
Editores
Antônio Rodriguez-Ferran
Javier Oliver
Paulo R. M. Lyra
José L. D. Alves
Métodos Numéricos e Computacionais em Engenharia
CMNE CILAMCE
2007
APMTAC
SEMNI
b
PORTO

CMNE/CILAMCE 2007
Porto, 13 a 15 de Junho, 2007
©APMTAC, Portugal 2007

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO EURELIANA DE DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Deise M. C. Milbradt[1], Cynthia F. Segatto[1,2] e Marco Túllio Vilhena[1,2]

Universidade Federal do Rio Grande do Sul - **UFRGS**
1: Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - **PROMEC**
Rua Sarmento Leite, 425/314. CEP: 90050-170. Porto Alegre, RS, Brasil.
2: Programa de Pós Graduação de Matemática Aplicada - **PPGMAp**
Av. Bento Gonçalves, 9500. CEP: 91509-900. Porto Alegre, RS, Brasil.
e-mail: csegatto@pq.cnpq.br, vilhena@pq.cnpq.br, deisemil@yahoo.com.br

Palavras chave: Equação de Difusão Advecção, Dispersão de poluentes, GILTT, Transformada de Laplace

Resumo. *Em recente trabalho propuzemos uma solução analítica para a equação de difusão advecção 3-D, dependente do tempo, usando transformadas integrais. Esta solução foi desenvolvida para a simulação de dispersão de poluentes na atmosfera, considerando osseus coeficientes dependentes da altura z. Neste trabalho, para tirar vantagem da estrutura das matrizes que aparecem na solução discutida e simplificarmos a implementação computacional, apresentamos a solução da equação para a concentração de poluentes com coeficientes de dispersão e velocidades constantes e reconstruímos a solução para o problema com coeficientes de dispersão vertical variável, discretizando a altura da camada limite em sub-domínios. Em cada subdomínio determinamos o valor médio dos coeficientes de dispersão e a solução é obtida. Para a construção da solução global aplicamos as condições de continuidade de concentração de poluentes e de fluxo nas interfaces. Por este procedimento esperamos simplificar o trabalho da implementação computacional na simulação de dispersão de poluentes na camada atmosférica.*

1 INTRODUÇÃO

A equação de difusão advecção tem sido amplamente aplicada na simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, bem como na solução de problemas de transferência de calor e massa. Sob o ponto de vista de métodos numéricos, existe uma vasta literatura sobre o assunto, porém sob o ponto de vista de métodos analíticos ou semi-analíticos a literatura é bem mais reduzida, para ilustrar este fato citamos os trabalhos de Degrazia et al. [1], Buske et al. [2, 3], Carvalho et al. [4], Vilhena et al. [5], Costa et al. [6], Wortmann et al. [7] e Moreira et al. [8, 9]. Recentemente Segatto et al. [10] apresentou uma solução analítica para o problema de dispersão de poluentes na atmosfera resolvendo a equação de difusão e advecção tridimensional dependente do tempo para diferentes condições de estabilidades considerando os coeficientes de dispersão e perfil de vento, variáveis com a altura. A idéia básica do método é aplicar o método GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique), isto é aplicar a transformada de Laplace na variável tempo e expandir a função concentração de poluentes em série nas variáveis x e y. Os coeficientes desta expansão são encontrados resolvendo de forma analítica uma equação diferencial matricial de primeira ordem e coeficientes variáveis. De posse destes coeficientes, a função concentração de poluentes transformada é construída e finalmente a função de poluentes em cada instante t é obtida procedendo a transformada inversa de Laplace numérica.

Neste trabalho apresentamos uma variação da formulação proposta anteriormente, no sentido de facilitar a implementação e reduzir o esforço computacional. Assim, para tirar vantagem da estrutura das matrizes que aparecem na solução discutida em [10], apresentamos a solução da equação de concentração de poluentes considerando os coeficientes de dispersão constantes, evitando deste modo a repetição do cálculo de autovalores para determinação da concentração em diferentes alturas. Uma vez conhecida a solução para este problema, construímos a solução para o problema com coeficientes de dispersão vertical variável, discretizando a altura da camada limite em subdomínios e em cada subdomínio consideramos o valor médio dos coeficientes de dispersão, e do perfil de vento constantes. A seguir, aplicamos em cada subdomínio a solução obtida para a equação de difusão advecção com coeficientes de dispersão e do perfil de vento constantes. Finalmente, obtemos a solução global aplicando condição de continuidade da função concentração e o fluxo de poluentes. Por este procedimento esperamos simplificar o trabalho da implementação computacional na simulação de dispersão de poluentes. Devemos lembrar que o caráter semi-analítico da solução decorre da discretização da altura da camada limite planetária.

2 Solução da Equação de Dispersão de Poluentes na atmosfera 3D

Vamos considerar o problema de difusão advecção, definido pela equação

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}+v\frac{\partial C}{\partial y}+w\frac{\partial C}{\partial z}=\\ \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa_x\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa_y\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa_z\frac{\partial C}{\partial z}\right)+S(x,y,z,t),\end{aligned} \tag{1}$$

e com condição inicial e condições de contorno dadas por

$$\begin{cases} C(x,y,z,0)=0,\\ \frac{\partial C}{\partial x}(0,y,z,t)=\frac{\partial C}{\partial x}(x_0,y,z,t)=0,\\ \frac{\partial C}{\partial y}(x,0,z,t)=\frac{\partial C}{\partial y}(x,y_0,z,t)=0,\\ \frac{\partial C}{\partial z}(x,y,0,t)=\frac{\partial C}{\partial z}(x,y,z_0,t)=0. \end{cases} \tag{2}$$

Aqui, $C(x,y,z,t)$ é a função concentração de poluentes, κ_x, κ_y e κ_z são os coeficientes de difusão e u, w e v são as projeções da velocidade nas direções x, y e z respectivamente. Vamos considerar estes coeficientes são função da variável z e desta forma, reescrevemos a equação (1) como

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}+v\frac{\partial C}{\partial y}+w\frac{\partial C}{\partial z}=\\ \kappa_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+\kappa_y\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+\kappa_z\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}++\kappa_z'\frac{\partial C}{\partial z}+S(x,y,z,t).\end{aligned} \tag{3}$$

Nosso próximo passo é subdividir o domínio da variável z em K intervalos, isto é vamos considerar os intervalos $[0,z_1]$, $[z_1,z_2]$, ... $[z_{K-1},z_i]$ onde z_i é a espessura da camada limite planetária, de tal forma que em cada subintervalo os valores dos coeficientes κ_x, κ_y,κ_z, u, v e w da equação (3) possam ser considerados constantes. Desta forma o problema (3) é transformado em um conjunto de equações diferenciais

$$\begin{aligned}\frac{\partial C^k}{\partial t}+u^k\frac{\partial C^k}{\partial x}+v^k\frac{\partial C^k}{\partial y}+w^k\frac{\partial C^k}{\partial z}=\kappa_x^k\frac{\partial^2 C^k}{\partial x^2}+\kappa_y^k\frac{\partial^2 C^k}{\partial y^2}+\kappa_z^k\frac{\partial^2 C^k}{\partial z^2}+\\ \kappa_z'^k\frac{\partial C}{\partial z}+S^k(x,y,z,t),\end{aligned} \tag{4}$$

$k = 1, 2, ..., K$, com condição inicial, condições de contorno e de interface dadas por

$$\begin{cases} C^k(x,y,z,0) = 0 & k = 1,2,...K, \\ \frac{\partial C^k}{\partial x}(0,y,z,t) = \frac{\partial C^k}{\partial x}(x_0,y,z,t) = 0 & k = 1,2,...K, \\ \frac{\partial C^k}{\partial y}(x,0,z,t) = \frac{\partial C^k}{\partial y}(x,y_0,z,t) = 0 & k = 1,2,...K, \\ \frac{\partial C^1}{\partial z}(x,y,0,t) = \frac{\partial C^K}{\partial z}(x,y,z_i,t) = 0, & k = 1,2,...K-1, \\ \kappa_z^k \frac{\partial C^k}{\partial z}(x,y,z_{k+1},t) = \kappa^{k+1}\frac{\partial C^{k+1}}{\partial z}(x,y,z_{k+1},t), & k = 1,2,...K-1, \\ C^k(x,y,z_{k+1},t) = C^{k+1}(x,y,z_{k+1},t), & k = 1,2,...K-1. \end{cases} \tag{5}$$

Para resolvermos este problema, em cada subintervalo, usamos GILTT, ou seja, supomos que a função concentração de poluentes $C^k(x,y,z,t)$ e a fonte do problema $S^k(x,y,z,t)$, em cada camada k, possam ser expandidas em autofunções

$$C^k(x,y,z,t) = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N} \mathcal{C}_{m,n}^k(z,t) X_m^k(x) Y_n^k(y), \quad k = 1,2,...,K \tag{6}$$

$$S^k(x,y,z,t) = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N} \mathcal{S}_{m,n}^k(z,t) X_m(x) Y_n(y), \quad k = 1,2,...,K, \tag{7}$$

onde X_m e Y_n são funções ortogonais geradas através dos problemas de Sturm-Liouville associados à equação (4)

$$\begin{cases} \frac{d^2X}{dx^2} + \lambda_n^2 X = 0 \\ X'(0) = X'(x_0) = 0 \end{cases} ; \quad \begin{array}{l} X(\lambda_m, x) = \cos\lambda_m x, \ \ \lambda_m = \frac{m\pi}{x_0}, \ \ N_{\lambda_m} = \frac{x_0}{2-\delta_{0,m}}, \\ \int_0^{x_0} \cos\lambda_m x \cos\lambda_n x dx = N_{\lambda_m}\delta_{m,n} \end{array} \tag{8}$$

e

$$\begin{cases} \frac{d^2Y}{dy^2} + \beta_n^2 Y = 0 \\ Y'(0) = Y'(y_0) = 0 \end{cases} ; \quad \begin{array}{l} X(\beta_n, y) = \cos\beta_n y, \ \ \beta_n = \frac{n\pi}{y_0}, \ \ N_{\beta_n} = \frac{y_0}{2-\delta_{0,n}}, \\ \int_0^{y_0} \cos\beta_n y \cos\beta_m y dy = N_{\beta_n}\delta_{m,n}. \end{array} \tag{9}$$

Os coeficientes da expansão do termo de fonte são conhecidos e calculados como,

$$\mathcal{S}_{m,n}^k(z,t) = \frac{1}{N_{\lambda_m} N_{\beta_n}} \int_0^{y_0} \left(\int_0^{x_0} S^k(x,y,z,t)\cos(\lambda_m x) dx \right) \cos(\beta_n y) dy. \tag{10}$$

Para determinarmos os coeficientes $\mathcal{C}^k_{m,n}(z,t)$ das expansões (6), primeiramente substituimos a expressão (6) na equação (4)

$$\sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\Bigg(\frac{\partial \mathcal{C}_{m,n}}{\partial t}X_mY_n + u\mathcal{C}_{m,n}X'_mY_n + v\mathcal{C}_{m,n}X_mY'_n + w\frac{\partial \mathcal{C}_{m,n}}{\partial z}X_mY_n - \kappa_x\mathcal{C}_{m,n}X''_mY_n - \kappa_y\mathcal{C}_{m,n}X_mY''_n - \kappa_z\frac{\partial^2\mathcal{C}_{m,n}}{\partial z^2}X_mY_n\Bigg) - \kappa'_z\frac{\partial C_{m,n}}{\partial z}X_mY_n = \sum_{m=0}^{M}\sum_{n=0}^{N}\mathcal{S}_{m,n}X_m(x)Y_n(y), \tag{11}$$

e aplicamos a ortogonalidade das autofunções. Para este fim, primeiramente lembramos que, $X'_m(x) = -\lambda_m \sin\lambda_m x$, $X''_m(x) = -\lambda_m^2\cos\lambda_m x$ e $Y'_n(x) = -\beta_n\sin\beta_n y$, $Y''_n(x) = -\beta_n^2\cos\beta_n x$ e portanto

$$\int_0^{x_0} X''_n(x)X_m(x)dx = -\lambda_m^2 N_{\lambda_m}\delta_{m,n}, \quad \int_0^{y_0} Y''_n(y)Y_m(y)dy = -\beta_m^2 N_{\beta_m}\delta_{m,n} \tag{12}$$

e notamos J_n^m como sendo as integrais

$$J_n^m = \int_0^{x_0} X'_nX_m dx = \int_0^{y_0} Y'_nY_m dy = \begin{cases} \frac{2n^2}{m^2-n^2} & \text{se} \quad n+m \text{ é ímpar} \\ 0 & \text{se} \quad n+m \text{ é par.} \end{cases} \tag{13}$$

Agora, multiplicamos a equação (11) por $X_i(x)$ e integramos de 0 à x_0 para $i = 0, ..., M$. Logo após, multiplicamos a por $Y_j(y)$ e integramos de 0 até y_0, para $i = 0, ..., M$. Por facilidade de notação, ainda dividimos a equação resultante por $N_{\lambda_m}N_{\beta_n}$, e reordenamos seus termos, obtendo a seguinte equação diferencial para os coeficientes $\mathcal{C}^k_{m,n}(z,t)$ da expansão (6) em cada camada,

$$\frac{\partial \mathcal{C}^k_{m,n}}{\partial t} - \kappa_z\frac{\partial^2 \mathcal{C}^k{}_{m,n}}{\partial z^2} + (w-\kappa'_z)\frac{\partial \mathcal{C}^k_{m,n}}{\partial z} + (\kappa_x\lambda_m^2 + \kappa_y\beta_n^2)\mathcal{C}^k_{m,n}(z,t) + \frac{u}{N_{\lambda_m}}\sum_{i=0}^{M}\left(\mathcal{C}^k{}_{i,n}J_i^m\right) + \frac{v}{N_{\beta_n}}\sum_{j=0}^{N}\left(\mathcal{C}^k{}_{m,j}J_j^n\right) = \mathcal{S}^k_{m,n}(z,t). \tag{14}$$

Podemos ainda notar que expandindo a condição inicial do problema, multiplicando $\cos(\lambda_i x)\cos(\beta_j y)$ e integrando em x de 0 até x_0 e em y de 0 até y_0 temos que

$$0 = \int_0^{y_0}\int_0^{x_0} C^k(x,y,z,0)\cos\lambda_m x\cos\beta_n y\, dxdy = \mathcal{C}^k{}_{m,n}(z,0)N_{\lambda_m}N_{\beta_n}, \tag{15}$$

ou seja

$$\mathcal{C}^k_{m,n}(z,0) = 0, \qquad \forall m,n, \quad k = 1,2,...K. \tag{16}$$

Para mostrarmos a solução deste sistema, vamos reescreve-lo em forma matricial,

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{C}^k(z,t) - \mathbf{D}_{\kappa_z}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\mathbf{C}^k(z,t) + \mathbf{D}^k_{(w-\kappa' z)}\frac{\partial}{\partial z}\mathbf{C}^k(z,t) + \mathbf{A}^k\mathbf{C}^k(z,t) = \mathbf{S}^k(z,t), \tag{17}$$

onde $\mathbf{C}^k(z,t)$ é o vetor dos coeficientes da expansão da k-ésima camada, com $C^k_{m,n} = C^k_{mN+m+n+1}$ para $m = 0:M$ e $n = 0:N$, e é definido como:

$$\mathbf{C}(z,t) = \begin{pmatrix} C_1 & C_2 & \dots & \dots & C_{(M+1)(N+1)} \end{pmatrix}^T. \tag{18}$$

As matrizes $\mathbf{D}_i$ são matrizes diagonais de ordem $(M+1)(N+1)$ definidas por $\mathbf{D}_i = i\mathbf{I}$, com $\mathbf{I}$ a matriz identidade, $\mathbf{S}$ é o vetor formado pelos coeficientes da expansão do termo de fonte em funções ortogonais nas variáveis x, y, e $\mathbf{A}$ é uma matriz de ordem $(M+1)(N+1)$ definida por:

$$\begin{pmatrix} F_0+H & G_0^1 & \dots & G_0^{M-1} & G_0^M \\ G_1^0 & F_1+H & \dots & G_1^{M-1} & G_1^M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ G^0_{M-1} & G^0_{M-1} & \dots & \ddots & G^M_{M-1} \\ G^0_M & G^0_M & \dots & \dots & F_M+H \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Aqui, $F_\ell = \mathrm{diag}(f^0_\ell, ..., f^N_\ell)$, $G^p_\ell = \mathrm{diag}(g^p_\ell, ..., g^p_\ell)$ são matrizes diagonais de ordem N e H é uma matriz de ordem N com diagonal principal nula e os outros elementos são dados por $h_{ij} = h^{j-1}_{i-1}$ se $i \neq j$, onde

$$\begin{aligned} g^i_m &= \frac{u}{N_{\lambda_m}} J^m_i, \quad i = 0,1,...m-1,m+1,...,M, \\ h^i_n &= \frac{v}{N_{\beta_n}} J^n_j, \quad i = 0,1,...n-1,n+1,...,M, \\ f^n_m &= \kappa_x\lambda^2_m + \kappa_y\beta^2_n + \frac{u}{N_{\lambda_m}} J^m_m + \frac{v}{N_{\beta_n}} J^n_n. \end{aligned} \tag{20}$$

A seguir, aplicamos a Transformada de Laplace na variável tempo da equação diferencial matricial definida pela equação (17) obtendo o sistema de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem

$$\frac{d^2}{dz^2}\bar{\mathbf{C}}^k(z,s) - \mathbf{D}^k_{\frac{(w-\kappa' z)}{\kappa_z}}\frac{d}{dz}\bar{\mathbf{C}}^{\mathbf{k}}(z,s) - \mathbf{D}^k_{\frac{1}{\kappa_z}}(s\mathbf{I} + \mathbf{A}^k)\bar{\mathbf{C}}^k(z,s) = -\mathbf{D}^k_{\frac{1}{\kappa_z}}\bar{\mathbf{S}}^k(z,s). \tag{21}$$

Como as matrizes coeficientes dos termos $d/dz\bar{\mathbf{C}}^k(z,s)$ e de $\bar{\mathbf{C}}^k(z,s)$ não comutam, para resolvermos este sistema vamos proceder uma mudança de variáveis do tipo $\frac{d}{dz}\mathbf{C} = \mathbf{V}$, com a finalidade de baixar sua ordem. Deste procedimento resulta o seguinte sistema de equações diferencias de primeira ordem:

$$\frac{d}{dz}\bar{\mathcal{R}}^k(z,s) = \mathcal{A}^k(s)\mathbf{R}^k(z,s) + \mathcal{S}^k(z,s). \tag{22}$$

Aqui definimos os vetores de ordem $2\mathfrak{M} = 2(N+1)(M+1)$,

$$\bar{\mathcal{R}}^k(z,s) = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{C}}^k(z,s) \\ \bar{\mathbf{V}}^k(z,s) \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{S}^k(z,s) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\dfrac{\bar{\mathbf{S}}(z,s)}{\kappa_z} \end{pmatrix} \tag{23}$$

e a matriz $\mathcal{A}(s)$, constante em relação à variável z

$$\mathcal{A}(s) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \dfrac{(s\mathbf{I}+\mathbf{A})}{\kappa_z} & \dfrac{(w-\kappa_z')}{\kappa_z}\mathbf{I} \end{pmatrix}. \tag{24}$$

A equação (22) é uma equação linear com coeficientes constantes e possui solução analítica

$$\bar{\mathcal{R}}^k(z,s) = \exp(\mathcal{A}^k(s)z)\bar{\mathbf{R}}^k(0,s) + \exp(\mathcal{A}^k(s)z) * \mathcal{S}^k(z,s), \tag{25}$$

onde $*$ é a convolução definida em cada camada k como,

$$\exp(\mathcal{A}^k(s)z) * \mathcal{S}^k(z,s) = \int_0^{z_k - z_{k-1}} \exp(\mathcal{A}^k(s)(z-\xi)) * \mathcal{S}^k(\xi,s)d\xi. \tag{26}$$

3 Cálculo da matriz exponencial de forma analítica

Nesta seção para não sobrecarregarmos a notação vamos excluir o superíndice k que expressa a camada. Com a finaliddade de calcularmos, de forma analítica, o termo exponencial que aparece em (25), primeiramente decompomos a matriz $\mathbf{A} = \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^{-1}$ onde $\mathbf{D}$ é a matriz diagonal dos autovalores de $\mathbf{A}$ e $\mathbf{X}$ é a matriz coluna dos respectivos autovalores. Com esta decomposição podemos escrever a matriz $\mathcal{A}(s) = \mathcal{X}\mathcal{P}(s)\mathcal{X}^{-1}$,

$$\mathcal{P}(s) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} \\ \mathrm{P}(s) & c\mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{X} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{X} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{X}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{X}^{-1} \end{pmatrix},$$

onde $\mathrm{P}(s) = \frac{1}{\kappa_z}(s\mathbf{I} + \mathbf{D})$ é uma matriz diagonal de ordem $\mathfrak{M}$ dependente do parâmetro s e c é uma constante, em cada camada considerada, definida por $c = \frac{w-\kappa_z'(\eta)}{\kappa_z(\eta)}$. Para uma matriz da forma de $\mathcal{P}(s)$, os autovalores e autovetores podem ser encontrados de forma analítica. No nosso caso,

$$\begin{cases} v_i(s) = & \dfrac{c - \sqrt{c^2 + 4p_{ii}(s)}}{2} \quad i = 1,2,...\mathfrak{M} \\ v_{\mathfrak{M}+i}(s) = & \dfrac{c + \sqrt{c^2 + 4p_{ii}(s)}}{2} \quad i = 1,2,...\mathfrak{M}, \end{cases} \tag{27}$$

são os $2\mathfrak{M}$ autovalores, com autovetores associados dados por:

$$z^{(i)}(s) = \begin{cases} z_i^{(i)} = f_i(s) = -\dfrac{c + \sqrt{c^2 + 4p_{ii}(s)}}{2p_{ii}} & i = 1,2,...\mathfrak{M} \\ z_{i+\mathfrak{M}}^{(i)}(z,s) = 1 & i = 1,2,...\mathfrak{M} \\ 0 & \text{outros casos,} \end{cases} \tag{28}$$

$$z^{(\mathfrak{M}+i)}(s)\begin{cases} z_i^{(\mathfrak{M}+i)}(s) = f_{\mathfrak{M}+i}(s) = \dfrac{c-\sqrt{c^2+4p_i(s)}}{2p_i(s)} & i=1,2,...\mathfrak{M} \\ z_{i+\mathfrak{M}}^{(\mathfrak{M}+i)}(z,s) = 1 & i=1,2,...\mathfrak{M} \\ \\ 0 & \text{outros casos.} \end{cases} \tag{29}$$

Se chamamos $\mathcal{Z}(s)$ a matriz cujas colunas são os autovetores de $\mathcal{A}(s)$, notamos que ela pode ser escrita na seguinte forma

$$\mathcal{Z}(s) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}^1 & \mathcal{H}^2 \\ \mathcal{I} & \mathcal{I} \end{pmatrix}, \qquad \begin{cases} h_{ii}^1 = f_i(s) & i=1,2,...\mathfrak{M}, \\ h_{ii}^2 = f_{\mathfrak{M}+i}(s) & i=1,2,...\mathfrak{M}, \\ h_{ij}^1 = h_{ij}^2 = 0 & \text{se } i \neq j. \end{cases} \tag{30}$$

com $\mathcal{H}^1$ e $\mathcal{H}^2$ matrizes diagonais e $\mathcal{I}$ a matriz identidade de ordem $\mathfrak{M}$. A inversa de $\mathcal{Z}(s)$ também pode ser calculada analiticamente como

$$\mathcal{Z}^{-1}(s) = \begin{pmatrix} \mathcal{G}^1 & \mathcal{G}^2 \\ \mathcal{G}^3 & \mathcal{G}^4 \end{pmatrix}, \tag{31}$$

com $\mathcal{G}^\ell$, $\ell = 1,2,3,4$ matrizes diagonais de ordem $\mathfrak{M}$ e elementos definidos por

$$\begin{cases} g_{ii}^1 = 1/(f_i - f_{\mathfrak{M}+i}) & i=1,2,...\mathfrak{M}, \\ g_{ii}^2 = f_{\mathfrak{M}+i}/(f_{\mathfrak{M}+i-f_i}) & i=1,2,...\mathfrak{M}, \\ g_{ii}^3 = 1/(f_{\mathfrak{M}+i-f_i}) & i=1,2,...\mathfrak{M}, \\ g_{ii}^4 = f_i/(f_i - f_{\mathfrak{M}+i}) & i=1,2,...\mathfrak{M}, \\ g_{ij}^1 = g_{ij}^2 = g_{ij}^3 = g_{ij}^4 = 0 & \text{se } i \neq j. \end{cases} \tag{32}$$

Com estas decomposições podemos calcular facilmente o termo exponencial que aparece na solução definida pela equação (25) como

$$\begin{aligned} \exp[\mathcal{A}(s)z] &= \exp\left[\mathcal{X}\mathcal{P}(s)\mathcal{X}^{-1}z\right] \\ &= \mathcal{X}\exp\left[\mathcal{P}(s)z\right]\mathcal{X}^{-1} \\ &= \mathcal{X}\exp\left[\mathcal{Z}(s)\mathcal{V}(s)\mathcal{Z}^{-1}(s)z\right] \\ &= \mathcal{X}\mathcal{Z}(s)\exp\left[\mathcal{V}(s)z\right]\mathcal{Z}^{-1}(s)\mathcal{X}^{-1} \end{aligned} \tag{33}$$

onde $\mathcal{V}(s)$ é a matriz diagonal dos autovalores de $\mathcal{P}(s)$. Ainda podemos mostrar que a matriz $\mathcal{Y}(z,s) = \mathcal{Z}(s)\exp\left[\mathcal{V}(s)z\right]\mathcal{Z}^{-1}(s)$ tem a forma

$$\mathcal{Y}(z,s) = \begin{pmatrix} \mathcal{K}^1(s) & \mathcal{K}^2(s) \\ \mathcal{K}^3(s) & \mathcal{K}^4(s) \end{pmatrix}, \tag{34}$$

onde $\mathcal{K}^{\ell}(s)$, $\ell = 1,2,3,4$ são matrizes diagonais de ordem $\mathfrak{M}$ e cujos elementos de dados por,

$$\begin{cases} h_{ii}^{1}(z,s) = \frac{\exp(v_i(s)z)f_i(s) - \exp(v_{\mathfrak{M}+i}(s)z)f_{\mathfrak{M}+i}(s)}{f_i(s) - f_{\mathfrak{M}+i}} & i = 1,2,...,\mathfrak{M}, \\ h_{ii}^{2}(z,s) = -\frac{(\exp(v_i(s)z) - \exp(v_{\mathfrak{M}+i}(s)z))f_i(s)f_{\mathfrak{M}+i}(s)}{f_i(s) - f_{\mathfrak{M}+i}} & i = 1,2,...,\mathfrak{M}, \\ h_{ii}^{3}(z,s) = \frac{(\exp(v_i(s)z) - \exp(v_{\mathfrak{M}+i}(s)z))}{f_i(s) - f_{\mathfrak{M}+i}} & i = 1,2,...,\mathfrak{M}, \\ h_{ii}^{4}(z,s) = \frac{\exp(v_{\mathfrak{M}+i}(s)z)f_i(s) - \exp(v_i(s)z)f_{\mathfrak{M}+i}(s)}{f_i(s) - f_{\mathfrak{M}+i}} & i = 1,2,...,\mathfrak{M}, \\ h_{ij}^{1}(z,s) = h_{ij}^{2}(s) = h_{ij}^{3}(s) = h_{ij}^{4}(s) = 0 & \text{se } i \neq j. \end{cases} \tag{35}$$

Assim a solução (25) pode ser reescrita em cada camada k, $k = 1,2,...,K$ como

$$\bar{\mathbf{R}}^{k}(z,s) = \mathcal{X}^{k}\mathcal{Y}^{k}(z,s)(\mathcal{X}^{k})^{-1}\bar{\mathbf{R}}^{k}(0,s) + \mathcal{X}^{k}\mathcal{Y}^{k}(z,s)(\mathcal{X}^{k})^{-1} * \mathcal{S}^{k}(z,s), \tag{36}$$

onde o vetor $\bar{\mathbf{R}}^{k}(0,s)$ é determinado aplicando as condições de contorno e continuidade da concentração e de fluxo de poluentes nas interfaces, conforme descrito pela equação (5). Com este procedimento determinamos os elementos do vetor $C(z,s)$ descrito pela equação (18), e procedendo numericamente a transformada inversa de Laplace, a concentração de poluentes $C(x,y,z,t)$ fica determinada pela expansão descrita pela equação (6).

Embora, neste trabalho não apresentemos resultados numéricos, o modelo bidimensional já foi devidamente validado através de dados experimentais obtidos a partir da integração na variável y da solução tridimensional. Também, o procedimento da discretizaçao já foi aplicado no método ADMM tridimensional [5]. É relevante então ressaltar que esta técnica se mostrou bastante eficiente na comparação com o método GILTT, tanto no que diz respeito à precisão dos resultados numéricos quanto ao esforço computacional, nas soluções de problemas bidimensionais considerados com diversas alturas de fonte [11]. Este fato reforçado pelo teorema de Cauchy-Kovalesky, que garante a existência e unicidade de solução, justifica que a solução proposta é uma solução promissora para simulação de dispersão de contaminantes na atmosfera para situações físicas realísticas.

REFERÊNCIAS

[1] G.A. Degrazia, J.C. Carvalho, D.M. Moreira, M.T. Vilhena, S.G. Magalhães e D.R. Roberty. Derivation of a decorrelation timescale depending on source distance for inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *Physica. A*, Vol. **374**, pp. 55-65, (2007).

[2] D. Buske, M.T. Vilhena, D.M. Moreira e T. Tirabassi. An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. *Environmental Fluid Mechanics* (Dordrecht), Vol. **7**, pp. 43-54, (2007).

[3] D. Buske, M.T. Vilhena, D.M. Vilhena e T. Tirabassi. Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective Planetary Boundary Layer. *Atmospheric Environment*, Accepted.

[4] J.C. Carvalho, M.T. Vilhena e D.M. Moreira. Comparison between Eulerian and Lagrangian semi-analytical models to simulate the pollutants dispersion in the PBL. *Applied Mathematical Modelling*, Vol. **31**, pp. 120–129, (2007).

[5] M.T. Vilhena, C. P. Costa,D.M. Moreira e T. Tirabassi. A semi-analytical solution of the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. *Boundary - Layer Meteorology*, Aceito para publicação.

[6] C. P. Costa, M.T. Vilhena, D.M. Moreira e T. Tirabassi. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion eqaution in the planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, Vol. **40**, pp. 5659-5669, (2006).

[7] S. Wortmann, M.T. Vilhena,D.M. Moreira e D. Buske. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment*, Vol. **39**, pp. 2171-2178, (2005).

[8] D.M. Moreira, M.T. Vilhena, T. Tirabassi e J. C. Carvalho. A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the Angra I nuclear power plant. *Ecological Modelling*, Vol. **189**, pp. 413-424, (2005).

[9] D. M. Moreira, U. Rizza, M. T. Vilhena, A. G. Goulart. Semi-analytical model for pollution dispersion in the Planetary Boundary Layer. *Atmospheric Environment*, Vol. **39**, pp. 2689-2697, (2005).

[10] C.F. Segatto, M.T. Vilhena, D. Buske e D.M. Moreira. *An analytical solution for the time-dependent 3D advection-diffusion equation in cartesian geometry by integral transform technique.* Proceedings of ICNAAM, 2006, *International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, Crete (Grécia)*, (2006).

[11] D.M. Moreira, M.T. Vilhena, C.F. Segatto e T. Tirabassi. Review on the pollutant dispersion in the atmosphere by the GILTT method. *submetido para publicação*, (2007).