathcal{L} \left\{ \beta_n \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial x^2} \right) \right\} - \mathcal{L} \left\{ \overline{u_n} \frac{\partial \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial x} \right\} - \mathcal{L} \left\{ \overline{u_n} \beta_n \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial x} \right) \right\} + \\ - \mathcal{L} \left\{ K_{y_n} \lambda_j^2 \overline{\overline{c_{j n}}} \right\} + \mathcal{L} \left\{ K_{z_n} \frac{\partial^2 \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial z^2} \right\} - \mathcal{L} \left\{ K_{y_n} \lambda_j^2 \beta_n \frac{\partial \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial z} \right\} = 0 \quad (4.19) \end{aligned}$$

ou seja:

$$\begin{aligned} K_{x_n} \left[s^2 F_{j n}(s, z) - s \overline{\overline{c_{j n}}}(0, z) - \frac{\partial \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial x} \Big|_{x=0} \right] + \\ + K_{x_n} \beta_n \frac{\partial}{\partial z} \left[s^2 F_{j n}(s, z) - s \overline{\overline{c_{j n}}}(0, z) - \frac{\partial \overline{\overline{c_{j n}}}}{\partial x} \Big|_{x=0} \right] - \\ - \overline{u_n} [s F_{j n}(s, z) - \overline{\overline{c_{j n}}}(0, z)] - \overline{u_n} \beta_n \frac{\partial}{\partial z} [s F_{j n}(s, z) - \overline{\overline{c_{j n}}}(0, z)] + \\ - K_{y_n} \lambda_j^2 [F_{j n}(s, z)] + K_{z_n} \left[\frac{\partial^2 F_{j n}(s, z)}{\partial z^2} \right] - K_{y_n} \lambda_j^2 \beta_n \frac{\partial F_{j n}(s, z)}{\partial z} = 0 \quad (4.20) \end{aligned}$$

reordenando e aplicando a condição de entrada (??)

$$\begin{aligned} K_{z_n} \frac{\partial^2 F_{j n}}{\partial z^2} + \left(K_{x_n} s^2 \beta_n - \overline{u_n} \beta_n s - K_{y_n} \lambda_j^2 \beta_n \right) \frac{\partial F_{j n}}{\partial z} + \\ + \left(K_{x_n} s^2 - \overline{u_n} s - K_{y_n} \lambda_j^2 \right) F_{j n} = - \left(\overline{u_n} - K_{x_n} s \right) \frac{Q}{\overline{u_n}} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}} \delta(z - Hs) \quad (4.21) \end{aligned}$$

Para facilitar a notação, define-se:

$$A_{j n} = \left(\frac{K_{x_n}}{K_{z_n}} \right) \left(s^2 \beta_n - \frac{\overline{u_n} \beta_n s}{K_{x_n}} - \frac{K_{y_n} \lambda_j^2 \beta_n}{K_{x_n}} \right)$$

$$\begin{aligned}
B_{j\ n} &= \left(\frac{K_{x_n}}{K_{z_n}} \right) \left(s^2 - \frac{\bar{u}_n s}{K_{x_n}} - \frac{K_{y_n} \lambda_j^2}{K_{x_n}} \right) \\
D_{j\ n} &= - \left(\frac{K_{x_n}}{K_{z_n}} \right) \left(s - \frac{\bar{u}_n}{K_{x_n}} \right) \frac{Q}{\bar{u}_n} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}}
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Reescrevendo a equação (4.21)

$$\frac{\partial^2 F_{j\ n}}{\partial z^2} + A_{j\ n} \frac{\partial F_{j\ n}}{\partial z} + B_{j\ n} F_{j\ n} = -D_{j\ n} \delta(z - H_s) \tag{4.23}$$

A equação (4.23) é uma equação diferencial ordinária com coeficientes constantes, facilmente resolvida. Sua solução geral é dada por:

$$F_{j\ n} = F_{j\ n_h} + F_{j\ n_p}$$

onde $F_{j\ n_h}$ é a solução da equação homogênea associada e $F_{j\ n_p}$ é a solução particular.

De modo análogo realizado anteriormente, chega-se:

$$F_{j\ n_h} = C_{1\ n} e^{(A_{j\ n} + \sqrt{A_{j\ n}^2 - 4B_{j\ n}})z} + C_{2\ n} e^{(A_{j\ n} - \sqrt{A_{j\ n}^2 - 4B_{j\ n}})z} \tag{4.24}$$

e

$$F_{j\ n_p} = \frac{D_{j\ n}}{2\sqrt{A_{j\ n}^2 - 4B_{j\ n}}} \left[\begin{array}{c} e^{(A_{j\ n} - \sqrt{A_{j\ n}^2 - 4B_{j\ n}})(z - H_s)} + \\ -e^{(A_{j\ n} + \sqrt{A_{j\ n}^2 - 4B_{j\ n}})(z - H_s)} \end{array} \right] H(z - H_s) \tag{4.25}$$

onde $H(z - H_s)$ é a função de Heaviside.

Dessa forma, a expressão da solução da equação (4.23) é dada por:

$$F_{j n}(s, z) = C_{1 n} e^{(A_{j n} + \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})z} + C_{2 n} e^{(A_{j n} - \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})z} +$$

$$+ \frac{D_{j n}}{2\sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}}} \left[\begin{array}{c} e^{(A_{j n} - \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})(z - H_s)} + \\ - e^{(A_{j n} + \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})(z - H_s)} \end{array} \right] H(z - H_s) \quad (4.26)$$

Para se determinar as constantes $C_{1 n}$ e $C_{2 n}$ aplica-se as condições de contorno em z (4.18a) e as $(2N - 2)$ condições de continuidade de interface (4.18c) e (4.18d) e resolve-se o sistema linear de dimensão $2N$.

Para se obter o valor de $\bar{c}_{j n}(x, z)$ é necessário aplicar a transformada inversa de Laplace na solução dada pela equação (4.26). Sendo assim obtem-se a seguinte solução integral para o problema proposto:

$$\bar{c}_{j n}(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi - i\infty}^{\xi + i\infty} e^{s x} \left\{ C_{1 n} e^{(A_{j n} + \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})z} + C_{2 n} e^{(A_{j n} - \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})z} + \right.$$

$$\left. + \frac{D_{j n}}{2\sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}^*}} \left[\begin{array}{c} e^{(A_{j n} - \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})(z - H_s)} + \\ - e^{(A_{j n} + \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})(z - H_s)} \end{array} \right] H(z - H_s) \right\} ds \quad (4.27)$$

Após a resolução do sistema de EDP's (4.11) e determinação de $\bar{c}_{j n}(x, z)$ dado pela equação (4.27), é que o potencial original é recuperado através da inversa (4.6), sendo assim:

$$\bar{c}_n(x, y, z) =$$

$$= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{\sqrt{N_j}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi - i\infty}^{\xi + i\infty} e^{s x} \left\{ C_{1 n} e^{(A_{j n} + \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})z} + C_{2 n} e^{(A_{j n} - \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})z} + \right.$$

$$\left. + \frac{D_{j n}}{2\sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}}} \left[\begin{array}{c} e^{(A_{j n} - \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})(z - H_s)} + \\ - e^{(A_{j n} + \sqrt{A_{j n}^2 - 4B_{j n}})(z - H_s)} \end{array} \right] H(z - H_s) \right\} ds \quad (4.28)$$

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

Deve-se notar que quando $(\beta \rightarrow 0)$ a solução encontrada dada pela equação (4.28) se reduz, como esperado, à solução dada pela equação (3.56).

4.3 Inversão da Solução com Fechamento Não-local

A inversão obtida numericamente através do esquema da *Quadratura de Gauss* [Stroud e Secrest, 1966], pode ser escrita como:

$$\overline{\bar{c}}_{j n}(x, z) = \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left[C_{1 n} e^{\left(A_{j n}^* + \sqrt{A_{j n}^{*2} - 4B_{j n}^*}\right)z} + C_{2 n} e^{\left(A_{j n}^* - \sqrt{A_{j n}^{*2} - 4B_{j n}^*}\right)z} \right] \quad (4.29)$$

onde não há fonte, e:

$$\begin{aligned} \overline{\bar{c}}_{j n}(x, z) = \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left\{ C_{1 n} e^{\left(A_{j n}^* + \sqrt{A_{j n}^{*2} - 4B_{j n}^*}\right)z} + C_{2 n} e^{\left(A_{j n}^* - \sqrt{A_{j n}^{*2} - 4B_{j n}^*}\right)z} + \right. \\ \left. + \frac{D_{j n}^*}{2\sqrt{A_{j n}^{*2} - 4B_{j n}^*}} \left[\begin{array}{c} e^{\left(A_{j n}^* - \sqrt{A_{j n}^{*2} - 4B_{j n}^*}\right)(z-H_s)} + \\ - e^{\left(A_{j n}^* + \sqrt{A_{j n}^{*2} - 4B_{j n}^*}\right)(z-H_s)} \end{array} \right] H(z - H_s) \right\} \quad (4.30) \end{aligned}$$

onde há emissão de fonte. Os parâmetros w_k e P_k são, respectivamente, os pesos e as raízes da *Quadratura de Gauss* e N_p representa o número de inversões.

Sendo que:

$$\begin{aligned} A_{j n}^* &= \left(\frac{K_{x_n}}{K_{z_n}} \right) \left[\left(\frac{P_k}{x} \right)^2 \beta_n - \frac{\bar{u}_n \beta_n \frac{P_k}{x}}{K_{x_n}} + \frac{K_{y_n} \lambda_j^2 \beta_n}{K_{x_n}} \right] \\ B_{j n}^* &= \left(\frac{K_{x_n}}{K_{z_n}} \right) \left[\left(\frac{P_k}{x} \right)^2 - \frac{\bar{u}_n \frac{P_k}{x}}{K_{x_n}} - \frac{K_{y_n} \lambda_j^2}{K_{x_n}} \right] \\ D_{j n}^* &= - \left(\frac{K_{x_n}}{K_{z_n}} \right) \left(\frac{P_k}{x} - \frac{\bar{u}_n}{K_{x_n}} \right) \left(\frac{Q \psi_j(y_0)}{\bar{u}_n N_j^{1/2}} \right) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Uma vez que já se tem a expressão para ψ_j ($\psi_j(y) = \cos(\lambda_j y)$, dada pela resolução do problema de Sturm-Liouville) e a expressão para $\overline{\bar{c}}_{j n}(x, z)$ dada pela equação (4.30), já

se pode escrever a expressão de $\bar{c}(x, y, z)$:

$$\begin{aligned} \bar{c}_n(x, y, z) = & \\ = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{N_j^{1/2}} & \left\{ \sum_{k=1}^{N_p} \frac{P_k}{x} w_k \left[C_{1n} e^{\left(A_{jn}^* + \sqrt{A_{jn}^{*2} - 4B_{jn}^*}\right)z} + C_{2n} e^{\left(A_{jn}^* - \sqrt{A_{jn}^{*2} - 4B_{jn}^*}\right)z} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{D_{jn}^*}{2\sqrt{A_{jn}^{*2} - 4B_{jn}^*}} \left(\begin{array}{c} e^{(A_{jn} - \sqrt{A_{jn}^2 - 4B_{jn}})(z-H_s)} + \\ - e^{(A_{jn} + \sqrt{A_{jn}^2 - 4B_{jn}})(z-H_s)} \end{array} \right) H(z - H_s) \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.32)$$

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

O fato de considerar-se o termo de contra-gradiente no fechamento da turbulência fez surgir termos adicionais na equação de difusão-advecção. Estes termos levam consigo informações sobre o transporte assimétrico na CLC. Isto é um aspecto importante, pois agora o caráter não-local é modelado não somente no coeficiente de difusão, mas também com termos pertencentes à equação diferencial.

Adicionalmente, deve-se salientar que da mesma forma do fechamento Fickiano, a solução (4.32) ao ser integrada lateralmente, também recai no caso bidimensional.

A inversão obtida numericamente através do algoritmo de *Talbot* [Abate e Valkó, 2004], pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \bar{c}_n(x, y, z) = & \\ = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\cos(\lambda_j y)}{N_j^{1/2}} & \left\{ \frac{r}{M^*} \left[\begin{array}{c} \frac{1}{2} \bar{c}_{jn}(r, z) e^{rx} + \\ + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re} \left[e^{x S(\theta_k)} \bar{c}_{jn}(S(\theta_k), z) (1 + i\varpi(\theta_k)) \right] \end{array} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde \bar{c}_{jn} é definida pela equação (4.27), e os demais parâmetros são:

$$S(\theta_k) = r\theta_k (\cot\theta_k + i) \quad -\pi < \theta_k < +\pi \quad (4.34)$$

$$\varpi(\theta_k) = \theta_k + (\cot\theta_k - 1) \cot\theta_k \quad (4.35)$$

$$\theta_k = \frac{k \pi}{M^*} \quad (4.36)$$

$$r = \frac{2M^*}{5x} \quad (4.37)$$

$i \in \mathbf{C}$ e r é um parametro experimental.

5. Solução analítica tridimensional transiente para a dispersão de poluentes

Considerando que um poluente é liberado com intensidade Q a uma taxa constante de uma fonte a uma altura H_s sem qualquer empuxo, num espaço tridimensional. As velocidades do vento e as difusividades turbulentas variam com a altura acima do solo. Pretende-se determinar a concentração do poluente em qualquer local e tempo após o início de sua liberação no espaço tridimensional.

A equação de difusão-advecção tridimensional não estacionária que modela a poluição do ar na atmosfera, onde o eixo x é alinhado com a direção do vento, o eixo y é orientado na direção lateral (“*crosswind direction*”) e o eixo z é a altura acima do solo, pode ser expressa, conforme já descrito no capítulo 3, pela equação (3.3):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S \quad (5.1)$$

onde \bar{c} é a concentração média de poluentes, \bar{u} , \bar{v} , \bar{w} são as componentes do vento médio na direção x , y e z respectivamente, e $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam os fluxos turbulentos de poluentes nas direções longitudinal, lateral e vertical e S o termo fonte.

Segundo a lei de Fick (ou fechamento local) assume-se que os fluxos turbulentos são proporcionais ao gradiente de concentração média:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (5.2)$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \quad (5.3)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (5.4)$$

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta nas direções x , y e z respectivamente, responsáveis pela complexidade da turbulência.

Desta forma, introduzindo-se as equações (5.2), (5.3) e (5.4) na equação (5.1) obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (5.5)$$

para $t > 0$, $0 < z < z_i$, $0 < y < L_y$ e $x > 0$, onde z_i é a altura da CLP e L_y é o limite positivo considerado no eixo y suficientemente distante da fonte.

Como a componente vertical do vento é muito menor que a demais componentes, ela pode ser desprezada assim ($\bar{w} = 0$), e por comodidade, considera-se o perfil de velocidade do vento apenas na direção do eixo x , ou seja, ($\bar{v} = 0$).

Ainda, no presente trabalho não são consideradas condições de vento fraco, ou seja, se negligencia a difusão na direção de x i.é., ($K_x = 0$). E o termo fonte é considerado como condição de entrada em $x = 0$. Sendo assim a equação (5.5) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (5.6)$$

Assume-se que no começo da liberação de poluentes a região de dispersão não está contaminada, ou seja:

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = 0 \quad em \quad t = 0 \quad (5.6a)$$

Considera-se também, fluxo nulo na direção z no solo e no topo da CLP assim como na direção y em $y = 0, L_y$:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0, z_i \quad (5.6b)$$

$$K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0 \quad em \quad y = 0, L_y \quad (5.6c)$$

Finalmente, assume-se uma fonte pontual continua com taxa de emissão constante Q descrita como:

$$\bar{u} \bar{c}(0, y, z, t) = Q \delta(z - H_s) \delta(y) \quad em \quad x = 0 \quad (5.6d)$$

onde δ é a função generalizada Delta de Dirac e H_s indica a altura da fonte.

A equação (5.6) é resolvida aplicando a Transformada de Laplace na variável temporal e o método **GIADMT**, descrito no capítulo 3, para resolver o problema estacionário resultante da transformação integral.

Para resolver a equação de difusão-advecção (5.6) para uma turbulência não homogênea, deve-se levar em consideração a dependência dos coeficientes difusivos e do perfil da velocidade do vento \bar{u} com relação a variável z , e a altura z_i da CLP. Portanto, de maneira análoga ao que foi feito na seção 3.4, utiliza-se a idéia do método **ADMM** onde calcula-se esses parâmetros pela aproximação *stepwise* [Costa et al., 2006] [Moreira et al., 2006b]. Para tanto, discretiza-se a altura z_i da CLP em N subintervalos de maneira que em cada subcamada os coeficientes difusivos e o perfil da velocidade do vento assumem valores médios (equação (3.23)).

Sendo assim, agora já é possível reescrever o problema (5.6) como um conjunto de problemas difusivos-advectivos com valores médios dos parâmetros que dependem da altura que para uma subcamada genérica pode ser lido como:

$$\frac{\partial \bar{c}_n(x, y, z, t)}{\partial t} + \bar{u}_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, y, z, t)}{\partial x} = K_{y_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, y, z, t)}{\partial y^2} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, y, z, t)}{\partial z^2} \quad (5.7)$$

para $t > 0$; $x > 0$; $0 < y < L_y$; $z_{n-1} \leq z \leq z_n$ e $n = 1, 2, \dots, N$, onde N denota o número total de subcamadas e \bar{c}_n representa a concentração na n -ésima subcamada.

Com condições inicial e de contorno dadas por:

$$\bar{c}_n(x, y, z, 0) = 0 \quad em \quad t = 0 \quad e \quad n = 1, \dots, N \quad (5.7a)$$

$$K_{y_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y \text{ e } n = 1, \dots, N \quad (5.7b)$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } n = 1 \text{ ou } z = z_i \text{ e } n = N \quad (5.7c)$$

E condição de fonte:

$$\bar{u} \bar{c}(0, y, z, t) = Q \delta(z - H_s) \delta(y) \quad \text{em } x = 0 \text{ e } n = n^* \quad (5.7d)$$

onde n^* representa a região de emissão.

Além disso, com as duas condições de contorno impostas em $z = 0$ e $n = 1$ ou $z = z_i$ e $n = N$ dadas pela equação (5.7c) tem-se as $(2N - 2)$ condições de continuidade e fluxo de concentração nas interfaces, dadas por:

$$\bar{c}_n = \bar{c}_{n+1} \quad z = z_n \text{ e } n = 1, 2, \dots, (N - 1) \quad (5.7e)$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \frac{\partial \bar{c}_{n+1}}{\partial z} \quad z = z_n \text{ e } n = 1, 2, \dots, (N - 1) \quad (5.7f)$$

que precisam ser consideradas afim de possibilitar a determinação única das $2N$ constantes arbitrárias que aparecem na solução do conjunto de problemas (5.7).

Agora, aplica-se a Transformada de Laplace no conjunto de equações (5.7), no tempo: $\mathcal{L} \{ \bar{c}_n(x, y, z, t) \} = \Gamma_n(x, y, z, \gamma)$. Este procedimento produz o seguinte problema estacionário:

$$\begin{aligned} & \left[\gamma \Gamma_n(x, y, z, \gamma) - \bar{c}_n(x, y, z, 0) \right] + \bar{u}_n \frac{\partial \Gamma_n(x, y, z, \gamma)}{\partial x} = \\ & = K_{y_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n(x, y, z, \gamma)}{\partial y^2} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n(x, y, z, \gamma)}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} \gamma \Gamma_n(x, y, z, \gamma) + \bar{u}_n \frac{\partial \Gamma_n(x, y, z, \gamma)}{\partial x} &= \\ &= K_{y_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n(x, y, z, \gamma)}{\partial y^2} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n(x, y, z, \gamma)}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (5.9)$$

$$\gamma \Gamma_n + \bar{u}_n \frac{\partial \Gamma_n}{\partial x} = K_{y_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n}{\partial y^2} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n}{\partial z^2} \quad (5.10)$$

$$\bar{u}_n \frac{\partial \Gamma_n}{\partial x} = K_{y_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n}{\partial y^2} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \Gamma_n}{\partial z^2} - \gamma \Gamma_n \quad (5.11)$$

A equação de difusão-advecção tridimensional estacionária já foi resolvida pelo método **GIADMT** no capítulo **3**. Neste capítulo tem-se a vantagem de ter a bem conhecida solução do problem estacionário pelo método **GIADMT** [Costa et al., 2006]. Neste ponto, seguindo a idéia do método apresentado no capítulo **3** e os trabalhos de Costa et al. [Costa et al., 2006] e Moreira et al. [Moreira et al., 2006b], já se pode então resolver o problema (5.11) pelo método **GIADMT**. Para tanto, expande-se a solução em séries:

$$\Gamma_n(x, y, z, \gamma) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_{j n}(x, z, \gamma) \psi_j(y)}{\sqrt{N_j}}. \quad (5.12)$$

onde, como no método *GITT*, $\psi_j(y) = \cos(\lambda_j y)$ e $\lambda_j = j\pi/L_y$ são respectivamente as autofunções e os autovalores.

Substituindo a equação (5.12) na equação (5.11) tem-se:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u}_n \frac{\partial \bar{c}_{j n}(x, z, \gamma)}{\partial x} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} &= \sum_{j=0}^{\infty} K_{y_n} \bar{c}_{j n}(x, z, \gamma) \frac{\psi_j''(y)}{N_j^{1/2}} + \\ &+ \sum_{j=0}^{\infty} K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_{j n}(x, z, \gamma)}{\partial z^2} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} - \gamma \sum_{j=0}^{\infty} \bar{c}_{j n}(x, z, \gamma) \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} \end{aligned} \quad (5.13)$$

Tomando momentos e resolvendo o problema transformado resultante aplicando a técnica da Transformada de Laplace na variável x obtem-se:

$$K_{z_n} \frac{d^2 \bar{c}_{j_n}(s, z, \gamma)}{dz^2} - (s u_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma) \bar{c}_{j_n}(s, z, \gamma) = - \left(\frac{1}{\gamma} \frac{\psi_j(y_0)}{N_j^{1/2}} \right) Q \delta(z - H_s) \quad (5.14)$$

que possui a bem conhecida solução:

$$\bar{c}_{j_n}(s, z, \gamma) = C_{1_n} e^{R_{j_n} z} + C_{2_n} e^{-R_{j_n} z} + \frac{Q}{2R_{a_{nj}}} \left[e^{R_{j_n} (z-H_s)} - e^{-R_{j_n} (z-H_s)} \right] H(z - H_s) \quad (5.15)$$

onde c_{j_n} com barra dupla (\bar{c}_{j_n}) denota a transformada de Laplace de \bar{c}_{j_n} na variavel x e os parâmetros são definidos como:

$$R_{j_n} = \sqrt{\frac{s u_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma}{K_{z_n}}} \quad (5.16)$$

$$R_{a_{nj}} = \frac{\gamma}{\psi_j(y_0)} \sqrt{N_j K_{z_n} (s u_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma)} \quad (5.17)$$

Portanto obtem-se os coeficientes da solução em série dada pela equação (5.12) aplicando a inversa de Laplace na solução do problema transformado dada pela equação (5.15). Este procedimento resulta em:

$$\bar{c}_n(x, z, \gamma) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{s x} \left\{ \begin{array}{l} C_{1_n} e^{R_{j_n} z} + C_{2_n} e^{-R_{j_n} z} + \\ + \frac{Q}{2R_{a_{nj}}} \left[e^{R_{j_n} (z-H_s)} - e^{-R_{j_n} (z-H_s)} \right] H(z - H_s) \end{array} \right\} ds \quad (5.18)$$

Aplica-se as condições de contorno (equação (5.7c)) e interface (equações (5.7e) e (5.7f)) para determinar as constantes de integração desconhecidas C_{1_n} e C_{2_n} resolvendo um

sistema linear. Uma vez que os coeficientes \bar{c}_n são conhecidos a solução para o problema estacionário obtido através da transformada de Laplace tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \Gamma_n(x, y, z, \gamma) &= \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{s x} \left\{ \begin{aligned} &C_{1n} e^{R_{jn} z} + C_{2n} e^{-R_{jn} z} + \\ &+ \frac{Q}{2R_{anj}} \left[e^{R_{jn} (z-H_s)} - e^{-R_{jn} (z-H_s)} \right] H(z - H_s) \end{aligned} \right\} ds \end{aligned} \quad (5.19)$$

Para obter a solução do problema (5.7) precisa-se aplicar mais uma vez a transformada inversa de Laplace no problema estacionário acima obtido através da transformada de Laplace, por esse procedimento tem-se:

$$\begin{aligned} c_n(x, y, z, t) &= \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\zeta-i\infty}^{\zeta+i\infty} e^{\gamma t} \left\{ \begin{aligned} &\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{s x} \left[C_{1n} e^{R_{jn} z} + C_{2n} e^{-R_{jn} z} + \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{Q}{2R_{anj}} \left(e^{R_{jn} (z-H_s)} - e^{-R_{jn} (z-H_s)} \right) H(z - H_s) \right] ds \right\} \end{aligned} \right\} d\gamma \end{aligned} \quad (5.20)$$

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

5.1 Inversão da Solução

Para calcular as integrais de linha presentes na solução dada pela equação (5.20), foi utilizado a dupla integração numérica dada pelo algoritmo de *Talbot* (FT) [Abate e Valkó, 2004] na variável x e pelo esquema da *Quadratura de Gauss* [Stroud e Secrest, 1966] na variável t (tempo). Sendo assim a solução dada pela equação (5.20) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
c_n(x, y, z, t) &= \\
&= \sum_{v=1}^{N_v} A_v \frac{P_v}{t} \left\{ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \left[\frac{r}{M^*} \left(\begin{aligned} &\left(\frac{1}{2} \overline{\bar{c}}_{j n} \left(r, z, \frac{P_v}{t} \right) e^{r x} + \right. \right. \\ &+ \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re} \left[\begin{aligned} &e^{x S(\theta_k)} \cdot (1 + i \varpi(\theta_k)) \cdot \\ &\cdot \overline{\bar{c}}_{j n} \left(S(\theta_k), z, \frac{P_v}{t} \right) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right) \right] \right\} \quad (5.21)
\end{aligned}$$

$\overline{\bar{c}}_{j n}$ é determinada pela equação (5.15) sendo que $(s \rightarrow S(\theta_k))$ e $(\gamma \rightarrow \frac{P_v}{t})$, onde $R_{j n}$ e $R_{a_{nj}}$ assumem os seguintes valores:

$$R_{j n} = \sqrt{\frac{S(\theta_k) u_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \frac{P_v}{t}}{K_{z_n}}} \quad (5.22)$$

$$R_{a_{nj}} = \frac{P_v}{t} \frac{1}{\psi_j(y_0)} \sqrt{N_j K_{z_n} (S(\theta_k) u_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \frac{P_v}{t})} \quad (5.23)$$

os demais parâmetros são definidos por:

$$S(\theta_k) = r \theta_k (\cot \theta_k + i) \quad -\pi < \theta_k < +\pi \quad (5.24)$$

$$\varpi(\theta_k) = \theta_k + (\cot \theta_k - 1) \cot \theta_k \quad (5.25)$$

$$\theta_k = \frac{k \pi}{M^*} \quad (5.26)$$

$$r = \frac{2M^*}{5x} \quad (5.27)$$

r é um parâmetro experimental, as constantes A_v e P_v são os pesos e as raízes da *Quadratura*

Gaussiana, valores tabelados no livro de Stroud and Secrest (1966) [Stroud e Secrest, 1966] enquanto N_v é o número de pontos da quadratura.

Portanto a equação (5.21) é a solução final do problema difusivo-advectivo tridimensional não estacionário que modela a poluição do ar na atmosfera descrito pela equação (5.7).

6. Tratamento não-fickiano para o caso tridimensional dependente do tempo

De forma análoga ao capítulo 4 para descrever e caracterizar a o transporte assimétrico na dispersão de poluentes dependente do tempo, usou-se a parametrização proposta por van Dop e Verner [van Dop e Verver, 2001] que é baseada no trabalho de Wyngaard e Weil [Wyngaard e Weil, 1991]. O problema de fechamento da turbulência na equação de difusão-advecção é modificado considerando-se uma equação genérica para a difusão turbulenta de forma que o fluxo vertical turbulento de concentração mais a sua derivada é proporcional ao gradiente médio. Dessa forma, o termo de contra-gradiente utilizado para o caso dependente do tempo pode ser descrito como:

$$\left(1 + \beta \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial z}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (6.1)$$

onde:

$$\beta = \frac{S_k \sigma_w T_{L_w}}{2} \quad (6.2)$$

sendo S_k é a *assimetria (skewness)*, T_{L_w} é a escala de tempo Lagrangeana vertical, σ_w é o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical e τ é o tempo de relaxação. Os dois últimos termos do lado esquerdo da equação (6.1) representam o termo contra-gradiente não-local para o caso transiente como proposto por van Dop e Verver [Nieuwstadt e Van Ulden, 1978] e ele é obtido aplicando uma expansão de Taylor ao fluxo turbulento [Wyngaard e Weil, 1991].

Combinando a equação (5.1), considerando que as componentes vertical (\bar{w}) e lateral (\bar{v}) do vento são muito menores que a componente longitudinal (\bar{u}), podendo ser desprezadas ($v = 0$ e $w = 0$), restando apenas um vento médio \bar{u} na direção x , e não considerando condições de vento fraco, ou seja, se negligencia a difusão na direção de x , i.é., ($K_x = 0$), mais as equações (5.2) e (5.3) com a equação (6.1) tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial t^2} + \beta \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z \partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u} \beta \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z \partial x} + \bar{u} \tau \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial t \partial x} = \\
= K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_y \beta \frac{\partial^3 \bar{c}}{\partial z \partial y^2} + K_y \tau \frac{\partial^3 \bar{c}}{\partial t \partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2}
\end{aligned} \tag{6.3}$$

para $t > 0$, $0 < z < z_i$, $0 < y < L_y$ e $x > 0$, onde z_i é a altura da CLP e L_y é o limite positivo considerado no eixo y suficientemente distante da fonte.

A condição inicial, as condições de contorno e condição de entrada para o problema não-Fickiano transiente, dado pela equação (6.3), são as mesmas do problema (5.6), i.é., assume-se que no começo da liberação de poluentes a região de dispersão não está contaminada, logo:

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = 0 \quad \text{em } t = 0 \tag{6.3a}$$

Na direção z , os poluentes estão sujeitos às condições de contorno de fluxo nulo no solo e no topo da CLP:

$$K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right) = 0 \quad \text{em } z = 0, z_i \tag{6.3b}$$

Na direção y , supõe-se, L_y suficientemente grande, tal que o fluxo seja nulo em $y = L_y$, e concentração máxima em $y = 0$;

$$K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y \tag{6.3c}$$

E para a condição da fonte, tem-se uma fonte contínua com taxa de emissão contínua Q na altura H_s sendo que o eixo x coincide com a linha central da plume, descrita por:

$$\bar{c}(0, y, z, t) = \frac{Q}{\bar{u}} \delta(z - H_s) \delta(y - y_0) \quad \text{em } x = 0. \tag{6.3d}$$

Para resolver equação (6.3) pelo método **GIADMT** prossegue-se de maneira análoga aos capítulos precedentes. Primeiramente, faz-se a aproximação *stepwise* dos parâmetros que dependem da altura (variável z), usando a equação (4.17).

Certamente, agora é possível reformular o problema (6.3) como um conjunto de problemas difusivos-advectivos com parâmetros constantes, que para cada subcamada genérica tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial t} + \tau \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial t^2} + \beta_n \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial t} + \bar{u}_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} + \bar{u}_n \beta_n \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} + \bar{u}_n \tau \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial t \partial x} = \\ = K_{y_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial y^2} + K_{y_n} \beta_n \frac{\partial^3 \bar{c}_n}{\partial z \partial y^2} + K_{y_n} \tau \frac{\partial^3 \bar{c}_n}{\partial t \partial y^2} + K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (6.4)$$

para $n = 1 : N$, onde N denota o número de subcamadas e \bar{c}_n denota a concentração na n -ésima subcamada. Com condições iniciais e de contorno:

$$\bar{c}_n(x, y, z, 0) = 0 \quad em \quad t = 0 \quad (6.4a)$$

$$K_{z_n} \left(\frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \gamma \right) = 0 \quad em \quad z = 0, z_i \quad (6.4b)$$

$$K_{y_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial y} = 0 \quad em \quad y = 0, L_y \quad (6.4c)$$

$$\bar{c}_n(0, y, z, t) = \frac{Q}{\bar{u}_n} \delta(z - H_s) \delta(y - y_0) \quad em \quad x = 0. \quad (6.4d)$$

Além das duas condições de contorno impostas em $z = 0$ e z_i dadas pela equação (6.4b) têm-se as condições da continuidade para a concentração e o fluxo de concentração nas interfaces. A saber:

$$\overline{\bar{c}_j} = \overline{\bar{c}_{j+1}} \quad z = z_n \quad e \quad n = 1, 2, \dots, (N - 1) \quad (6.4e)$$

$$K_{z_n} \left(\frac{\partial \bar{c}_{j n}}{\partial z} - \gamma_n \right) = K_{z_{n+1}} \left(\frac{\partial \bar{c}_{j n+1}}{\partial z} - \gamma_{n+1} \right) \quad z = z_n \text{ e } n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (6.4f)$$

que devem ser consideradas, para se determinar as $2N$ constantes arbitrárias que aparecem na solução do conjunto de problemas (6.4).

Aplicando a transformada de Laplace na variável temporal na equação (6.4) tem-se:

$$\begin{aligned} (\beta_n \tau) \frac{\partial \Gamma_n}{\partial z} + (\bar{u}_u + \bar{u}_n \tau \gamma) \frac{\partial \Gamma_n}{\partial x} + (\bar{u}_n \beta_n) \frac{\partial^2 \Gamma_n}{\partial z \partial x} + (\gamma + \tau \gamma^2) \Gamma_n = \\ = (K_{y_n} + K_{y_n} \tau \gamma) \frac{\partial^2 \Gamma_n}{\partial y^2} + (K_{y_n} \beta_n) \frac{\partial^3 \Gamma_n}{\partial z \partial y^2} + (K_{z_n}) \frac{\partial^2 \Gamma_n}{\partial z^2} \end{aligned} \quad (6.5)$$

Proseguindo de maneira similar aos capítulos anteriores, pode-se agora, aplicar o método **GITT** na direção y . Começa-se expandindo a solução em série:

$$\Gamma_n(x, y, z, \gamma) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\bar{c}_{j n}(x, z, \gamma) \psi_j(y)}{\sqrt{N_j}}. \quad (6.6)$$

onde, como no método **GITT**, $\psi_j(y) = \cos(\lambda_j y)$ e $\lambda_j = j\pi/L_y$ são as autofunções e autovalores do problema auxiliar de Sturm-Liouville respectivamente.

Substituindo a equação (6.6) na equação (6.5), tomando momentos e resolvendo o problema transformado aplicando a transformada de Laplace na variável x , e resolvendo o conjunto de equações diferenciais ordinárias resultante, que tem a bem conhecida solução, obtém-se:

$$\begin{aligned} \bar{\bar{c}}_{j n}(s, z, \gamma) = C_{1n} e^{(F_{j n} + G_{j n}) z} + C_{2n} e^{(F_{j n} - G_{j n}) z} + \\ + \frac{Q}{2 G_{a n j}} \left[e^{(F_{j n} + G_{j n}) (z - H_s)} - e^{(F_{j n} - G_{j n}) (z - H_s)} \right] H(z - H_s) \end{aligned} \quad (6.7)$$

onde $c_{j n}$ com barra dupla ($\bar{\bar{c}}_{j n}$) denota a transformada de Laplace de $\bar{c}_{j n}$ na variável x , $H(z - H_s)$ é a função de Heaviside e os parâmetros são definidos como:

$$F_{j n} = \frac{\beta_n}{K_{z_n}} (s \bar{u}_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma) \quad (6.8)$$

$$G_{j n} = \sqrt{\left[\frac{\beta_n}{K_{z_n}} (s \bar{u}_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma) \right]^2 + \frac{4}{K_{z_n}} (s \bar{u}_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma \bar{u}_n \tau s + \tau \gamma^2 + \lambda_j^2 \gamma \tau K_{y_n})} \quad (6.9)$$

$$G_{a n j} = \frac{\gamma \sqrt{N_j K_{z_n}}}{2(1 + \gamma \tau) \psi_j(y_0)} \sqrt{\left[\frac{\beta_n}{K_{z_n}} (s \bar{u}_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma) \right]^2 + \frac{4}{K_{z_n}} (s \bar{u}_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \gamma \bar{u}_n \tau s + \tau \gamma^2 + \lambda_j^2 \gamma \tau K_{y_n})} \quad (6.10)$$

Portanto obtêm-se os coeficientes da solução em série dada pela equação (6.6) aplicando a inversa de Laplace na solução do problema transformado dada pela equação (6.7). Este procedimento resulta em:

$$\bar{c}_{j n}(x, z, \gamma) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi - i\infty}^{\xi + i\infty} e^{s x} \left\{ \begin{array}{l} C_{1n} e^{(F_{j n} + G_{j n}) z} + C_{2n} e^{(F_{j n} - G_{j n}) z} + \\ + \frac{Q}{2G_{a n j}} \left[\begin{array}{l} e^{(F_{j n} + G_{j n}) (z - H_s)} \\ - e^{(F_{j n} - G_{j n}) (z - H_s)} \end{array} \right] H(z - H_s) \end{array} \right\} ds \quad (6.11)$$

Uma vez que os coeficientes $\bar{c}_{j n}$ são conhecidos a solução para o problema estacionário obtido através da transformada de Laplace tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\Gamma_n(x, y, z, \gamma) &= \\
&= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{s x} \left\{ \begin{aligned} &C_{1n} e^{(F_{jn}+G_{jn})z} + C_{2n} e^{(F_{jn}-G_{jn})z} + \\ &+ \frac{Q}{2G_{a_{nj}}} \begin{bmatrix} e^{(F_{jn}+G_{jn})(z-H_s)} \\ -e^{(F_{jn}-G_{jn})(z-H_s)} \end{bmatrix} H(z-H_s) \end{aligned} \right\} ds
\end{aligned} \tag{6.12}$$

A concentração final é alcançada finalmente aplicando a inversa de Laplace na variável t :

$$\begin{aligned}
c_n(x, y, z, t) &= \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_{\zeta-i\infty}^{\zeta+i\infty} e^{\gamma t} \left\{ \begin{aligned} &\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{s x} \left[\begin{pmatrix} C_{1n} e^{(F_{jn}+G_{jn})z} + \\ + C_{2n} e^{(F_{jn}-G_{jn})z} \end{pmatrix} \right] \right\} \\ &+ \frac{Q}{2G_{a_{nj}}} \begin{pmatrix} e^{(F_{jn}+G_{jn})(z-H_s)} + \\ - e^{(F_{jn}-G_{jn})(z-H_s)} \end{pmatrix} H(z-H_s) \end{aligned} \right\} ds \Bigg\} d\gamma
\end{aligned} \tag{6.13}$$

A parte da equação (6.13) na qual aparece a Heaviside é considerada somente na subcamada que contém a fonte.

Para se determinar as constantes C_{1n} e C_{2n} aplica-se as condições de contorno em z dadas pela equação (6.4a) e as $(2N - 2)$ condições de continuidade de interface, equações (6.4e) e (6.4f), e resolve-se o sistema linear de dimensão $2N$ obtido.

Finalmente, deve-se notar que quando $(\tau \rightarrow 0)$ e $(\beta \rightarrow 0)$ a solução encontrada dada pela equação (6.13) se reduz, como esperado, à solução dada pela equação (5.20).

6.1 Inversão da Solução

De maneira análoga ao capítulo 5, foi utilizado a dupla integração numérica dada pelo algoritmo de *Talbot* (FT) [Abate e Valkó, 2004] na variável x e pelo esquema da

Quadratura de Gauss [Stroud e Secrest, 1966] na variável t (tempo). Sendo assim a solução dada pela equação (6.13) pode ser reescrita como a equação (5.21):

$$c_n(x, y, z, t) = \sum_{v=1}^{N_v} A_v \frac{P_v}{t} \left\{ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \left[\frac{r}{M^*} \left(\begin{array}{l} \frac{1}{2} \overline{\bar{c}}_{j n} \left(r, z, \frac{P_v}{t} \right) e^{r x} + \\ + \sum_{k=1}^{M^*-1} Re \left[\begin{array}{l} e^{x S(\theta_k)} \cdot (1 + i \varpi(\theta_k)) \cdot \\ \cdot \overline{\bar{c}}_{j n} \left(S(\theta_k), z, \frac{P_v}{t} \right) \end{array} \right] \end{array} \right) \right] \right\} \quad (6.14)$$

porém, $\overline{\bar{c}}_{j n}$ é determinada pela equação (6.7) sendo que $(s \rightarrow S(\theta_k))$ e $(\gamma \rightarrow \frac{P_v}{t})$, onde $F_{j n}$, $G_{j n}$ e $G_{a_{nj}}$ assumem os seguintes valores:

$$F_{j n} = \frac{\beta_n}{K_{z_n}} \left(S(\theta_k) \bar{u}_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \left(\frac{P_v}{t} \right) \right) \quad (6.14a)$$

$$G_{j n} = \sqrt{(F_{j n})^2 + \frac{4}{K_{z_n}} \cdot A_{j n}} \quad (6.14b)$$

$$A_{j n} = \left(\begin{array}{l} S(\theta_k) \bar{u}_n + K_{y_n} \lambda_j^2 + \left(\frac{P_v}{t} \right) + \\ + \bar{u}_n \tau S(\theta_k) + \tau \left(\frac{P_v}{t} \right)^2 + \lambda_j^2 \left(\frac{P_v}{t} \right) \tau K_{y_n} \end{array} \right) \quad (6.14c)$$

$$G_{a_{nj}} = \left\{ \frac{\left(\frac{P_v}{t} \right) \sqrt{N_j K_{z_n}}}{2 \left[1 + \left(\frac{P_v}{t} \right) \tau \right] \psi_j(y_0)} \right\} \cdot G_{j n} \quad (6.14d)$$

os demais parâmetros são definidos por:

$$S(\theta_k) = r\theta_k(\cot\theta_k + i) \quad -\pi < \theta_k < +\pi \quad (6.14e)$$

$$\varpi(\theta_k) = \theta_k + (\cot\theta_k - 1)\cot\theta_k \quad (6.14f)$$

$$\theta_k = \frac{k\pi}{M^*} \quad (6.14g)$$

$$r = \frac{2M^*}{5x} \quad (6.14h)$$

r é um parâmetro experimental, as constantes A_v e P_v são os pesos e as raízes da *Quadratura Gaussiana*, valores tabelados no livro de Stroud and Secrest (1966) [Stroud e Secrest, 1966] enquanto N_v é o número de pontos da quadratura.

7. Ascensão da pluma (*plume rise*)

A ascensão da pluma (“*plume rise*”) é um importante fator a ser considerado na modelagem da difusão atmosférica. A poluição atmosférica provém de várias fontes, algumas emitidas diretamente, outras formadas indiretamente através de reações fotoquímicas no ar. As fontes de poluição atmosférica são inúmeras, muitas são chaminés com descargas de *momentum*, calor e poluentes, fatores que contribuem diretamente no comportamento da pluma e, conseqüentemente, na sua ascensão.

As condições meteorológicas locais como a velocidade do vento, gradiente de temperatura e turbulência atmosférica também interferem no comportamento e ascensão da pluma.

A maior contribuição para a ascensão da pluma é devido à diferença de densidade entre o poluente e o ar ambiente. De fato, fumaça quente é menos densa e conseqüentemente, mais leve que o ar ao redor. Por essas razões, em muitos modelos de dispersão simples, assume-se que a pluma é emitida de uma fonte virtual de altura h_e localizada verticalmente acima da fonte real. A altura efetiva da pluma h_e (elevação do centro da pluma relativa ao nível do solo) resulta da soma da altura da fonte H_s e da ascensão da pluma Δh :

$$h_e = H_s + \Delta h \quad (7.1)$$

A hipótese básica para o uso desta fórmula é que a uma certa distância da fonte a pluma de material com empuxo, abandonado de uma altura H_s , é visualizada como uma pluma de material sem empuxo abandonado de uma fonte de altura $H_s + \Delta h$ como mostra a figura (7.1).

Assumindo isto, fórmulas para estimar a concentração média de material passivo podem ser aplicadas para emissões com empuxo.

Algumas fórmulas reproduzem o “*plume rise*” como função da distância, mas a maioria delas produzem valores constantes (comportamento final da pluma) que a pluma

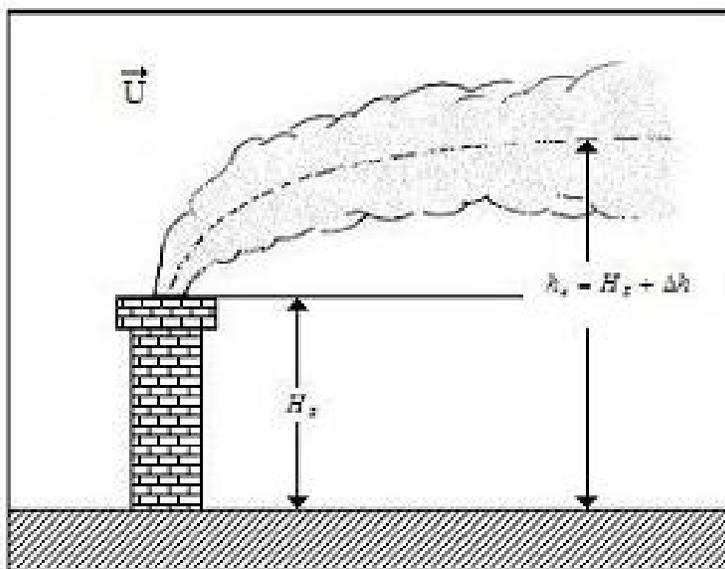


Figura 7.1 – A altura efetiva da pluma h_e (elevação do centro da pluma relativa ao nível do solo) resulta da soma da altura da fonte H_s e da ascensão da pluma Δh :

atinge a uma certa distância relativamente grande na direção do vento. Essas fórmulas contém alturas dependentes de variáveis atmosféricas normalmente relacionadas com a altura de emissão da fonte.

Vários estudos tem produzido fórmulas empíricas para estimar Δh (por exemplo: [Briggs, 1975], [Stern, 1976], [Hanna et al., 1982] e muitos outros). Outros pesquisadores tem produzido descrições mais complexas e compreensivas de várias interações físicas entre a pluma e o ar ambiente [Golay, 1982]; [Netterville, 1990], e muitos artigos de revisão sobre “*plume rise*” podem ser encontrados na literatura: [Briggs, 1975], [Weil, 1988]. Neste trabalho são utilizadas as fórmulas de Briggs [Briggs, 1975] aplicadas por Moreira [Moreira, 1999].

Briggs [Briggs, 1975] fez uma distinção entre condições neutras e instáveis para os efeitos da turbulência ambiente no comportamento final da pluma. Os modelos dele levam em conta dados mais específicos e detalhados para descrever a física da CLP e fornecem uma melhor concordância com o comportamento dos máximos de concentração observados de termoelétricas apresentados no trabalho de Weil [Weil, 1979].

Enquanto os efeitos turbulentos são gerados os processos de entranhamento próximo a fonte, turbulência ambiente (com turbilhões de pequenas e grandes escalas) tornam-se im-

portantes com o aumento da distância da pluma na direção do vento. Quando a turbulência ambiente pára de aumentar a estrutura gerada na pluma causa uma mistura energética e conseqüentemente, há uma perda gradativa de elevação da pluma e eventualmente cai. Portanto, este processo produz um aumento assintótico.

De acordo com Briggs, a interrupção da ascensão da pluma ocorre quando a energia cinética turbulenta da taxa de dissipação do ambiente, ϵ_a , excede a da pluma ϵ . Turbilhões de grandes escalas (*updrafts*: ar ascendente, e *downdrafts*: ar descendente, na CLC) podem transportar a pluma em movimentos de subida e descida, fazendo com que a pluma se disperse de modo a serpentear verticalmente o ar (*vertical meandering*) empurrando algumas delas para a superfície. Quando isto acontece, o tempo médio da concentração máxima ao nível do solo depende ainda mais de quanto tempo, durante o período médio, a pluma leva para tocar o solo enquanto a altura assintótica aumenta. Como consequência, no caso da CLC, assume-se que o parametro principal é o fluxo de calor sensível na superfície que controla o desenvolvimento dos *updrafts* e *downdrafts*.

Sendo assim, Briggs define dois modelos. O primeiro modelo de Briggs, modelo “*breakup*” assume que o comportamento final da pluma ocorre quando a taxa de dissipação turbulenta dentro da pluma diminui ao nível da turbulência ambiente. O segundo assume que a pluma eventualmente toca o solo por um “*downdraft*” de grande escala na CLC, este é o modelo “*touchdown*”.

Em convecção forte ($z_i/|L| > 10$), o modelo “*breakup*” tem um comportamento final dado por,

$$\Delta h = 4.3 \left(\frac{F}{\bar{u} w_*} \right)^{3/5} z_i^{2/5} \quad (7.2)$$

onde w_* é a velocidade convectiva e a taxa de dissipação ambiente é assumido ser $\left(0.1 \frac{w_*^3}{z_i}\right)$. A força de empuxo da fonte, (“*buoyancy force*”), F é dado por:

$$F = gV_i r_i^2 \frac{(T_i - T_a)}{T_i} \quad (7.3)$$

onde V_i e T_i são a velocidade vertical e temperatura da pluma, respectivamente, na saída da chaminé, T_a a temperatura ambiente, g a aceleração da gravidade e r_i o raio da fonte. O

modelo “*touchdown*” para condições convectivas fortes prediz o comportamento da pluma por:

$$\Delta h = 1.0 \left(\frac{F}{\overline{uw}_d^2} \right) \left(1 + \frac{2H_s}{\Delta h} \right)^2 \quad (7.4)$$

onde w_d é a velocidade média do “*downdraft*”, $w_d = 0.4u_*$; esta equação é resolvida iterativamente para Δh .

Em estabilidade neutra, o modelo “*breakup*” prediz o seguinte comportamento final da pluma:

$$\Delta h = 1.3 \frac{F}{\overline{uu}_*^2} \left(1 + \frac{H_s}{\Delta h} \right)^{2/3} \quad (7.5)$$

onde u_* é a velocidade de fricção.

Uma pluma com empuxo presa na camada bem misturada pode penetrar parcialmente ou completamente na camada estável elevada ($z > z_i$). Para avaliar as concentrações ao nível do solo para esta situação, a fração da pluma que penetra na camada estável é primeiramente estimada e então Q e h_e , para o material da pluma que permanece dentro da camada bem misturada, são modificados. Neste trabalho não será considerado a penetração da pluma. Então, se a pluma está completamente presa, Weil [Weil, 1979] sugere que a restrição geométrica limite para Δh seja:

$$\Delta h = 0.62(z_i - H_s) \quad (7.6)$$

Considerando tudo que foi acima exposto, Briggs [Briggs, 1975] sugere que as fórmulas para Δh podem ser resumidas como segue,

$$\Delta h = \min(7.2, 7.4, 7.5, 7.6) \quad (7.7)$$

No presente trabalho, o comportamento da pluma (“*plume rise*”) é utilizado somente no experimento de Kinkaid. No modelo dado pelas equações (3.56) e (4.28) a altura da fonte H_s é substituída por h_e , ou seja, utiliza-se a equação (7.1).

8. Parametrização da turbulência

A parametrização da turbulência é um fator muito importante a ser considerado na validação do modelo. Ao parametrizar a turbulência atmosférica, os fenômenos naturais são diretamente relacionados com os modelos matemáticos descrevendo, assim, a física da turbulência.

No presente trabalho, os modelos de fechamento de primeira ordem, fechamento local, apresentam a física da turbulência totalmente modelada nos coeficientes difusivos, portanto uma parametrização turbulenta apropriada para os coeficientes de difusão completa a modelagem do transporte de contaminantes na atmosfera.

Já nos modelos com fechamento não-local, além da modelagem nos coeficientes de difusão, tem-se a física da turbulência presente nos termos adicionais que aparecem na equação, nas quais modelam o transporte assimétrico da dispersão de poluentes.

A forma como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados com a estrutura da CLP é de fundamental importância para a validação do modelo. Aqui serão apresentados diferentes coeficientes de difusão que foram utilizados no decorrer da pesquisa em diversas situações e aplicações, sempre com o objetivo de modelar e simular a dispersão de poluentes na atmosfera.

8.1 Coeficientes de difusão turbulentos

No presente trabalho são utilizados vários coeficientes de difusão turbulentos a fim de validar o modelo. São utilizados coeficientes de difusão propostos por Degrazia et al. ([Degrazia et al., 1997] e [Degrazia et al., 2001]). Estes coeficientes são formulados a partir da teoria de difusão de Taylor [Taylor, 1921] combinados com o espectro de energia cinética turbulenta, a fim de descrever a estrutura turbulenta da CLC. Em termos de parâmetros escalares convectivos o coeficiente de difusão pode ser formulado como [Degrazia et al., 2001]:

$$\frac{K_\alpha}{w_* h} = \frac{0.09 c_i^{1/2} \varphi^{1/3} (z/h)^{4/3}}{(f_m^*)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\text{sen} \left(\frac{7.84 c_i^{1/2} \varphi^{1/3} (f_m^*)_i^{2/3} X n'}{(z/h)^{2/3}} \right)}{(1+n')^{5/3}} \frac{dn'}{n'} \quad (8.1)$$

onde h é a altura da CLC, w_* é a velocidade convectiva, $(\alpha = x, y, z)$, φ é a taxa de dissipação molecular adimensional associada a produção da pluma, $(f_m^*)_i$ é a frequência adimensional do pico espectral, $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi k)^{-2/3}$ com $\alpha_u = 0.5 \pm 0.05$ e $\alpha_i = 1, 4/3, 4/3$ para as componentes u , v e w respectivamente, $n' = \hat{n} \left(1.5z/u(f_m^*)_i \right)$ sendo \hat{n} a frequência, e X é o tempo adimensional uma vez que é a taxa de tempo de viagem x/u e a escala de tempo convectivo h/w_* .

Para construir a parametrização turbulenta a partir da equação (8.1) para modelos de dispersão em uma CLC é necessário ter expressões para $(f_m^*)_i$ e φ . De acordo com Kaimal et al. [Kaimal et al., 1976] e Caughey [Caughey, 1982]:

$$(f_m^*)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i} \quad (8.2)$$

com:

$$(\lambda_m)_u = (\lambda_m)_v = 1.5h \quad (8.3)$$

e

$$(\lambda_m)_w = 1.8h [1 - \exp(-4z/h) - 0.0003 \exp(8z/h)] \quad (8.4)$$

onde $(\lambda_m)_i$ é o comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical turbulento. Baseado nos experimentos em Mennesota e Aschuerch [Caughey, 1982], a função dissipação pode ser descrita como segue [Druilhet et al., 1983]:

$$\varphi = 1.26 \exp\left(-\frac{z}{0.8h}\right) \quad (8.5)$$

Outro coeficiente de difusão vertical proposto por Degrazia et al. [Degrazia et al.,

1997] é dado por:

$$\frac{K_z}{w_* h} = 0.22 \left(\frac{z^{1/3}}{h} \right) \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1/3} \left[1 - \exp \left(-\frac{4z}{h} \right) - 0.0003 \exp \left(\frac{8z}{h} \right) \right] \quad (8.6)$$

Para a dispersão lateral tem-se [Degrazia et al., 1997]:

$$K_y = \frac{\sqrt{\pi} \sigma_v z}{16 (f_m)_v q_v} \quad (8.7)$$

com:

$$\sigma_v^2 = \frac{0.98 c_v}{(f_m)_v^{2/3}} \left(\frac{\psi_\epsilon}{q_v} \right)^{2/3} \left(\frac{z}{h} \right)^{2/3} w_*^2 \quad (8.8)$$

$$q_v = 4.16 \frac{z}{h} \quad (8.9)$$

$$\psi_\epsilon^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{h} \right)^2 \left(-\frac{z}{L} \right)^{-2/3} + 0.75 \right]^{1/2} \quad (8.10)$$

$$(f_m)_v = 0.16 \quad (8.11)$$

onde σ_v é o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal, q_v é a função estabilidade, ψ_ϵ é a função da taxa de dissipação molecular adimensional e $(f_m)_v$ é o pico de onda lateral.

Uma parametrização para o coeficiente de difusão vertical sugerida por Pleim e Chang [Pleim e Chang, 1992] para uma CLC pode ser escrita por:

$$K_z = k w_* z \left(1 - \frac{z}{h} \right) \quad (8.12)$$

onde $k = 0.4$ é a constante de Von Kármán.

A parametrização da turbulência para os termos adicionais β que aparecem nas equações (4.4) e (6.3) as quais levam em conta o caráter não-local na dispersão, é dada por Degrazia et al. [Degrazia et al., 2001].

Para a escala de tempo Lagrangeana vertical tem-se:

$$T_{L_i} = \frac{0.55}{4} \frac{z}{\sigma_i (f_m^*)_i} \quad (8.13)$$

Para o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical tem-se:

$$\sigma_w^2 = 1.06 c_w \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_w^{2/3}} \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2 \quad (8.14)$$

ψ é a dissipação molecular da velocidade turbulenta dada por [Druilhet et al., 1983] :

$$\psi = 1.5 - 1.2 \left[\left(\frac{z}{h}\right)^{1/3} \right] \quad (8.15)$$

8.2 Perfil do vento

Neste estudo, o perfil da velocidade média do vento na CLC tem sido parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade [Panofsky e Dutton, 1988]:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b \quad (8.16)$$

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 [Paulsen, 1975]):

$$\Psi_m = \ln \left(\frac{1 + A^2}{2} \right) + \ln \left(\frac{1 + A}{2} \right)^2 - 2 \tan^{-1} x + \frac{\pi}{2} \quad (8.17)$$

com A definido por:

$$A = \left(1 - 15 \frac{z}{L}\right)^{1/4} \quad (8.18)$$

O perfil de velocidade do vento também pode ser descrito por uma lei de potência expressa como segue [Panofsky e Dutton, 1988]:

$$\frac{\bar{u}_z}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^p \quad (8.19)$$

onde \bar{u}_z e \bar{u}_1 são as velocidades do vento médio nas alturas z e z_1 , enquanto p é um expoente que é relatado para a intensidade da turbulência.

9. Descrição dos experimentos e dos índices estatísticos

Neste capítulo apresenta-se a descrição dos experimentos a serem utilizados na validação dos modelos propostos. E a descrição dos índices estatísticos utilizados na comparação entre os dados de concentração simulados nos modelos com os dados observados nos experimentos.

O processo de validação do modelo é uma atitude de investigação científica, onde se busca a compreensão e a consequente verbalização das soluções obtidas. Encontrar o resultado do problema proposto faz parte do processo porém o questionamento do resultado obtido, bem como o do problema original, é fundamental.

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

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

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

Hanna [Hanna, 1989], dividiu o processo de validação em três etapas com o objetivo de organizar um pouco esse processo:

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

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

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

9.1 Dados experimentais

Para avaliar a performance do modelo foram utilizados dados observados em dois experimentos: Experimento de Copenhagen, e Experimento de Kinkaid, por considerar o “*plume rise*”; a serem confrontados com os gerados pelos modelos.

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

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

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

Ainda, a razão entre a altura da CLC (z_i) e do comprimento de Monin-Obukov (L) determina se o experimento é de convecção fraca, moderada ou alta, [Panofsky e Dutton, 1984]; isto é:

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

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

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

9.1.1 O Experimento de Copenhagen

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning e Lyck [Gryning e Lyck, 1984] e Gryning et al. [Gryning et al., 1987], consistiram na liberação do traçador hexafluoreto de enxofre (SF_6) na região norte de Copenhagen.

O poluente foi abandonado sem empuxo de uma fonte de 115 m de altura, com taxa de emissão de 100 g/s. Essa fonte consiste de um cilindro posicionado perpendicularmente ao chão simulando uma chaminé, e coletado por três arcos perpendiculares ao vento médio. Os arcos foram posicionados de 2 a 6 km do ponto no qual ocorreu a liberação do traçador, como mostra a figura (9.1).

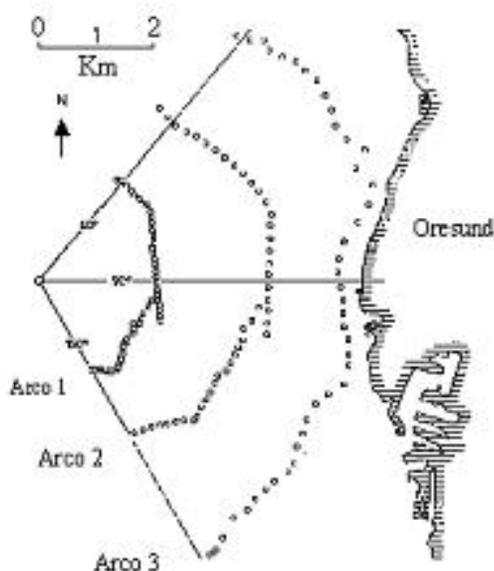


Figura 9.1 – Experimento de Copenhagen

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

Na tabela (9.1) abaixo são exibidos os dados micrometeorológicos, que não variam com o tempo, dos experimentos de dispersão na CLC de Copenhagen para serem utilizados no modelo.

Tabela 9.1 – Médias dos parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen [Gryning, 2002]

Exp.	u (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	w_* (ms^{-1})	z_i (m)
1	3.4	.37	-46	1.8	1980
2	10.6	.74	-384	1.8	1920
3	5.0	.39	-108	1.3	1120
4	4.6	.39	-173	0.7	390
5	6.7	.46	-577	0.7	820
6	13.2	1.07	-569	2.0	1300
7	7.6	.65	-136	2.2	1850
8	9.4	.70	-72	2.2	810
9	10.5	.77	-382	1.9	2090

As tabelas (9.2) e (9.3) apresentam a velocidade de fricção e o comprimento de Monin-Obukhov, respectivamente, medidos a cada $10min$ durante os experimentos de Copenhagen, com exceção do experimento 6 que não possui medidas que variam com o tempo.

A tabela (9.4) apresenta as concentrações observadas lateralmente ($c^y(x, 0)/Q$) ($10^{-4} sm^{-2}$) e as concentrações máximas observadas ($c(x, 0, 0)/Q$) ($10^{-7} sm^{-3}$) do experimento de Copenhagen para diferentes distâncias da fonte.

Tabela 9.2 – Velocidade de fricção u_* (m/s) para diferentes intervalos de tempo do experimento de Copenhagen. Cada intervalo corresponde a 10 min

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

Tabela 9.3 – Comprimento de Monin-Obukhov L (m) para diferentes intervalos de tempo do experimento de Copenhagen. Cada intervalo corresponde a 10 min

Experimento 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	-588
7	-47	-155	-83	-83	-273	-87	-41	-593
8	-38	-228	-60	-101	-262	-71	-47	-471
9	-83	-184	-106	-129	-395	-56	-70	-389
10	-21	-389	-42	-129	-395	-111	-64	-375
11	-32	-133	-101	-129	-395	-215	-52	-262
12	-29	-375	-70	-129	-759	-123	-39	-252

Tabela 9.4 – Concentrações observadas lateralmente ($c^y(x, 0)/Q$) ($10^{-4}sm^{-2}$) e as concentrações máximas observadas ($c(x, 0, 0)/Q$) ($10^{-7}sm^{-3}$) do Experimento de Copenhagen, x é a distância da fonte.

experimento	x	$c^y(x, 0)/Q$ ($10^{-4}sm^{-2}$)	$c(x, 0, 0)/Q$ ($10^{-7}sm^{-3}$)
1	1900	6.48	10.50
	3700	2.31	2.14
2	2100	5.38	9.85
	4200	2.95	2.83
3	1900	8.20	16.33
	3700	6.22	7.95
	5400	4.30	3.76
4	4000	11.66	15.71
5	2100	6.71	12.11
	4200	5.84	7.24
	6100	4.97	4.75
6	2.000	3.96	7.44
	4.200	2.22	3.37
	5.900	1.83	1.74
7	2000	6.70	9.48
	4100	3.25	2.62
	5300	2.23	1.15
8	1900	4.16	9.76
	3600	2.02	2.64
	5300	1.52	0.98
9	2100	4.58	8.52
	4200	3.11	2.66
	6000	2.59	1.98

9.1.2 O Experimento de Kinkaid

O experimento de Kincaid foi realizado em Illinois, USA. É um experimento que leva em consideração a ascensão da pluma pois os traçadores utilizados nos experimentos são menos densos que o ar. A Altura da fonte é de $187m$ com um diâmetro de $9m$. O comprimento de rugosidade de aproximadamente $10cm$. Durante o experimento foi abandonado SF_6 . As concentrações máximas foram observadas ao nível do solo. Uma descrição completa do experimento é encontrado no trabalho de Hanna e Paine [Hanna e Paine, 1989].

Na tabela (9.5) estão os dados micrometeorológicos para o experimento de Kinkaid, onde V_i e T_i são a velocidade vertical e temperatura da pluma, respectivamente, na saída da chaminé, T_a a temperatura ambiente. E na tabela (9.6) estão Concentrações máximas observadas $(c(x, 0, 0)/Q)$ ($10^{-7} sm^{-3}$) do Experimento de Kinkaid.

Tabela 9.5 – Parâmetros micrometeorológicos para o experimento de Kinkaid

Exp.	z_i (m)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	L (m)	T_a (k)	T_i (k)	V_i (m/s)	Q (g/s)
1	2076	0.30	2.65	-8.6	298.4	416	14.6	10.2
2	2092	0.31	2.53	-11.2	298.4	416	14.6	8.2
3	893	0.22	1.95	-3.9	284.2	432	29.6	11.2
4	1032	0.22	1.95	-4.8	285.2	432	29.2	11.2
5	1175	0.28	2.05	-10.4	286.2	432	29.6	11.3
6	1355	0.25	2.19	-6.3	286.6	432	29.9	11.1
7	1300	0.37	2.17	-23.5	290.8	441	27.9	11.5
8	1743	0.34	1.68	-40.3	291.3	442	27.1	11.8
9	1840	0.29	1.24	-63.5	291.6	445	27.3	12.2
10	850	0.30	1.52	-8.6	296.6	453	28.5	11.2
11	1447	0.28	2.31	-6.6	297.6	456	31.8	11.2
12	1223	0.50	2.33	-35.4	299.9	440	18.0	11.0
13	2069	0.57	2.66	-58.5	300.4	441	18.0	11.0
14	950	0.40	1.79	-24.4	285.0	436	16.6	16.2
15	1253	0.46	1.99	-33.3	286.1	438	16.9	12.0
16	1548	0.44	2.12	-27.0	287.5	434	17.9	11.1
17	2250	0.46	2.30	-28.6	288.5	433	18.7	10.8
18	2450	0.52	2.35	-41.3	289.5	431	17.6	10.8
19	2506	0.53	2.29	-51.4	289.8	431	15.7	10.8
20	2528	0.52	2.08	-67.8	290.1	436	14.2	11.6
21	1700	0.37	2.43	-14.3	290.9	420	17.3	12.1
22	1750	0.29	2.56	-6.0	290.4	423	18.9	12.0
23	1776	0.56	2.60	-46.1	290.9	426	18.3	11.5
24	1800	0.47	2.60	-29.6	292.6	426	18.8	11.1
25	1950	0.39	2.46	-20.6	291.4	395	21.7	10.6

26	1131	0.41	2.69	-18.7	298.0	421	21.1	12.9
27	2252	0.47	2.53	-42.1	299.9	435	29.8	13.1
28	2676	0.51	2.37	-67.6	300.0	436	31.8	13.2
29	1725	0.30	3.09	-5.2	299.6	434	37.3	13.5
30	1750	0.26	2.91	-4.3	299.8	434	39.3	13.7
31	1750	0.25	2.61	-5.4	299.9	434	38.2	13.9
32	1450	0.32	2.61	-8.0	302.2	435	30.0	19.8
33	1450	0.33	2.46	-11.2	302.4	435	30.2	20.0
34	1483	0.34	2.21	-18.3	302.3	436	31.4	19.5
35	1505	0.26	1.68	-18.5	301.5	436	32.0	18.6
36	1014	0.52	2.11	-45.1	292.3	397	19.9	16.7
37	1462	0.54	2.98	-35.8	293.0	397	19.0	16.4
38	2274	0.55	2.95	-42.3	293.5	390	20.9	16.2
39	1376	0.63	2.45	-86.1	297.4	390	13.0	18.5
40	1455	0.62	2.25	-108.0	297.2	395	13.2	18.6
41	1539	0.66	2.30	-131.0	297.1	398	15.1	19.1
42	1594	0.61	1.91	-191.0	296.9	398	15.8	18.5
43	1124	0.28	2.51	-6.4	296.8	427	16.8	13.0
44	1250	0.31	2.62	-8.3	297.7	428	16.4	13.2
45	1353	0.32	2.55	-10.6	298.5	428	16.9	12.7
46	1635	0.30	2.54	-9.2	299.0	428	17.0	12.1
47	1721	0.29	2.40	-11.6	299.4	428	16.5	12.2
48	1794	0.32	2.14	-21.2	299.4	428	16.0	12.5
49	1851	0.34	1.55	-67.5	299.3	427	16.0	12.7
50	952	0.67	2.47	-81.2	299.7	431	16.7	12.6
51	1222	0.68	2.59	-85.6	300.3	431	17.0	12.7
52	1300	0.60	2.69	-59.2	301.1	432	17.0	12.9
53	1360	0.68	2.55	-113.0	301.1	432	17.0	12.5
Exp.	z_i	u_*	w_*	L	T_a	T_i	V_i	Q
	(m)	(m/s)	(m/s)	(m)	(k)	(k)	(m/s)	(g/s)

Tabela 9.6 – Concentrações máximas observadas ($c(x,0,0)/Q$) ($10^{-7} sm^{-3}$) do Experimento de Kinkaid.

Exp.	Distância (m)	C_{max}/Q (sm^{-3})	Exp.	Distância (m)	C_{max}/Q (sm^{-3})
1	3000	73.4	15	5000	135.0
2	3000	59.3		7000	65.0
	5000	30.3		10000	73.3
	7000	17.2	16	3000	66.1
3	3000	165.5		5000	52.3
	5000	182.7		7000	31.5
	7000	132.6		10000	41.2
4	3000	158.6	17	2000	58.0
	5000	117.5		3000	67.0
	7000	89.2		5000	31.5
5	3000	136.3		10000	23.6
	5000	68.0		15000	20.0
	10000	63.3	18	2000	38.9
6	3000	117.1		3000	57.1
	5000	89.0		5000	44.6
	7000	101.9	19	2000	56.2
	10000	77.8		5000	47.4
7	10000	58.0	20	2000	39.6
8	10000	79.6		3000	48.7
9	7000	52.6		5000	50.1
	10000	63.1	21	3000	85.7
10	5000	89.0		5000	75.8
11	2000	69.2		7000	97.1
	5000	69.1		10000	70.7
	10000	53.6		15000	34.5
12	10000	51.4	22	3000	55.3
13	10000	10.8		5000	110.9
14	5000	117.6		7000	64.8
	7000	88.2		10000	54.7
	10000	73.0		15000	37.0

Exp.	Distância (<i>m</i>)	C _{max} /Q (<i>s.m</i> - 3)	Exp.	Distância (<i>m</i>)	C _{max} /Q (<i>s.m</i> - 3)
23	3000	56.1	30	3000	47.8
	5000	43.2		5000	66.8
	7000	47.0		7000	49.4
	10000	34.5		15000	16.1
	1500	32.9		20000	21.5
24	3000	71.4	31	3000	10.2
	5000	53.7		5000	20.8
	7000	48.9		7000	25.8
	10000	22.3		15000	16.0
	15000	18.1		20000	14.1
25	3000	45.6	32	15000	28.5
	5000	41.7		20000	22.4
26	3000	40.0	33	15000	25.1
	15000	52.4		20000	26.5
	20000	48.9	34	15000	19.4
27	5000	38.3		20000	21.7
	15000	27.0	35	20000	10.4
	20000	21.6		36	20000
28	1000	49.8	50000		28.3
	5000	26.1	37	20000	49.0
29	1000	13.6		50000	18.2
	3000	36.8	38	10000	44.2
	5000	47.0		20000	32.6
	7000	43.0		30000	16.1
	15000	22.7		50000	12.0

Exp.	Distância (<i>m</i>)	C _{max} /Q (<i>sm</i> ⁻³)	Exp.	Distância (<i>m</i>)	C _{max} /Q (<i>sm</i> ⁻³)
39	3000	73.6	45	15000	45.5
	10000	76.6	46	1000	109.0
	20000	27.8		7000	70.1
	30000	26.1		15000	43.5
40	10000	22.5	47	1000	37.7
	30000	24.8		2000	183.4
	50000	11.6		3000	202.9
41	5000	26.6		7000	56.0
	20000	30.7	48	15000	28.0
	30000	15.0		2000	94.2
	50000	10.5		3000	37.3
42	5000	12.4	7000	41.1	
	20000	26.8	49	15000	37.9
	30000	24.8		2000	21.4
	50000	9.6		3000	19.4
43	2000	72.0	7000	37.9	
	3000	105.0	50	15000	49.3
	7000	117.9		2000	32.3
	15000	37.4		7000	85.7
44	1000	91.3	51	2000	19.7
	3000	105.6		3000	39.5
	5000	75.8		7000	45.3
	7000	59.7	52	2000	18.9
	15000	63.9		3000	55.5
45	1000	75.9	7000	33.1	
	2000	95.8	53	2000	13.7
	3000	82.5		3000	52.6
	7000	82.5		7000	51.6

9.2 Índices Estatísticos

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

Utilizando a seguinte notação: os índices o e p indicam respectivamente, as quantidades observadas e previstas, \bar{C} é a concentração de poluentes e σ é o desvio padrão. Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo [Hanna, 1989]:

1. Erro quadrático médio normalizado: $Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\bar{C}_o \bar{C}_p}$

- fornece uma estima de quanto os dados, observados e previstos, se distinguem uns dos outros. A normalização indica que este erro independe da grandeza dos dados. A confiabilidade do modelo aumenta quanto mais o valor, que este índice assume, se aproxima de zero.

2. Coeficiente de correlação: $Cor = \frac{\overline{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p}$

- Exprime o grau de relação entre os dados e assume um valor compreendido entre -1 e 1 . Se os dados estão correlacionados, isto é variam no mesmo modo, então $Cor > 0$, se os dados não estão correlacionados, ou seja, são inversamente relacionados, então $Cor < 0$. Obviamente, que a confiabilidade do modelo aumenta quando o índice de correlação se aproxima de um (1).

3. Fator de dois: $Fa2$

- Indica o percentual, normalizado, dos dados calculados entre um fator de dois daqueles observados, ou seja, a fração de dados ($\%normalizadoa1$) que estão entre $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$. A confiabilidade do modelo aumenta quanto mais o valor que este índice assume se aproxima de um.

4. *Fractional Bias*: $Fb = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0,5 (\bar{C}_o + \bar{C}_p)}$

- informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. Valores de $Fb > 0$ indica que o modelo está subestimando os dados

experimentais, enquanto valores de $Fb < 0$ indica que o modelo está superestimando os dados experimentais. A melhor estima se tem quando $Fb = 0$.

5. Desvio fracional padrão:
$$Fs = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0.5 (\sigma_o + \sigma_p)}$$

- O valor ótimo é zero.

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

10. Resultados Numéricos

Neste capítulo apresenta-se os resultados das simulações do modelo **GIADMT** utilizando as parametrizações descritas no capítulo **8** confrontadas com os dados dos experimentos descritos no capítulo **9**.

O método **GIADMT** é um método cuja a solução é determinada por uma integral de linha. As equações (3.56), (4.28), (5.20) e (6.13) juntamente com as parametrizações utilizadas são elementos característicos do presente modelo que, acrescidas dos dados micrometeorológicos dos experimentos reproduzem a concentração de poluentes.

10.1 Solução tridimensional fechamento local

Para realizar as simulações do modelo tridimensional estacionário dado pela equação (3.56), utilizam-se os dados do experimento de Copenhagen* utilizando-se no modelo os coeficientes de difusão, vertical e lateral (K_z e K_y), descritos pela equação (8.1), válido para grandes tempos de difusão, e o perfil do vento dado pela (8.16). No presente trabalho não foi considerado condições de vento fraco, ou seja, se negligencia a difusão na direção de x i.é., ($K_x = 0$).

A figura (10.1) apresenta o gráfico de espalhamento entre as concentrações observadas, apresentadas na tabela (9.4), em função das concentrações integradas lateralmente previstas pelo modelo através da equação (3.65). Já na figura (10.2) tem-se o gráfico de espalhamento entre as concentrações medidas, apresentadas na tabela (9.4), e as concentrações máximas (não integrada, i.é., solução tridimensional) previstas pelo modelo ao nível do solo.

*experimento detalhado no capítulo **9** na seção (9.1.1)

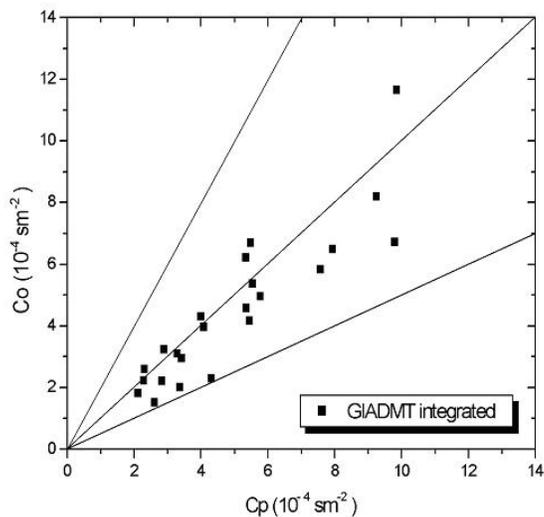


Figura 10.1 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração integrada lateralmente (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo integrada lateralmente (Cp). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}^y/Q)

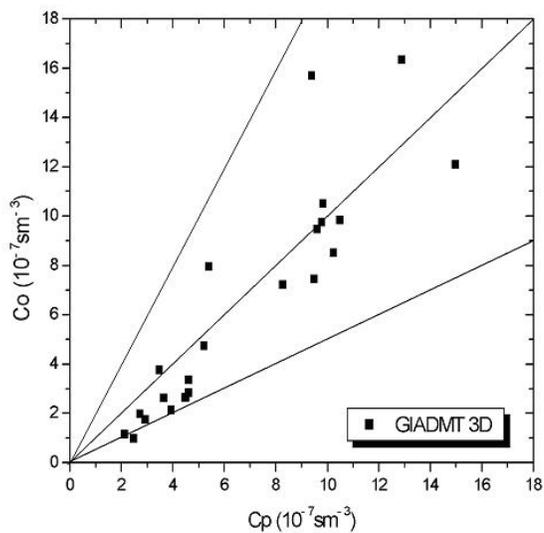


Figura 10.2 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração máxima (Co) em comparação com os resultados de concentração máxima do modelo (Cp). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q)

Normalmente, na análise de gráficos de espalhamento, introduz-se uma reta formando um ângulo de 45° com a linha vertical e horizontal para a melhor visualização da concordância dos resultados. Quanto mais próximo estiverem os dados desta reta, melhores os resultados. Observando as figuras (10.1) e (10.2) nota-se que uma boa concordância é obtida entre os dados experimentais e o modelo considerando as concentrações integradas e as concentrações máximas. Observando a tabela (9.4) pode-se notar que são 23 dados de concentração observada em ambos os casos (concentração integrada lateralmente e concentração máxima), porém a figura (10.2) apresenta, aparentemente, apenas 22 pontos. Isso é devido ao fato que existem dois pares: $(C_o; C_p)$, que possuem valores de concentração observada e concentração predita muito próximos ficando os pontos um em cima do outro no gráfico de espalhamento.

Os pontos entre as linhas pontilhadas indicam que os dados calculados estão entre um fator de dois daqueles observados, ou seja, há um percentual de dados calculados que estão entre $\left(0, 5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2\right)$, o valor deste percentual é indicado pelo índice estatístico *fator de 2* (*fa2*) apresentado nas tabelas dos índices estatísticos.

Convém ressaltar que os modelos fornecem valores expressos como uma média, isto é, um valor médio obtido pelo desempenho dos muitos experimentos. E um modelo é considerado geralmente aceitável se os valores estimados estiverem dentro de um fator de dois dos dados observados.

A figura (10.3) mostra a distribuição da concentração para o experimento 8 de Copenhague no plano xy horizontal ao nível do solo. As linhas representam as isolinhas de concentração.

A figura (10.4) mostra a convergência numérica do experimento 8 de Copenhague da solução proposta pela equação (3.61) para a concentração, cuja inversão é realizada através do esquema da Quadratura Gaussiana, com o aumento dos números de autovalores considerando o número de pontos da Quadratura Gaussiana $N_p = 2, 8, 20$ e distâncias da fonte $x = 500m$ e $x = 4000m$. Adicionalmente, a figura (10.4) serve para avaliar o desempenho do modelo em função da altura da discretização em z (Δz). Desta análise deve-se observar que se pode alcançar uma exatidão prescrita variando o número dos autovalores com melhores valores para $N_p = 20$ e $\Delta z = 5m$ para todas as distâncias. Assumindo diferentes valores para o esquema da Quadratura de Gauss e a discretização da altura ($\Delta z = 5, 10, 20, 50$), é

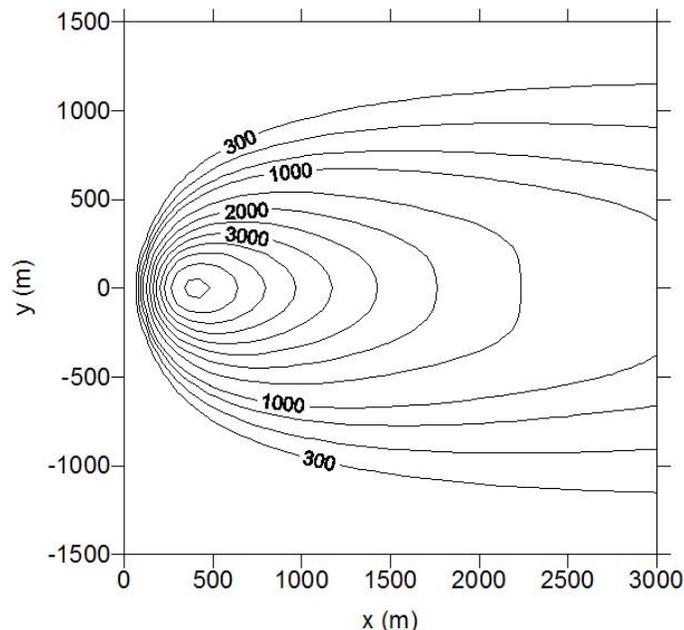


Figura 10.3 – Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo (ng/m^3). Experimento 8 de Copenhagen.

importante observar que, para este problema, o tamanho da altura da discretização afeta a convergência com a diminuição do valor de N_p e com o aumento da distância x .

É importante mencionar que a aproximação *stepwise* de uma função contínua converge à uma função contínua, quando o *stepwise* da aproximação vai a zero. Além disso, pode-se observar no livro de Stroud-Secret [Stroud e Secret, 1966] que o módulo da parte real da raiz do esquema da quadratura gaussiana para a transformada inversa de Laplace, aumenta com N_p (a ordem da aproximação).

Tendo que a solução para a concentração com a transformada de Laplace tem termos exponenciais, pode-se observar prontamente que da simulação numérica aparece “*overflow*” para o argumento positivo da exponencial e “*underflow*” para o argumento negativo quando N_p supõe valores muito grandes. É importante salientar que os cálculos foram executados em um microcomputador com dupla precisão (32 bits). Conseqüentemente para evitar o *overflow* e o *underflow* foi restringido os valores de N_p aos valores em torno de vinte.

A figura (10.5) mostra a convergência numérica do experimento 8 de Copenhagen da solução proposta pela equação (3.66) para a concentração, cuja inversão é realizada através do algoritmo de *Talbot*, com o aumento dos números de autovalores considerando o número

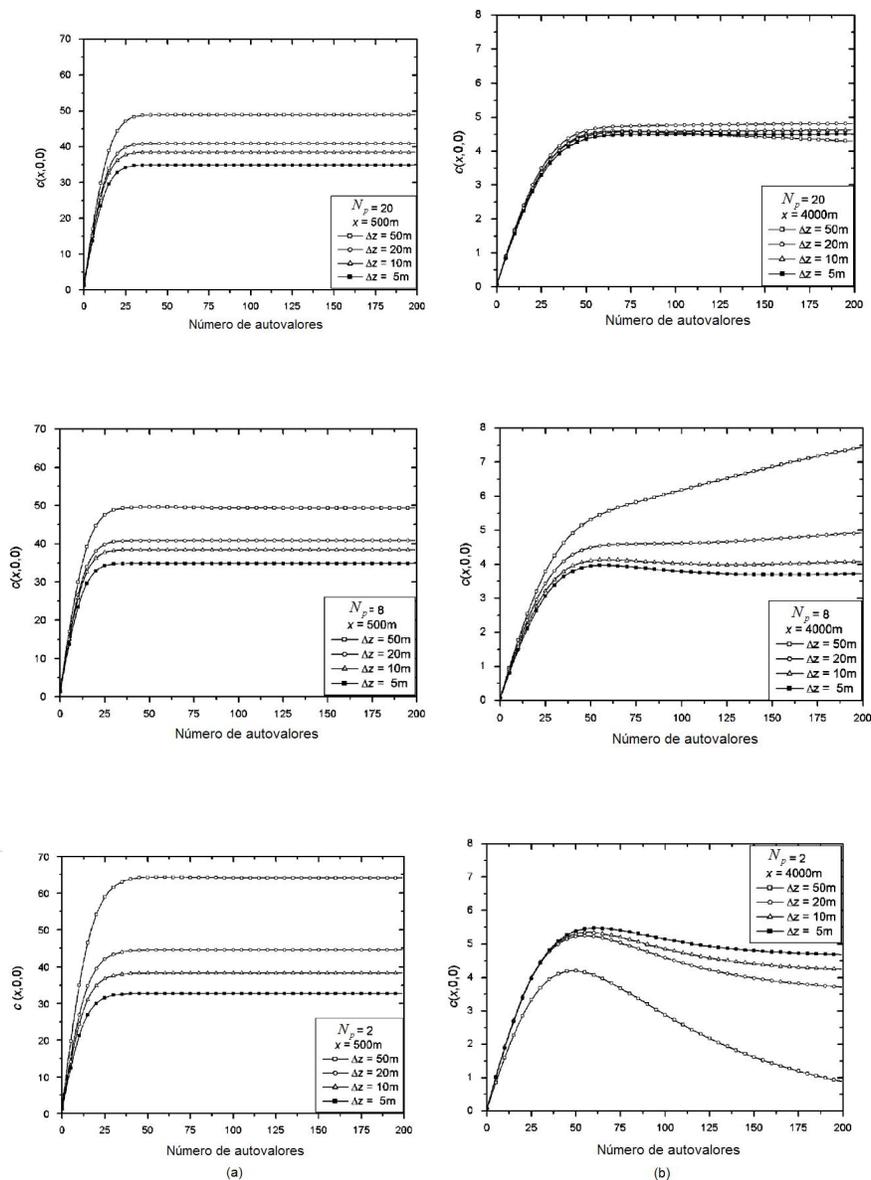


Figura 10.4 – Convergência numérica da solução proposta para a concentração com o aumento dos números dos autovalores e da discretização vertical que considera o esquema da Quadratura Gaussiana com pontos da quadratura $N_p = 2, 8, 20$ e distâncias da fonte de: (a) $x = 500m$ e (b) $x = 4000m$. Experimento 8 de Copenhagen.

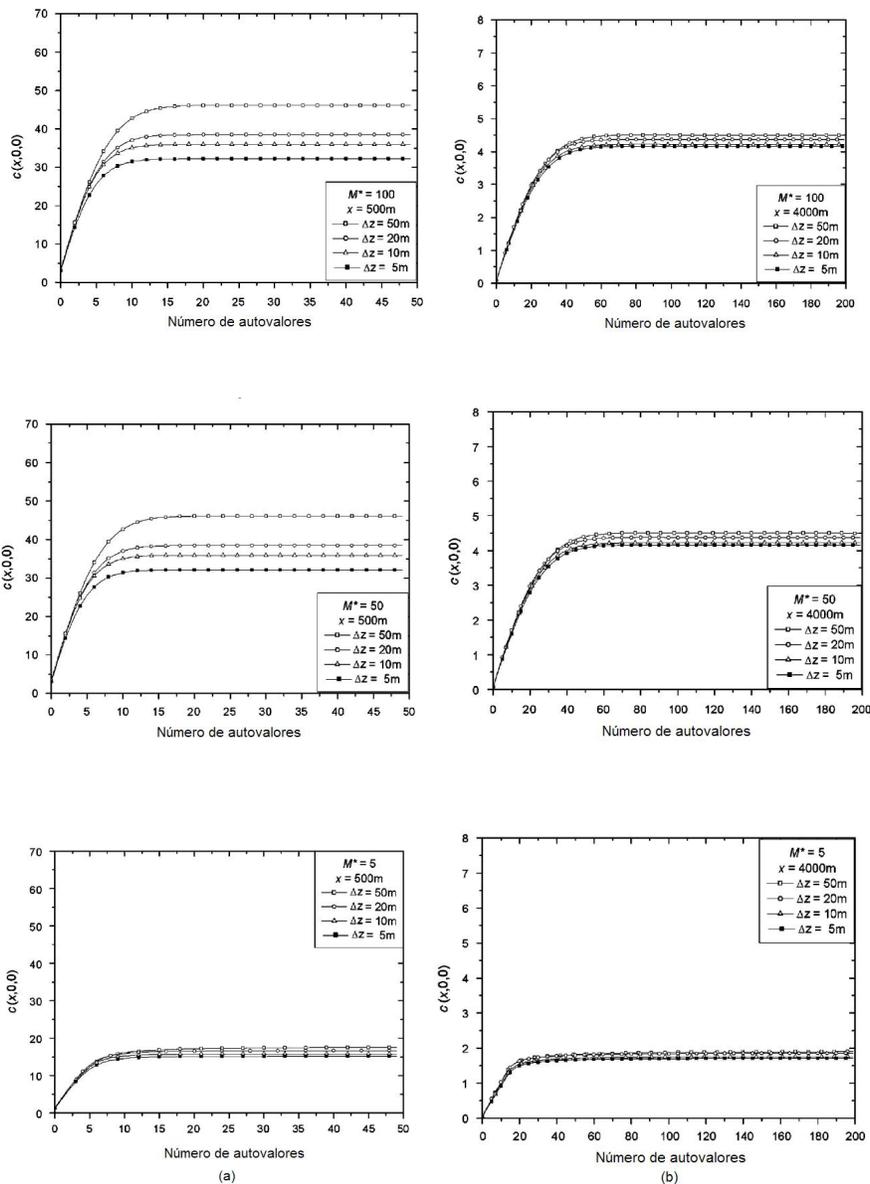


Figura 10.5 – Convergência numérica da solução proposta para a concentração com o aumento dos números dos autovalores e da discretização vertical que considera o algoritmo de Talbot com número de termos no somatório $M^* = 5, 50, 100$ e distâncias da fonte de: (a) $x = 500m$ e (b) $x = 4000m$. Experimento 8 de Copenhagen.

de termos do somatório $M^* = 5, 50, 100$ e distâncias da fonte $x = 500m$ e $x = 4000m$.

A análise a respeito do desempenho das técnicas de inversão da transformada de Laplace mostrada nas figuras (10.4) e (10.5) com a convergência numérica dos resultados conseguidos, mostra que houve uma significativa melhora na exatidão dos resultados ao utilizar o algoritmo de *Talbot*.

A tabela (10.1) apresenta a análise estatística do modelo apresentado comparado com os dados experimentais de Copenhagen para as concentrações integradas lateralmente e para as concentrações máxima.

Além disso, a tabela (10.1) mostra os resultados do modelo tridimensional estacionário integrado lateralmente, usando o coeficiente de difusão dado pela equação (8.1) sendo comparado com o caso de coeficientes constantes para investigar a eficiência do método multicamadas na qual utiliza a aproximação *stepwise* para os parâmetros turbulentos, inclusive para o coeficiente de difusão K_z dado pela equação (8.1). Para essa comparação foi usado um coeficiente difusivo médio constante. Inicialmente foi tomado o valor médio na variável z na equação (8.1) e depois na variável x . Segue abaixo o esquema utilizado para calcular o valor médio dos coeficientes de difusão [Moreira et al., 2005a]:

$$\bar{K}_\alpha = \frac{1}{x_r} \int_{x_r}^0 K_\alpha(x') dx' \quad (10.1)$$

onde:

$$K_\alpha(x') = \frac{1}{h} \int_h^0 K_\alpha(x, z) dz \quad (10.2)$$

e h é a altura da CLP, x_r é a distância do receptor e $\alpha = x, y, z$.

Analisando os índices estatísticos da tabela (10.1) é possível observar que o modelo simula satisfatoriamente as concentrações observadas, com valores de *nmse*, *fb* e *fs* relativamente próximos de zero e *Cor* e *fa2* relativamente próximo a 1.

Observando os resultados do modelo com a equação (8.1) pode-se notar que são diferente ao resultado com coeficientes constantes em toda CLP. Conseqüentemente, a solução da equação de difusão-advecção que considera uma CLP verticalmente não-homogênea,

Tabela 10.1 – Índices estatísticos para os dados de Copenhagen com coeficientes difusivos dado pela equação (8.1)

<i>Modelo</i>	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
$c^y(x, 0)/Q$	0.06	0.91	1.00	0.07	0.15
$c(x, 0, 0)/Q$	0.10	0.90	0.90	-0.06	0.22
$c^y(x, 0)/Q$ (<i>K</i> constante)	1.23	0.77	0.77	-0.60	-0.82

discretizando-a em um sistema multicamadas (como é o caso do método ADMM), e um coeficiente de difusão apropriado como a equação (8.1) melhoram os resultados.

Sendo assim, pode-se afirmar que o modelo tridimensional estacionário dado pela equação (3.56) apresenta resultados com boa exatidão sob o ponto de vista estatístico.

Na figura (10.6) é apresentado o gráfico do perfil vertical da concentração utilizando o esquema numérico de inversão *Quadratura Gaussiana* dado pela equação (3.61) e o gráfico do perfil vertical da concentração utilizando o esquema numérico de inversão de *Talbot* dado pela equação (3.66), ambos utilizando discretizações $\Delta z = 5m$ e $\Delta z = 2m$. Ambos foram simulados para o experiento 8 de Copenhagen.

Observando a figura (10.6) pode-se observar na altura da fonte ($H_s = 115m$) uma melhora considerável dos resultados pelo método de *Talbot* para ambas discretizações. Portanto pode-se afirmar que o método **GIADMT** com o algoritmo de *Talbot* é um método robusto e eficiente para simulação da dispersão de poluentes na atmosfera.

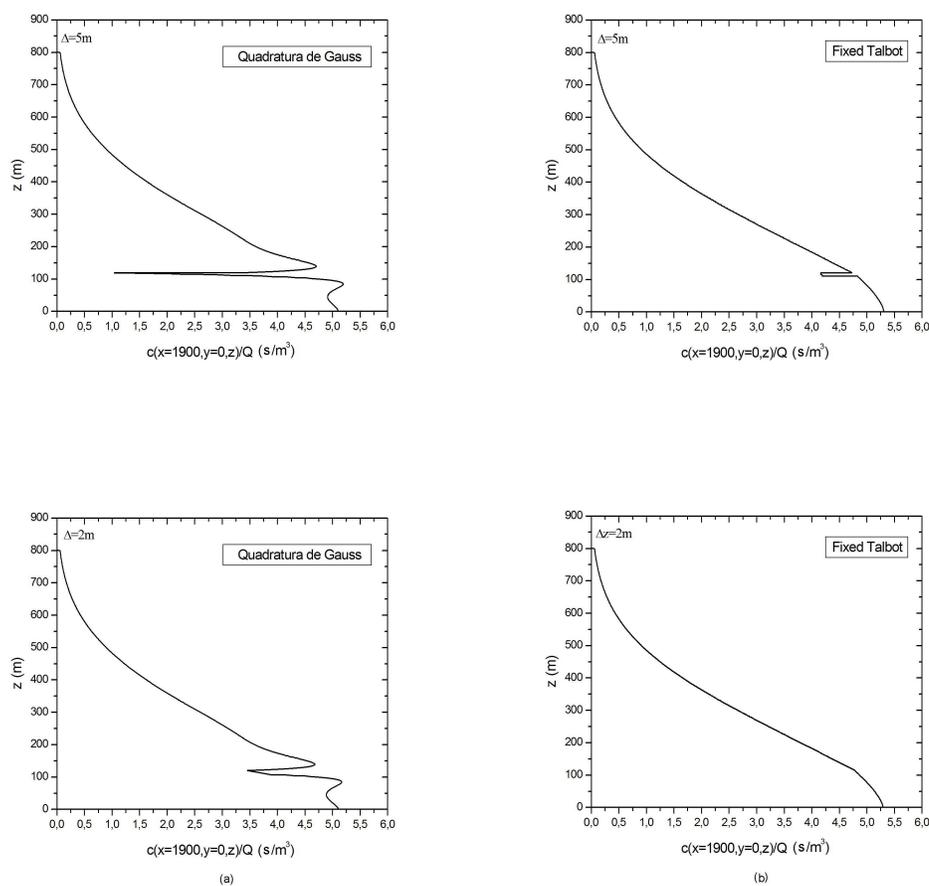


Figura 10.6 – Perfil vertical da concentração a nível do solo normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) para o experient 8 de Copenhagen com $\Delta z = 5m$ e $\Delta z = 2m$, utilizando os esquemas numéricos de inversão: a) *Quadratura de Gauss*, b) *Algoritmo de Talbot*

10.2 Solução tridimensional fechamento não-local

A fim mostrar um exemplo da aplicação da solução (4.28) tridimensional com o fechamento não-local e avaliar o desempenho da parametrização da CLP dada pelas equações: (8.12) para o coeficiente de difusão vertical, (8.7) para a difusão lateral, (8.13) para a escala de tempo Lagrangeana vertical, (8.14) para o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical e (8.19) para o perfil do vento, o modelo foi aplicado a dois conjuntos de dados experimentais com emissões de poluentes e cenários meteorológicos diferentes: Copenhague[†] e Kinkaid[‡].

O efeito da ascensão da pluma (*plume rise*) foi avaliado usando a aproximação proposta por Briggs [Briggs, 1975], conforme descrito no capítulo 7.

O desempenho da solução foi avaliado para dois valores diferentes para o *skewness*: $S_k = 1$, como sugerido por van Dop e Verver [van Dop e Verver, 2001] e $S_k = 0.6$, como sugerido por Wyngaard e Weil [Wyngaard e Weil, 1991]. Na figura (10.7) tem-se o gráfico de espalhamento entre as concentrações observadas em função das concentrações preditas pelo modelo para o experimento de Copenhague, enquanto a figura (10.8) mostra o gráfico de espalhamento para o experimento de Kinkaid.

Analisando as figuras (10.7) e (10.8) pode-se notar uma boa convergência dos dados observados com os dados preditos pelo modelo para ambos experimentos e para os dois valores utilizados para o *skewness* S_k . Ainda observa-se pouca diferença entre os resultados obtidos para $S_k = 0.6$ e $S_k = 1.0$.

As tabelas (10.2) e (10.3) mostram os índices estatísticos do modelo tridimensional com fechamento não-local apresentado comparado com os dados experimentais de Copenhague e Kinkaid respectivamente para as concentrações máximas.

A análise dos índices estatísticos obtidos apresentados nas tabelas (10.2) e (10.3) revelam um acordo razoável entre os valores computados comparados aos experimentais sem diferença significativa entre os dois valores do *skewness* S_k .

Além disso, a concentração integrada lateralmente foi confrontada com os dados de laboratório do experimento de tanque de Willis e Deardorff [Willis e Deardorff, 1976]. O experimento foi realizado em um tanque com camadas estratificadas de água, no qual a

[†]experimento detalhado no capítulo 9 na seção 9.1.1

[‡]experimento detalhado no capítulo 9 na seção 9.1.2

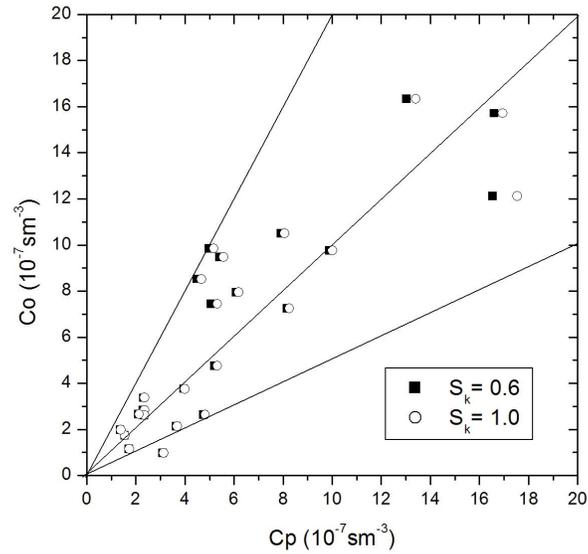


Figura 10.7 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração máxima (C_o) em comparação com os resultados de concentração máxima do modelo com fechamento não-local (C_p). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q).

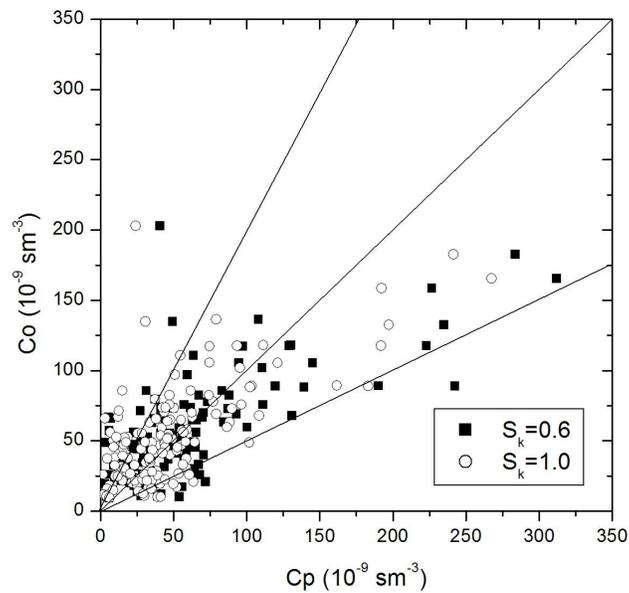


Figura 10.8 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Kinkaid dos dados observacionais de concentração máxima (C_o) em comparação com os resultados de concentração máxima do modelo com fechamento não-local (C_p). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão

Tabela 10.2 – Índices estatísticos para os dados de Copenhagen para diferentes valores de S_k

<i>Modelo</i>	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
$S_k = 0.6$	0.14	0.88	0.96	0.09	0.034
$S_k = 1.0$	0.14	0.87	0.96	0.07	-0.003

Tabela 10.3 – Índices estatísticos para os dados de Kinkaid para diferentes valores de S_k

<i>Modelo</i>	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
$S_k = 0.6$	0.47	0.72	0.71	-0.02	-0.40
$S_k = 1.0$	0.43	0.68	0.67	0.10	-0.22

convecção foi inicialmente mantida pela aplicação de uma taxa de aquecimento elevada no limite inferior do tanque (resultando uma forte convecção). Para se estudar os processos de dispersão turbulenta no interior deste tanque foram liberadas gotas de óleo sem empuxo a uma determinada altura ao longo de uma linha estendendo-se no comprimento do tanque.

Para simular os experimento de tanque foram utilizados dados meteorológicos gerado por LES (large-eddy simulation) relatados por Weil et al. [Weil et al., 2004]. Sendo considerado a altura da CLP $z_i = 1000m$; velocidade convectiva $w_* = 2m$; rugosidade do terreno $z_0 = 0.16m$; velocidade de fricção $u_* = 0.31m/s$, velocidade de vento médio $U = 3m/s$, comprimento de Monin-Obukhov $L = -9.4m$ e altura da fonte $H_s = 70m$.

A figura (10.9) mostra a concentração integrada lateralmente c^y adimensional na superfície como função da distancia adimensional próximo a fonte $z/z_i = 0.07$ na CLP comparados com dados do experimento de tanque de Willis e Deardorff [Willis e Deardorff, 1976]. Esta figura destaca as diferenças principais entre resultados com e sem o termo de contragradiente (S_k). A concentração superficial alcança dois picos de máximos aproximadamente na mesma posição da distância horizontal da fonte. No mesmo ponto os dois gráficos manifestam o pico máximo (este resultado é muito importante do ponto de vista operativo). A razão para uma diferença tão grande entre as duas curvas é devido à definição do termo de contragradiente β_n introduzido na equação (4.4) que é dependente do *skewness* S_k . Certa-

mente, em distâncias horizontais próximas da fonte, onde o gradiente longitudinal horizontal não é zero a contribuição é significativa, porque quando aumenta a distância horizontal da fonte a contribuição para c^y diminui devido a homogeneização da concentração.

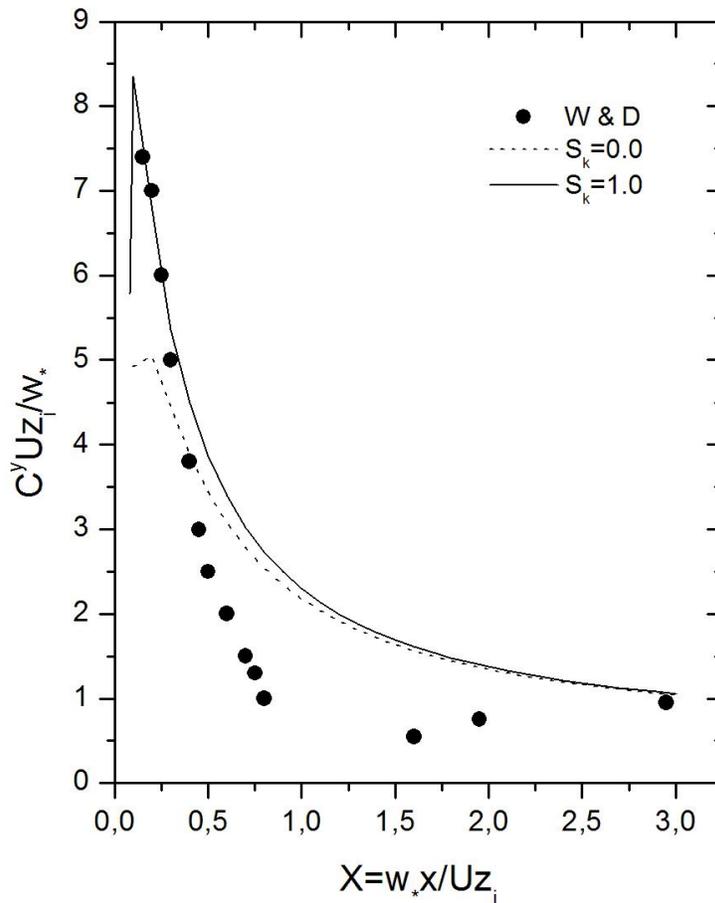


Figura 10.9 – Concentração integrada lateralmente c^y adimensional na superfície como função da distancia adimensional próximo a fonte $z/z_i = 0.07$ na CLP comparados com dados do experimento de tanque de Willis e Deardorff.

A figura (10.10) mostra o perfil vertical da concentração adimensional relativo a quatro distâncias adimensionais horizontais da fonte. Neste caso, os dados experimentais não destacam nenhuma diferença significativa entre as duas simulações (com e sem S_k) porque ambos representam bem os dados do experimento de tanque. De qualquer forma, o objetivo destas simulações, foi esboçar uma nova solução da equação de difusão-advecção

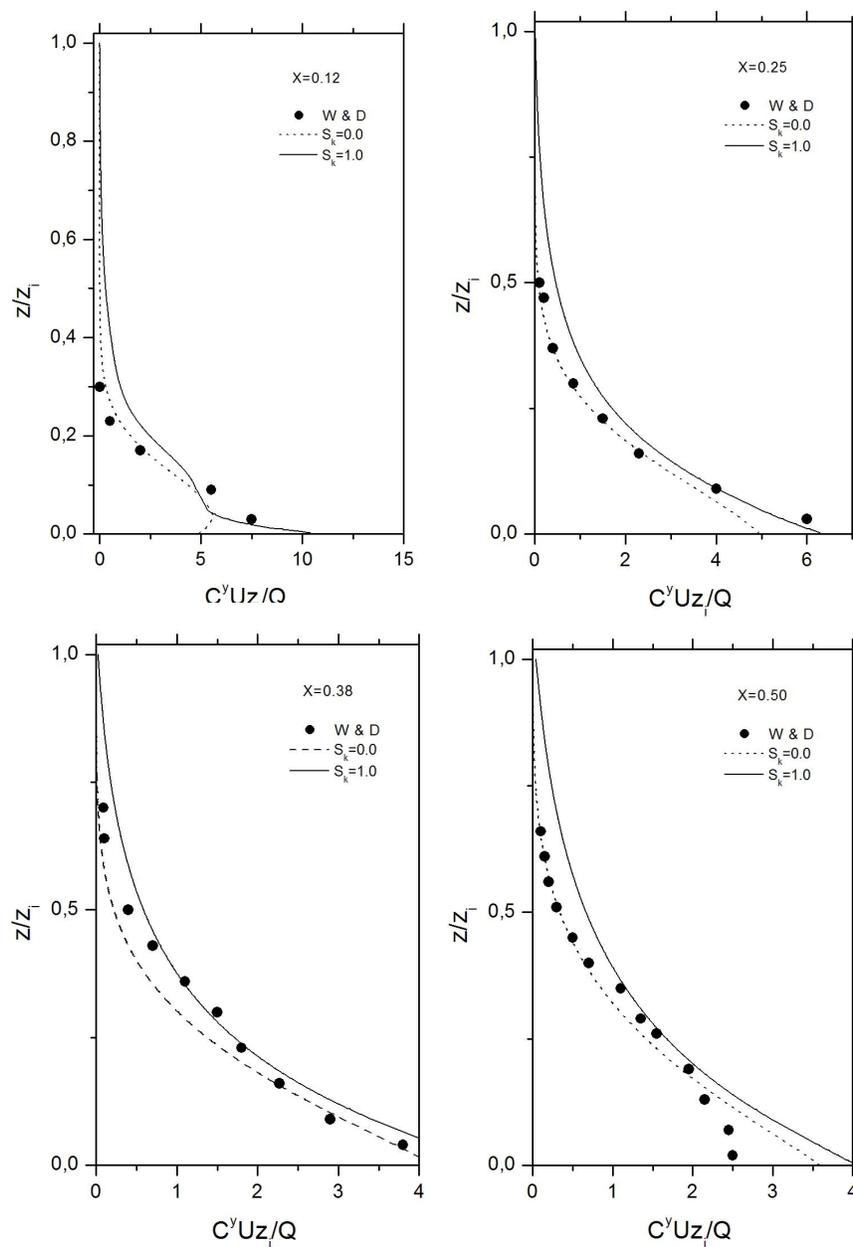


Figura 10.10 – Concentração integrada lateralmente c^y adimensional como função da altura adimensional para as quatro distâncias adimensionais X na direção do vento, comparados com dados do experimento de tanque de Willis e Deardorff.

que inclui a possibilidade de considerar o termo countragradiente dado pela equação (4.2) e a existência da própria solução (4.28) apresentada (que está de acordo com dados experimentais).

10.3 Solução tridimensional transiente com fechamento local

Para avaliar o desempenho do modelo tridimensional transiente com fechamento local dado pela equação (5.20), foram utilizados dados observados no experimento de Copenhagen[§].

No experimento de Copenhagen, as medidas de concentração máxima começaram 1h depois do início das emissões, ou seja, depois de uma hora de emissão é que as concentrações começaram a ser medidas. Os dados micrometeorológicos como, velocidade de fricção (u_*) e comprimento de Monin-Obukhov (L), foram medidos a cada 10 minutos desde o início das emissões.

Neste trabalho, foram feitos médias desses dados micrometeorológicos desde o momento inicial da emissão, até o instante de cada medida de concentração. Isso devido ao fato que a parametrização da turbulência como os coeficientes de difusão (K_z e K_y) dados pelas equações (8.6) e (8.7), e perfil do vento (\bar{u}) dado pela equação (8.19), não são dependentes do tempo.

A figura (10.11) mostra o gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração máxima (Co) em comparação com os resultados de concentração máxima do modelo (Cp). Observa-se pelo gráfico de espalhamento da figura (10.11) uma boa concordância dos resultados do modelo gerados através da equação (5.20) quando utiliza-se como coeficientes de difusão as equações (8.6) e (8.7) e perfil de vento potência (8.19).

A figura (10.12) mostra a evolução temporal da concentração para diferentes distâncias da fonte, nos diversos experimentos de Copenhagen. Nestas figuras, pode-se perceber que com o passar do tempo os modelos de dispersão atingem o regime permanente em todos os casos como esperado.

A tabela (10.4) mostra a análise estatística do modelo tridimensional transiente comparado com os dados de Copenhagen.

[§]experimento detalhado no capítulo 9 na seção 9.1.1

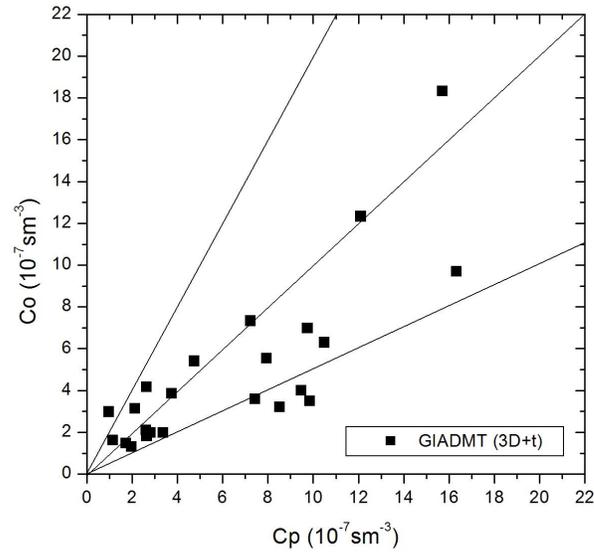


Figura 10.11 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo (Cp). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q).

Tabela 10.4 – Índices estatísticos para os dados tridimensionais transientes de Copenhagen.

<i>Modelo</i>	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
$3D + t$	0.29	0.81	0.78	0.26	0.13

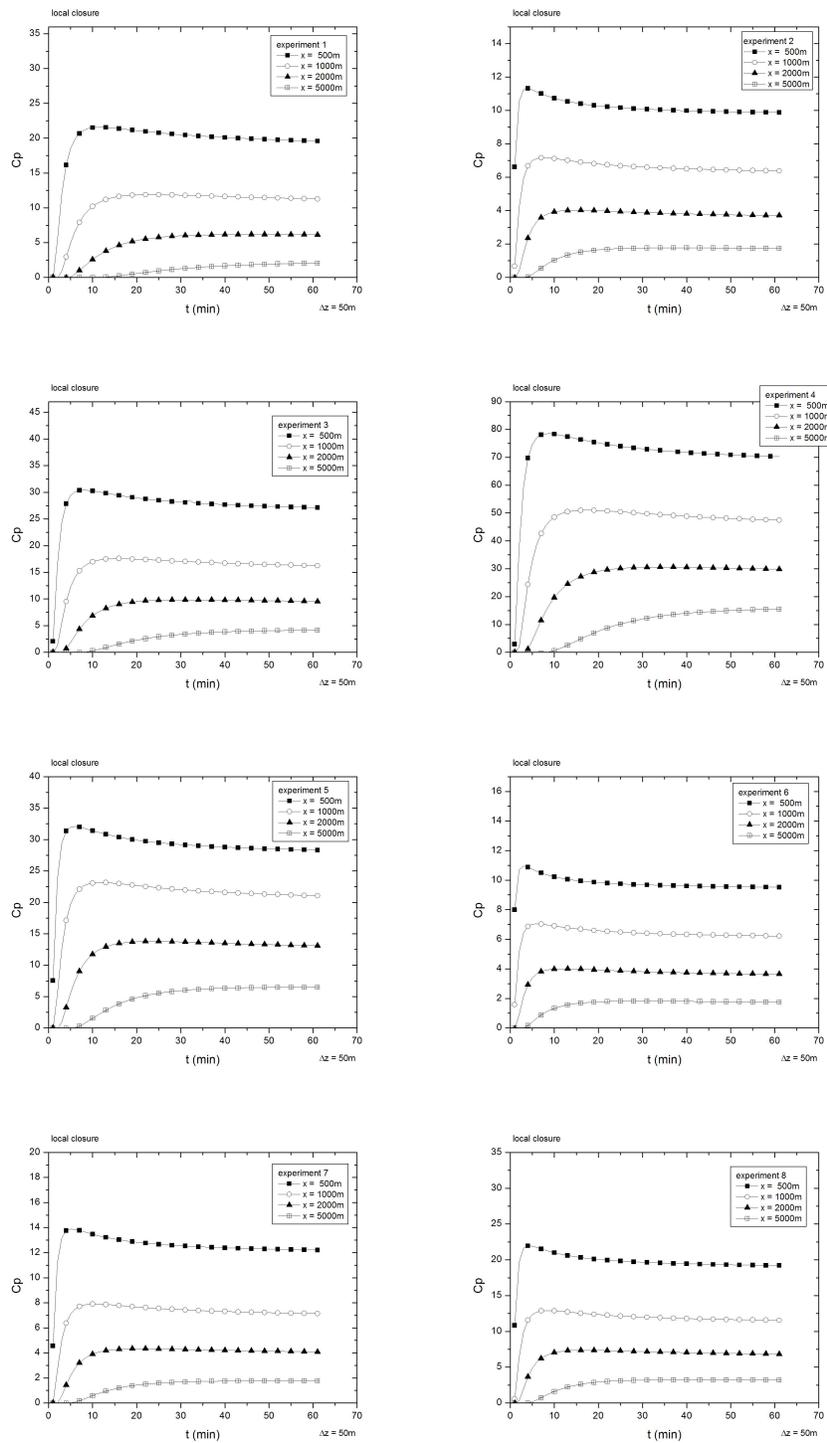


Figura 10.12 – Evolução temporal da concentração para diferentes distâncias da fonte, para diversos experimentos de Copenhagen.

Analisando os índices estatísticos na tabela (10.4) é possível notar que o modelo tridimensional transiente com fechamento local dado pela equação (5.20) simula satisfatoriamente as concentrações observadas, porque os valores de $nmse$, fb e fs são relativamente próximos de zero e os índices cor e $fa2$ são relativamente próximos de um.

Lembrando que a parametrização utilizada não é dependente do tempo, ou seja, os coeficientes de difusão e o perfil do vento aplicados não estão definidos como funções do tempo, e por isso foram feitos médias dos dados micrometeorológicos do experimento de Copenhagen desde o momento inicial da emissão até o instante de cada medida de concentração. Acredita-se que esta média justifica os pontos encontrados fora do *fator de 2* ($fa2$).

Espera-se melhorar estes resultados resolvendo o modelo com o coeficiente de difusão dependente do tempo bem como alterando o cálculo a média.

10.4 Solução tridimensional transiente fechamento não-local

Para avaliar a performance do modelo não-Fickiano tridimensional dependente do tempo dado pela equação (6.13), os dados gerados foram confrontados com os dados do experimento de Copenhagen[¶]. Foram utilizados os coeficientes de difusão definidos pelas equações (8.6) e (8.7), perfil do vento dado pela equação (8.19), escala de tempo Lagrangeana vertical utilizou-se a equação (8.13), e para o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical tem-se a equação (8.14).

Sabe-se que o modelo bidimensional com o fechamento não-Fickiano gera melhores resultados para fonte baixa, fonte superficial, e que no caso de fonte alta, como por exemplo o experimento de Copenhagen, sabe-se que assimetria é mais influente na distância de máxima concentração, alterando o valor do máximo [Costa, 2004]. Sendo assim, a parametrização utilizada (conforme citada acima) no modelo tridimensional transiente não-Fickiano (equação (6.13)) é a mesma parametrização utilizada para o caso tridimensional transiente com fechamento local (equação (5.20)) apresentado na *seção 10.3*, a fim de se poder realizar uma comparação entre os dados gerados para ambos os fechamentos: local e não-local e investigar se o modelo não-Fickiano tridimensional transiente também gera melhores resultados.

A figura (10.13) mostra o gráfico de espalhamento para o experimento de Cope-

[¶]experimento detalhado no capítulo 9 na seção 9.1.1

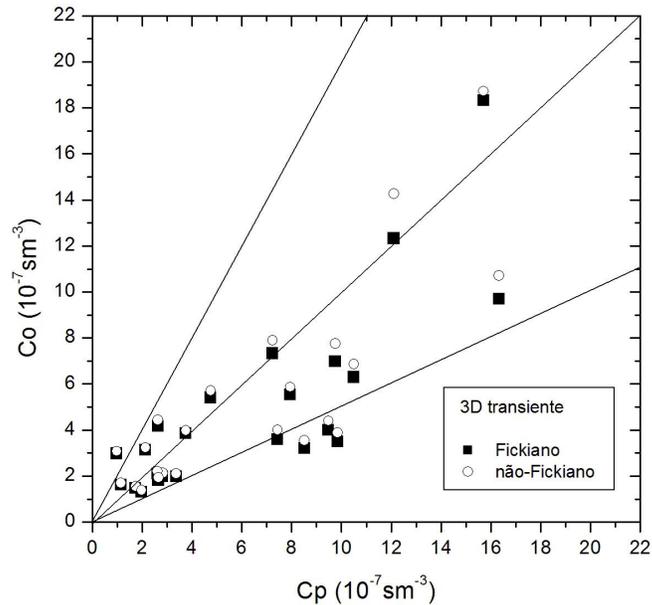


Figura 10.13 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo não-Fickiano transiente (Cp). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q).

nhagen dos dados observacionais de concentração máxima (Co) em comparação com os resultados de concentração máxima dos modelos tridimensionais transientes Fickiano (5.20) e não-Fickiano (6.13) (Cp). Observa-se pelo gráfico de espalhamento da figura (10.13) uma boa concordância dos resultados entre os dados experimentais e os dados gerados pelos modelos considerando o fechamento local e não-local.

A figura (10.14) mostra a evolução temporal da concentração para diferentes distâncias da fonte, nos diversos experimentos de Copenhagen. Nestas figuras, pode-se perceber que com o passar do tempo o modelo de dispersão atinge o regime permanente em todos os casos conforme o esperado.

Analisando as figuras (10.12) e (10.14) pode-se perceber que com o passar do tempo os modelos de dispersão de fechamento local e não-local, representados pelas equações (5.20) e (6.13) respectivamente no presente trabalho, atingem o regime permanente em todos os casos. Para o caso não-fickiano (figura (10.14)) verifica-se o efeito do transporte não-local, pois a influência da assimetria na concentração de poluentes é significativa uma vez que

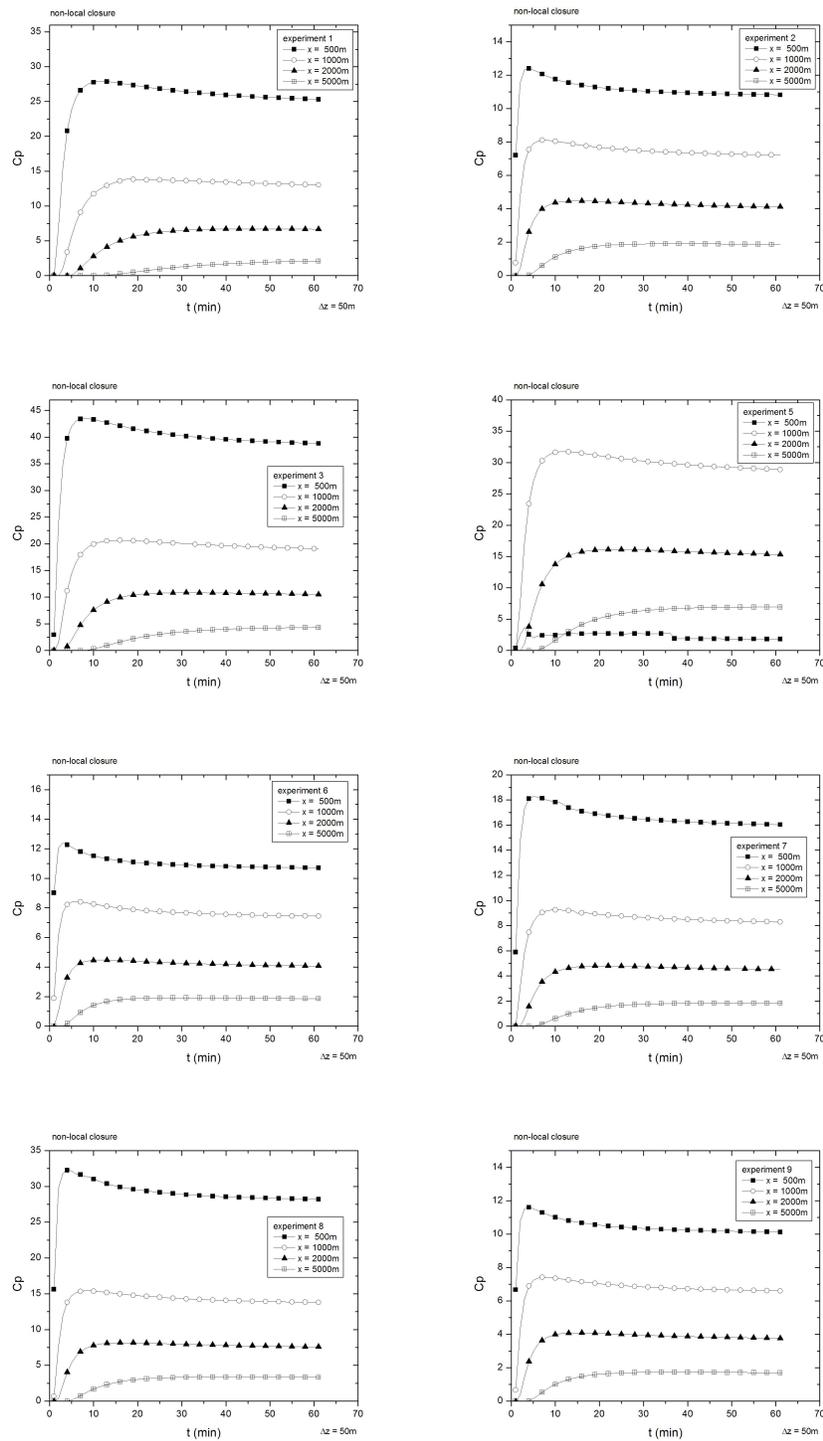


Figura 10.14 – Evolução temporal da concentração do modelo tridimensional transiente não-Fickiano para diferentes distâncias da fonte, para diversos experimentos de Copenhagen.

altera quantitativamente o pico da concentração máxima.

A tabela (10.5) mostra a análise estatística do modelo tridimensional transiente comparado com os dados de Copenhagen.

Tabela 10.5 – Índices estatísticos para os dados de Copenhagen

<i>Modelo</i>	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
transiente não-local	0.23	0.83	0.83	0.18	0.07

Analisando os índices estatísticos na tabela (10.5) é possível afirmar que o modelo tridimensional transiente com fechamento não-local dado pela equação (6.13) simula satisfatoriamente as concentrações observadas, com valores de *nmse*, *fb* e *fs* relativamente próximos de zero e *cor* e *fa2* relativamente próximos de um.

Comparando a tabela (10.5) de índices estatísticos do modelo transiente com fechamento não-local, com a tabela (10.4) de índices estatísticos do modelo transiente com fechamento local, pode-se notar que os resultados do modelo com fechamento não-local dado pela equação (6.13) apresenta resultados relativamente melhores que o modelo com fechamento local dado pela equação (5.20). Um vez que que o modelo não-local gerou valores de *nmse*, *fb* e *fs* menores e valores para *cor* e *fa2* maiores que os apresentados na tabela (10.4).

A figura (10.15) mostra a distribuição da concentração no plano *xy* horizontal ao nível do solo (ng/m^3) para os modelos Fickiano e não-Fickiano, depois de 1h de emissão. As linhas representam as isolinhas de concentração.

Observando a figura (10.15), mais uma vez pode-se perceber o efeito do transporte não-local, pois além de alterar o valor de máxima concentração altera também a posição do máximo de concentração, o deslocando para direita, ou seja, aparece concentrações elevadas próximas a fonte ($x < 100m$) e também para valores de x entre $750m$ e $1250m$.

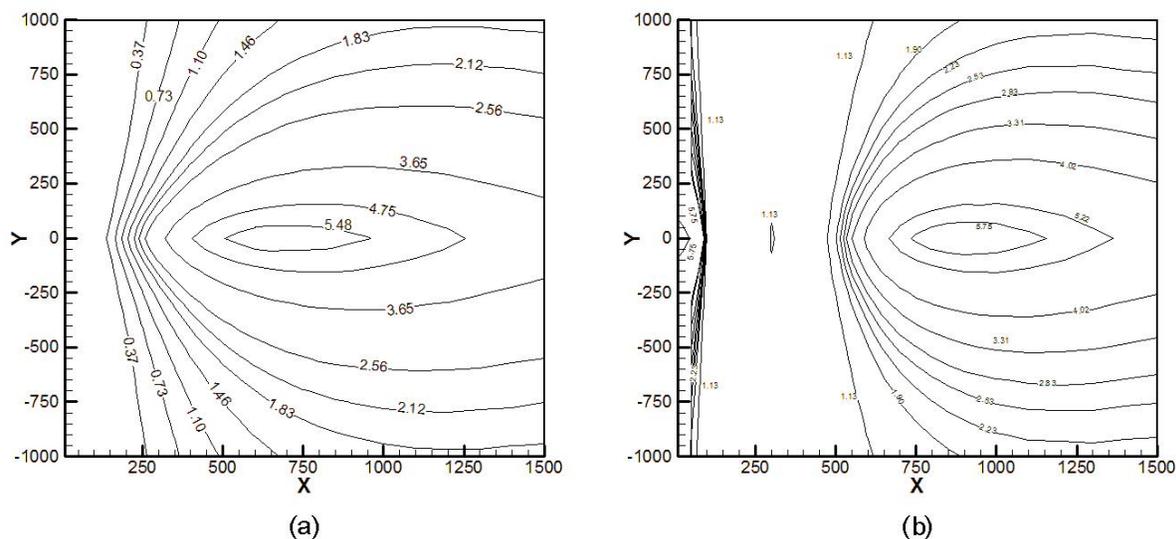


Figura 10.15 – Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo com taxa de emissão normalizada (c/Q) para $t = 3600s$, (a) Fickiano e (b) não-Fickiano. Experimento 8 de Copenhagen.

10.5 Comentários gerais

Sabe-se que a aproximação *stepwise* de uma função contínua converge à uma função contínua, quando o *stepwise* da aproximação vai a zero ($\Delta z \rightarrow 0$). Mas quanto menor o valor de Δz maior o número de subcamadas (N) e, conseqüentemente maior o número de cálculos que o programa faz. Lembrando que para se determinar as constantes de integração C_{1n} e C_{2n} , aplica-se as $(2N - 2)$ condições de continuidade de interface (3.25) e (3.26), e chega-se a um sistema linear (3.49) de dimensão ($d = 2N$).

Sendo assim, acumula-se erros de arredondamentos ao resolver este sistemas quanto menor for o Δz e/ou maior for o N . Mas então, como saber qual o Δz ideal? Este é um problema em aberto... A fim de ilustração foi tomado o experimento 1 (experimento de fonte baixa e convecção intensa) e o experimento 8 (experimento de fonte alta e convecção intensa) de Copenhagen pois ambos possuem concentrações medidas em $x = 1900m$ e foi feito um gráfico onde variando o valor de Δz tem-se um erro relativo diferente definido pela seguinte

expressão:

$$erro = \frac{|Co - Cp|}{|Co|} \quad (10.3)$$

onde Co indica a concentração observada e Cp a concentração predita pelo modelo.

Assim a figura (10.5) ilustra o comportamento do erro em função de Δz .

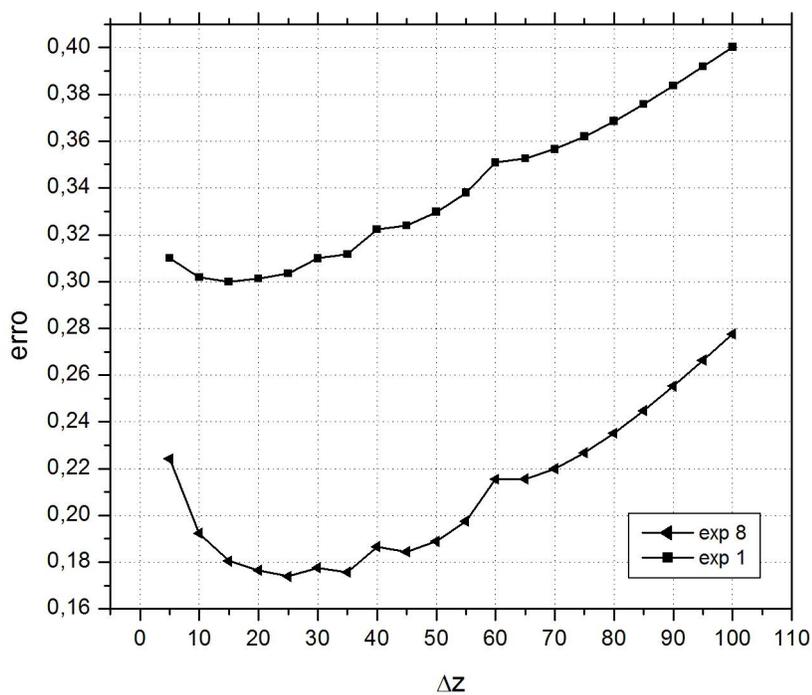


Figura 10.16 – Comportamento do erro em função de Δz

Como pode-se observar na figura (10.5) o erro nem sempre aumenta com o aumento de Δz mas também nem sempre diminui quando Δz tende a zero. Para o experimento 1, o valor ideal de Δz está compreendido entre 10 e 20m, já para o experimento 8 o valor ideal de Δz está compreendido entre 20 e 40m.

11. Conclusão

Face ao que foi aqui apresentado, pode-se assegurar que o objetivo principal do presente trabalho foi atingido, pois obteve-se a solução analítica da equação de difusão-advecção tridimensional dependente do tempo tendo-se a certeza de que a solução encontrada permite calcular a dispersão de poluentes na atmosfera.

O teorema de Cauchy-Kowaleski garante a existência e unicidade de uma solução analítica para a equação de difusão-advecção [Courant e Hilbert, 1989], assegurando deste modo, que a solução analítica, encontrada através do método **GIADMT** aqui apresentado, é de fato solução do problema proposto.

Observando o comportamento da solução via **GIADMT** e os resultados obtidos apresentados no decorrer do presente trabalho, pode-se afirmar que o método **GIADMT** com o algoritmo de *Talbot* é um método robusto e eficiente para simulação da dispersão de poluentes na atmosfera para todos os modelos considerados

O método **GIADMT** foi utilizado para encontrar a solução analítica para a equação de difusão-advecção tridimensional estacionária, e também a solução tridimensional transiente, possibilitando a modelagem de dispersão de poluentes na atmosfera utilizando uma parametrização qualquer, ou seja, para qualquer coeficiente difusivo e qualquer perfil de vento. Ainda, como pôde ser visto no decorrer do presente trabalho, é um método aplicável tanto para o caso de fechamento fickiano da turbulência como para o caso de fechamento não fickiano, mostrando que o método **GIADMT** é realmente um método eficiente.

Além do mais, a solução tridimensional transiente determinada pelo método **GIADMT** é uma solução **geral** do problema de modelagem de poluentes, uma vez que sempre se reduz a casos particulares, isto é, a solução tridimensional transiente recai na solução tridimensional estacionária quando o tempo tende a infinito ($t \rightarrow \infty$), da mesma forma que, quando a solução tridimensional estacionária é integrada lateralmente, se tem a solução para o caso bidimensional estacionário solucionado pelo método ADMM. Ainda, as soluções encontradas para os modelos com o fechamento não-local da turbulência reincide nas soluções

dos modelos com fechamento local quando os termos responsáveis pelo transporte não-local tendem a zero ($\beta \rightarrow 0$).

Outrossim, o método **GIADMT** pode ser aplicado em modelos operativos para descrever a dispersão de muitas quantidades escalares, tais como: poluição do ar (como é o caso do presente trabalho), material radioativo, calor e assim por diante, comprovando ser um modelo, além de simples, também robusto de ampla aplicabilidade.

O caráter analítico da solução encontrada pelo método **GIADMT** é um fator que torna a solução ainda mais eficaz, uma vez que ao se resolver analiticamente a equação de difusão-advecção elimina-se os erros de aproximações feitas presentes nas resoluções numéricas, ou seja, as únicas possibilidades de erro presente na solução aqui encontrada são o erro de modelagem, e erro da aproximação *stepwise*.

Convém salientar que os resultados produzidos por modelos que refletem o transporte turbulento na atmosfera estão sujeitos a fontes de erros devido a vários fatores, tais como a incerteza de variáveis intrínsecas: parametrizações utilizadas e dados micrometeorológicos. E, como nenhuma aproximação é feita durante a derivação da solução através do método **GIADMT**, exceto a aproximação *stepwise* para os parâmetros turbulentos que dependem da altura, pode-se afirmar que a solução é precisa.

Para ampliar a aplicabilidade do método e torná-lo mais abrangente, sugere-se desenvolver essa metodologia para modelar o fenômeno de meandro do vento acrescentando no modelo a componente lateral (\bar{v}) do vento, ou seja, ($\bar{v} \neq 0$), (como a componente vertical do vento \bar{w} é muito menor que a demais componentes pode ser desprezada).

Sugere-se também, considerar fonte arbitrária com emissão instantânea, em condições meteorológicas não homogêneas e não estacionárias, para descrever o campo de concentração como a soma de “*puffs*”, ou seja, um modelo a “*puff*”.

Ainda, sugere-se considerar no modelo a difusão na direção x , i.é., ($K_x \neq 0$) para modelar condições de vento fraco.

O método foi aplicado na modelagem de dispersão de poluentes atmosféricos na qual se considera terrenos com a superfície plana. Uma forma simples de levar em conta terrenos complexos é considerar um campo de vento turbulento que considere a topografia do terreno, que pode ser gerado por *LES* (*Large Eddy Simulation*), *Worf*, entre outros, “agindo” de modo análogo a teoria K, onde a parametrização da turbulência é modelada

somente no coeficiente de difusão e é este coeficiente de difusão turbulento que é responsável pela complexidade da turbulência. Portanto, modelar a topografia do terreno no campo de vento é possível para o método **GIADMT** pois, como já foi dito anteriormente, neste método é possível empregar qualquer perfil de velocidade do vento.

Um problema ainda em aberto, e tem-se como objetivo de trabalhos futuros, é determinar um modelo operacional a fim de utilizá-lo como um sistema de controle da poluição do ar, ou seja, um modelo capaz de estimar a dispersão de poluentes de uma indústria e poder avaliar se a mesma está nos padrões da qualidade do ar desejado ou não. Um modelo eficiente que sirva para a avaliação de fontes existentes e a implantação de novas indústrias.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

Arya, P., 1995. “Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds”, **Journal of Applied Meteorology**, (34).

Barad, M. L., 1958. “Project Prairie-Grass: A field program in diffusion”, **Geophys. Res. , Air Force Cambridge research Centre , USA**, (59 (II) TR - 58 - 235 (II)).

Berlyand, M., 1975. “**Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere**”. Translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA, 2 edition.

Briggs, G. A., 1975. “Plume Rise Predictions”, **Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses**, D.A. Haugen ed., **American Meteorological Society**, vol. Boston, MA, pp. 59–111.

Brown, M. J. and Arya, S. P. S., 1989. “Vertical dispersion from surface and elevated releases”, **Proc. Sixth Joint Conference on Application of air pollution meteorology**, vol. Anaheim, CA (USA), pp. 163–166.

Buligon, L., 2004. “**On the solution of the one-dimensional time-dependent advection-diffusion equation for simulation of contaminant dispersion in the Planetary Boundary Layer**”, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS.

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

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

Buske, D., Costa, C. P., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., a. V. M. T., 2007a. “An air pollution model based on the GILTT analytical approach”, **5.º Simpósio de Meteorologia e Geofísica da APMG**.

Buske, D., Costa, C. P., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2005a. “Simulação da dispersão de poluentes na CLE usando os métodos GILTT e ADMM.”, **Congresso Argentino de Meteorologia**.

Buske, D., Costa, C. P., Tirabassi, T., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2007b. “An unsteady analytical solution of advection-diffusion equation for low wind conditions”, **XXVII CILAMCE - Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**.

Buske, D., Moreira, D. M., Tirabassi, T., and Vilhena, M. T., 2006a. “The GILTT time-dependent two-dimensional advection-diffusion equation for the pollutant dispersion simulation in atmosphere”, **6th International Conference on Urban Climate - 6th ICUC**.

Buske, D., Moreira, D. M., Tirabassi, T., and Vilhena, M. T., 2007c. “An unsteady two-dimensional analytical solution for modeling air pollution dispersion and turbulent dry deposition”, **19th International Congress of Mechanical Engineering - 19th COBEM**.

Buske, D., Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Segato, C. F., 2005b. “Solução da equação de difusão-advecção dependente do tempo bidimensional pelo método GILTT para simulação de contaminantes na camada limite convectiva”, **Revista Ciência & Natura**, pages 281–284.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and BODMANN, B., 2007d. “An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach”, **In: Constanda, C.; Nashed, Z.; Rollins, D.. (Org.). Integral Methods in Science and Engineering.**, vol. 1, pp. 1–10.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Brauer, C. R. N., 2006b. “The GILTT solution for the tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant”, **International Youth Nuclear Congress - IYNC**.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2006c. “An analytical solution for air pollution dispersion in low wind conditions”, **XIV Congresso Brasileiro de Meteorologia - CBMET**.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2006d. “Analytical solution for the transient two-dimensional advection-diffusion equation considering nonlocal closure of the turbulent diffusion”, **Book of proceedings organized by: Hanjalic, H.; Nagano, Y.; Jakirlic, S.. New York : Begel House Inc., 5th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer**, pages 705–708.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2007e. “Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective Planetary Boundary Layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 41, pp. 5496–55014.

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

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

Caughey, S. J., 1982. “Observed characteristics of the atmospheric boundary layer”, **Atmospheric turbulence and air pollution modeling**.

Chrysikopoulos, C., Hildemann, L. M., and Roberts, P. V., 1992. “A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground level area source”, **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 747–757.

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

Costa, C. P., Buske, D., Tirabassi, T., a. M. D. M., and Vilhena, M. T., 2007a. “A solution of the steady-state three-dimensional advection-diffusion equation with non-local turbulence closure”, **5.º Simpósio de Meteorologia e Geofísica da APMG**.

Costa, C. P., Buske, D., Tirabassi, T., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2007b. “A comparison between an analytical and semi-analytical solution of the steady-state two-dimensional advection-diffusion equation with deposition at the ground”, **XXVII CILAMCE - Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**.

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

Costa, C. P., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2005a. “Contaminant dispersion simulation by solving the three-dimensional advection-diffusion equation combining the GILTT and ADMM methods”, **18th International Congress of Mechanical Engineering - 18th COBEM**.

Costa, C. P., Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Carvalho, J., 2003. “Solução da equação de difusão-advecção com o termo de contra-gradiente no fechamento da turbulência para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera”, **Revista Ciência & Natura**, pages 111–114.

Costa, C. P., Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Tirabassi, T., 2007c. “A three-dimensional analytical solution for radioactive contaminant dispersion in the atmosphere”, **International Nuclear Atlantic Conference - INAC**.

Costa, C. P., Tirabassi, T., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2007d. “An analytical air pollution model for buoyant plumes”, **19th International Congress of Mechanical Engineering - 19th COBEM**.

Costa, C. P., Vilhena, M. T., and Moreira, D. M., 2005b. “Analytical solution of the advection-diffusion equation using the ADMM method in stable conditions: Hanford experiment”, **XXVI CILAMCE - Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering**.

Costa, C. P., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Brauer, C. R. N., 2005c. “Solução da equação de difusão-advecção tridimensional dependente do tempo para a dispersão de poluentes na atmosfera através da técnica GIADMT”, **Revista Ciência & Natura**, pages 285–288.

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

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

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

Deardoff, J., 1966. “The countergradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory”, **Journal Atmospheric Science**, vol. 23, pp. 503–506.

Deardoff, J., 1972a. “Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers”, **Journal Atmospheric Science**, vol. 29, pp. 91–115.

Deardoff, J., 1972b. “Theoretical expression for the countergradient heat flux”, **J. Geophys. Res. Pap.**, n. 59, vol. 77, pp. 5900–5904.

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

Deardorff, J. M., 1972a. “Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers”, **Journal Atmospheric Science**, vol. 29, pp. 91–115.

Deardorff, J. W., 1970. “Convective velocity and temperature scales for the unstable planetary boundary layer and for Raleigh convection”, **J. Atmos. Society**, vol. 27, pp. 1211–1213.

Deardorff, J. W., 1972b. “Theoretical expression for the counter-gradient vertical heat flux”, **J. Geophys. Res.**, vol. 77, pp. 5900–5904.

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

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

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

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

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

Driedonks, A. G. and Tennekes, H., 1984. “Entrainment effects in the well-mixed atmospheric boundary layer”, **Boundary Layer Meteorology**, vol. 30, pp. 75–105.

Druilhet, A., Frangi, J., Guedalia, D., and Fontan, J., 1983. “Experimental studies of the turbulence structure parameters of the convective boundary layer”, **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 22, pp. 594–608.

Ertel, H., 1942. “Der vertikale turbulenz-wärmestrom in der atmosphäre”, **Meteor. Z.**, vol. 59, pp. 250–253.

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

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

Fisher, B. E. A., 1978. "The calculation of long term sulphur deposition in Europe", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 489–501.

Gevaldo, L. A., 2005. "**Análise da dispersão de poluentes na atmosfera usando a técnica da transformada integral generalizada**", Tese de doutorado, Programa de pós-graduação de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Gifford, F. A., 1975. "Atmospheric dispersion models for environmental pollution applications", **Lectures on air pollution and environmental impact analysis**, vol. DA Haugen, Ed., Amer. Meteor. Soc., Boston, pp. 35–58.

Golay, M. W., 1982. "Numerical modeling of buoyant plumes in a turbulent stratified atmosphere", **Atmospheric Environment**, vol. 16, pp. 2373–2381.

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

Gryning, S. E., 2002. "The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements", **Riso National Laboratory**.

Gryning, S. E. and Lyck, E., 1984. "Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations", **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 23(4), pp. 651–660.

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

Hanna, S., Briggs, G., and Jr. Hosker, R., 1982. "**Handbook on atmospheric diffusion**". J.S. Smith, Publication Editor, Prepared for the Office of Health and Environmental Research, Office of Energy Research, U.S. Department of Energy, DOE/TIC 11223.

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

Hanna, S. R. and Paine, R., 1989. “Híbrido Plume Dispersion Model (HPDM) development and evaluation”, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 28, pp. 206–224.

Hay, J. S. and Pasquill, F., 1959. “Diffusion from a continuous source in relation to the spectrum and scale of turbulence”, **Advances in Geophysics**, vol. 6, pp. 345–365.

Hinrichsen, K., 1986. “Comparison of four analytical dispersion models for near surface releases above a grass surface”, **Atmospheric Environment**, vol. 20, pp. 29–40.

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

Holtslag, A. and Moeng, C., 1991. “Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer”, **Journal Atmospheric Science**, vol. 48, pp. 1690–1698.

Kaimal, J., Wyngaard, J., Haugen, D., Coté, O., Izumi, Y., Caughey, S., and Readings, C., 1976. “Turbulence structure in the convective boundary layer”, **Journal Atmospheric Science**, vol. 33, pp. 2152–2169.

Kaimal, J. C. and Wyngaard, J. C., 1976. “Turbulence structure in the convective boundary layer”, **J. Atmos. Sci.**, vol. 33, pp. 2152–2169.

Koch, W., 1989. “A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption”, **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1729–1732.

Kreider, D., Kuller, R. C., Perkins, F. W., and Ostberg, D. R., 1972. “**Introdução à Análise Linear: Equações Diferenciais Lineares**”, volume 3. Ao livro técnico S/A, Rio de Janeiro.

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

Lamb, R. G., 1982. “**Diffusion in the convective boundary layer**”. Atmospheric Turbulence and air Pollution Modelling, F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, Eds., Reidel.

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

M. Sharan, M. S. and Yadav, A., 1996a. “Mathematical Model for Atmospheric dispersion in Low Winds with Eddy Diffusitives as a Linear functions of Downwind Distance”, **Atmospheric Environment**, vol. 30(7), pp. 1137–1145.

M. Sharan, A. Yadav, M. S. P. A. and Nigam, S., 1996b. “A Mathematical Model for Dispersion of Air Pollutantes in Low Wind conditions”, **Atmospheric Environment**, vol. 30(8), pp. 1209–1220.

Mello, K. B., Buske, D., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2005. “Simulação de dispersão de poluentes na atmosfera em condições de vento fraco pelo método GILTT.”, **XXVIII CNMAC**.

Monin, A. S. and Obukhov, A. M., 1954. “Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground”, **Tr. Akad. Nauk, SSSR, Geofiz. Inst.**, vol. 24, pp. 1963–1987.

Monin, A. S. and Yaglom, A. M., 1971. “**Statistical fluid mechanics**”. Mit Press, Cambridge.

Moreira, D., 1996. “**Comparação entre um modelo gaussiano atualizado e a equação de difusão no cálculo da concentração superficial de poluentes na camada limite convectiva: o caso de fontes pontuais contínuas elevadas**”, Dissertação de mestrado, Mestrado em Física, UFSM.

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

Moreira, D., Degrazia, G., and Vilhena, M., 1999. “Dispersion from low sources in a convective boundary layer: An analytical model”, **Nuovo Cimento**, vol. 22C, pp. 685–691.

Moreira, D., Tirabassi, T., and Carvalho, J., 2005a. “Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers”, **Atmospheric Environment**, vol. 20, pp. 3643–3650.

Moreira, D. M., Costa, C. P., Vilhena, M. T., Carvalho, J., Degrazia, G. A., and Goulart, A. G., 2004. “Simulation of the dispersion of pollutants considering nonlocal effects in the solution of the advection-diffusion equation.”, **27th NATO/CCMS - International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application**, pages 325–326.

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

Moreira, D. M., Tirabassi, T., Vilhena, M. T., and Carvalho, J. C., 2005c. “Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers”, **Atmospheric Environment**, vol. 39, pp. 3643–3650.

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

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Carvalho, J., and Degrazia, G. A., 2005d. “Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion”, **Environmental modelling and software**, vol. 20, pp. 1347–1351.

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

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., and Carvalho, J. C., 2005f. “A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in PBL from Angra I nuclear power plant”, **Ecological Modelling**, vol. 189, pp. 413–424.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Costa, C. P., and Bodmann, B., 2006b. “Simulation of Pollutant Dispersion in the Atmosphere by the Laplace Transform: The ADMM Approach”, **Water, Air, & Soil Pollution**, vol. 177, pp. 411–439.

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

Moura, A., Vilhena, M., and Degrazia, G., 1995. “Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável”, **Proceedings of COBEM**.

Netterville, D. D. J., 1990. “Plume rise, entrainment and dispersion in turbulent winds”, **Atmospheric Environment**, vol. 24, pp. 1061–1081.

Nickola, P. W., 1977. “**The Hanford 67 series: a volume of atmospheric field diffusion measurements**”. Pnl-2433 Battelle, Pacific Northwest Laboratories, Richland, WA (USA).

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

Nieuwstadt, F. T. M., 1984. “The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer”, **J. Atmos. Society**, vol. 41, pp. 2202–2216.

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

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

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

Panofsky, H. A. and Dutton, J. A., 1984. **“Atmospheric Turbulence”**. Wiley-Interscience, J. Wiley and Sons, 397 edition.

Panofsky, H. A. and Dutton, J. A., 1988. **“Atmospheric Turbulence”**. John Wiley & Sons, New York.

Pasquill, F., 1961. “The estimation of the dispersion of windborne material”, **Meteor. Mag.**, vol. 90, pp. 33–37.

Pasquill, F., 1974. **“Atmospheric Diffusion”**. John Wiley & Sons, New York, 2 edition.

Paulsen, C. A., 1975. “The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer”, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 9, pp. 857–861.

Pereira, L. L., 2007. **“Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, resolvendo um problema advectivo - difusivo dependente do tempo com fonte arbitrária”**, Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

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

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

Roberts, O. F. T., 1923. “The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere”, **Proc. Roy. Soc.**, vol. 104, pp. 640–648.

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

Roode, S. D., Jonker, H., Duynkerke, P., and Stevens, B., 2004. “Countergradient fluxes of conserved variables in the clear convective and stratocumulus-topped boundary

layer: the role of the entrainment flux”, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 112, pp. 179–196.

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

Scriven, R. A. and Fisher, B. A., 1975. “The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II - The effect of turbulent diffusion”, **Atmospheric Environment**, vol. 9, pp. 59–65.

Smith, F., 1957. “The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere”, **J. Fluid Mechanics**, vol. 2, pp. 49–76.

Sorbjan, Z., 1989. “**Structure of the atmospheric boundary layer**”. Prentice Hall, New Jersey, pp. 317.

Stern, A. C., 1976. “**Air pollution**”, volume I. Academic Press, New York, (USA), 3rd edition edition.

Stroud, A. H. and Secrest, D., 1966. “**Gaussian Quadrature Formulas**”. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J.

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

Taylor, G. I., 1921. “Diffusion by continuous movements”, **Proceedings London Mathematical Society**, vol. 20(Series 2), pp. 196–211.

Tirabassi, T., 2005. “Dispersão euleriana na camada limite planetária”, **Do livro: Tópicos em Turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**, pages 59–77.

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

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

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

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

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

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

Van Ulden, A. P., 1992. "A surface layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground", **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 681–692.

Weil, J., Sullivan, P., and Moeng, C.-H., 2004. "The use of large-eddy simulation in Lagrangian particle dispersion models", **Journal Atmospheric Science**, vol. 61, pp. 2877–2887.

Weil, J. C., 1979. "Assessment of plume rise and dispersion models using lidar data, PPSP-MP-24", **Prepared by Environmental Center, Martin Marietta Corporation, for Maryland Department of Natural Resources.**

Weil, J. C., 1988. "Plume Rise", **Lectures on Air Pollution Modeling. A. Venkatram and J.C. Wyngaard, Eds. Amer. Meteor. Soc**, pages 119–166.

Weil, J. C. and Brower, R. P. "An update Gaussian plume model for tall stacks", **JAPCA**, vol. 34(1984), pp. 818–827.

Willis, G. E. and Deardorff, J. W., 1974. "A laboratory model of the unstable planetary boundary layer", **J. Atmos. Society**, vol. 31, pp. 1297–1307.

Willis, G. E. and Deardorff, J. W., 1976. "A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer", **Quart. J. R. Met. Society**, vol. 102, pp. 427–445.

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

Willis, G. E. and Deardorff, J. W., 1981. “A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 15, pp. 109–117.

Wortmann, S., 2003. “**Formulação Semi-analítica para a Equação Transformada Resultante da Aplicação da GITT em Problemas Difusivos-Advectivos**”, Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Wortmann, S., Moura, A., and Vilhena, M. T., 2000. “Solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável”, **Anais ENCIT**.

Wortmann, S., Vilhena, M. T., Moreira, D., and Buske, D., 2005. “A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL”, **Atmospheric Environment**, vol. 39, pp. 2187–2194.

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

Wyngaard, J. and Weil, J., 1991. “Transport asymmetry in skewed turbulence”, **Phys. Fluids**, vol. A3, pp. 155–162.

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

Zilitinkevich, S., Gryanik, V., Lykossov, V., and Mironov, D., 1999. “Third-order transport and nonlocal turbulence closures for convective boundary layers”, **Journal Atmospheric Science**, vol. 56, pp. 3463–3477.

I. Camada Limite Planetária

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

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

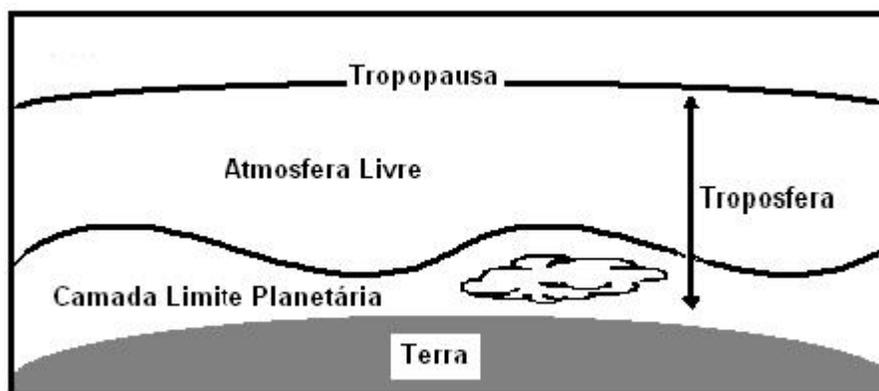


Figura I.1 – Estrutura da Troposfera ([Stull, 1988])

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

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

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

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

Sobre a superfície do solo em regiões de alta pressão a camada limite tem uma estrutura bem definida que envolve um ciclo diurno de acordo com os processos físicos que nela ocorrem. (Figura I.2 - [Stull, 1988]):

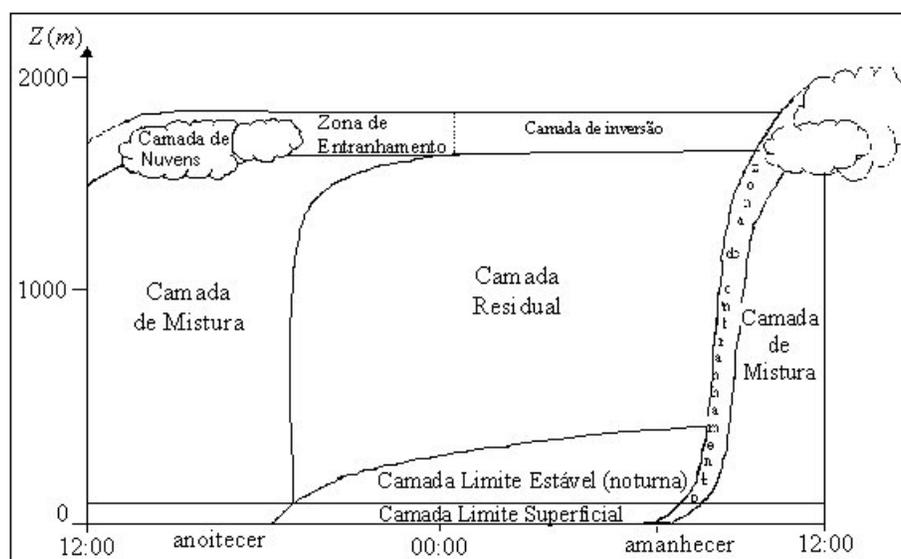


Figura I.2 – Ciclo diurno evolutivo da CLP.

As principais componentes desta estrutura são:

1. Camada Limite Superficial (CLS):

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

2. Camada Limite Convectiva (CLC);

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

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

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

4. Camada Limite Residual (CLR):

- quando cessa a formação de termas a turbulência também decai, a camada de ar resultante é denominada camada residual porque o estado inicial das variáveis médias, as variáveis de concentração são as mesmas do decaimento recente da camada convectiva. Esta camada não tem contato com o solo pois se encontra acima da CLE.

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

I.1 Estrutura da Camada Limite Convectiva

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

O aquecimento da superfície da terra origina forte mistura vertical, pois há formação de termas (massas de ar quente) que se elevam a partir do solo, o que caracteriza esta camada. Define-se, então a CLC como a região da atmosfera que se estende do solo ($z = 0$) até a base de uma inversão elevada ($z = z_i$) (a altura onde a temperatura potencial aumenta como pode ser visto na figura (I.5)).

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

Freqüentemente, a turbulência na CLC apresenta-se em equilíbrio local com os forçantes externos. Isto significa que o tempo de relaxação da turbulência associado aos grandes turbilhões é muito menor que a escala de tempo associada a mudanças externas, de modo que a estrutura da CLC não depende explicitamente do tempo [Driedonks e Tennekes, 1984]).

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

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

Na CLC a forte mistura vertical produzida pelo fluxo de calor turbulento provocado

pelo aquecimento solar da superfície terrestre dá origem a uma estrutura de plumas térmicas, ar quente que se eleva até a base da inversão térmica, circundadas por ar mais frio que desce do topo das nuvens em direção ao solo.

Estas estruturas ocorrem simultaneamente, são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional, com escalas de tempo da ordem de 15 minutos, para condições suficientemente instáveis. Os poluentes emitidos sob estas condições apresentam uma dispersão em forma de *looping*, como pode ser visto na figura (I.3):

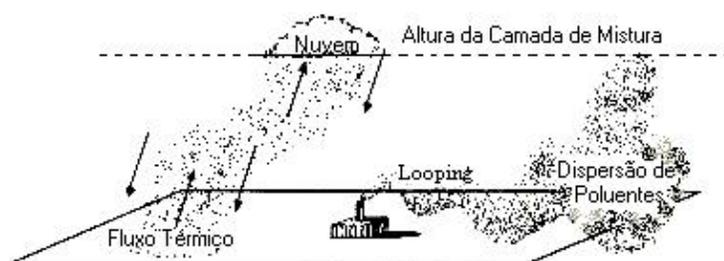


Figura I.3 – Representação do fluxo vertical da dispersão de um contaminante no interior de uma camada de mistura.

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

Esta assimetria na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés na CLC. A figura (I.4) mostra as correntes ascendentes e descendentes.

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

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

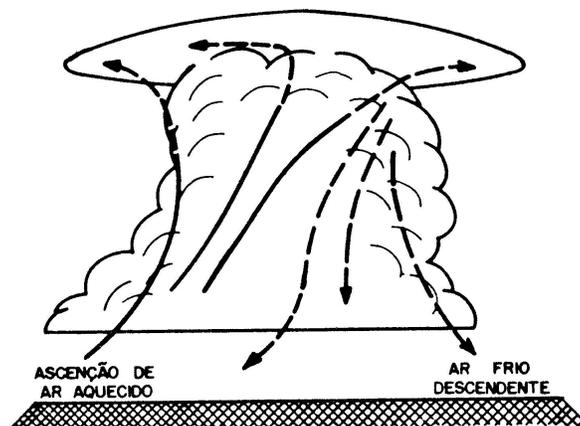


Figura I.4 – Deslocamento vertical de massas de ar causado pela convecção térmica.

espessas, a CLC pode exibir um crescimento menor que em outros e tornar-se não turbulenta.

Sobre terra firme a CLC pode ser considerada como uma estrutura de três camadas, diferenciadas em função de parâmetros predominantes, considerados relevantes para a descrição da turbulência. Na figura (I.5) baixo, encontra-se a estrutura da CLC e o comportamento da temperatura potencial e da velocidade média do vento em cada camada.

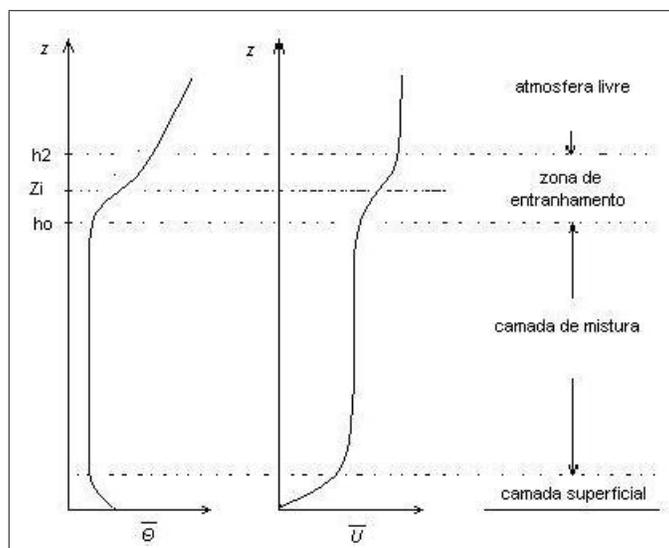


Figura I.5 – Comportamento da temperatura potencial e da velocidade do vento na CLC.

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

$$L = -\frac{u_*^3}{k \frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0} \quad (\text{I.1})$$

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

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

$$w_* = \left[\frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0 z_i \right]^{1/3} \quad (\text{I.2})$$

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

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

O topo da camada convectiva de mistura, z_i , é definido como a altura onde ocorre

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

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

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

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

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

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