

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

MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA  
CONSIDERANDO O PERFIL DE VENTO E OS COEFICIENTES DE DIFUSÃO  
DEPENDENTES DO TEMPO

por

Everson Jonatha Gomes da Silva

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Agosto de 2016

MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA  
CONSIDERANDO O PERFIL DE VENTO E OS COEFICIENTES DE DIFUSÃO  
DEPENDENTES DO TEMPO

por

Everson Jonatha Gomes da Silva  
Mestre em Engenharia

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

Co-Orientador: Prof. Dr. Tiziano Tirabassi

Aprovada por:

Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho (LAC/INPE)

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho (FMet/UFPel)

Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 12 de Agosto de 2016

## AGRADECIMENTOS

Agradeço

A minha família, especialmente aos meus pais, Cezar e Ionize, por todo o carinho em minha criação;

Aos professores Marco Tullio M. B. de Vilhena e Tiziano Tirabassi pelos ensinamentos e orientações;

Aos professores Régis Sperotto, Daniela Buske e Bardo Bodmann pela colaboração extremamente importante na elaboração deste trabalho;

Aos meus amigos e colegas, os quais me motivaram muito para concluir esta etapa;

A CAPES pelo suporte financeiro e ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes;

E a todos que de uma forma ou outra contribuíram para a realização deste trabalho.

## RESUMO

Esta tese tem o objetivo de apresentar um modelo matemático, para simular a dispersão de poluentes na atmosfera, que considera a variação temporal do campo de vento e dos coeficientes de difusão turbulenta, além disso, representar uma fonte móvel através de fontes pontuais. Sendo assim, usa-se a ideia do método da decomposição de Adomian e a técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) no intuito de resolver a equação de advecção difusão, a qual descreve o fenômeno citado. Ainda, implementa-se o modelo proposto com o conjunto de dados do experimento de OLAD (*Over Land Alongwind Dispersion*) e, por fim, comparam-se os resultados obtidos e os dados de concentração coletados no experimento mencionado.

Palavras-chave: Dispersão de poluentes; Método da decomposição; GILTT; OLAD.

## ABSTRACT

This thesis aims to present a mathematical model to simulate the dispersion of pollutants in the atmosphere, which considers the temporal variation of the wind field and the eddy diffusivity. Moreover, it represents a moving source through point sources. To reach this goal, it uses the idea of the Adomian decomposition method together with the GILTT technique (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) in order to solve the advection-diffusion equation, which describes the phenomenon. It further implements the model proposed with the dataset of OLAD (*Dispersion Over Land Alongwind*) experiment and finally the results obtained and the concentration observed are compared.

Keywords: Dispersion of pollutants; Decomposition Method; GILTT; OLAD.

# ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>CAMADA LIMITE PLANETÁRIA (CLP)</b>	<b>10</b>
3.1	Definição	10
3.2	Estrutura	11
3.3	Condições de Estabilidade e Característica da Pluma	13
<b>4</b>	<b>MODELO MATEMÁTICO</b>	<b>15</b>
4.1	Equação Governante	15
4.2	Modelo	18
4.2.1	Conjunto de Equações Recursivas	20
4.2.2	Método GILTT	21
<b>5</b>	<b>IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO</b>	<b>33</b>
5.1	Experimento de OLAD	33
5.2	Adaptação do Modelo	34
5.3	Parametrização Turbulenta	40
5.4	Resultados	41
5.4.1	OLAD 5	42
5.4.2	OLAD 12	49
5.5	Avaliação Estatística dos Resultados	53
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>56</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>58</b>
	<b>APÊNDICE A.</b>	<b>67</b>
	<b>APÊNDICE B.</b>	<b>71</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Representação da Troposfera. Imagem adaptada [Stull, 1988]. . . . .	10
Figura 3.2	Representação do desenvolvimento da CLP. Imagem adaptada [Stull, 1988]. . . . .	11
Figura 3.3	Neutralidade, instabilidade e estabilidade da CLP. Imagem adaptada [Erbrink et al., 1997]. . . . .	13
Figura 3.4	Comportamento <i>Looping</i> . . . . .	14
Figura 3.5	Comportamento <i>Conning</i> . . . . .	14
Figura 3.6	Comportamento <i>Fanning</i> . . . . .	14
Figura 5.1	Imagem adaptada do campo de experimento de OLAD [Biltoft and Carter, 1999]. . . . .	34
Figura 5.2	Representação da disseminação do traçador. . . . .	35
Figura 5.3	Representação para estimativa da emissão. . . . .	38
Figura 5.4	Concentrações das 10 fontes OLAD5/LC115. . . . .	44
Figura 5.5	Concentrações dos amostradores da rodovia Foxtrot. . . . .	45
Figura 5.6	Concentrações OLAD 5 - Rodovia Foxtrot . . . . .	47
Figura 5.7	Concentrações OLAD 5 - Rodovia Juliet . . . . .	48
Figura 5.8	Concentrações OLAD 12 - Rodovia Foxtrot . . . . .	51
Figura 5.9	Concentrações OLAD 12 - Rodovia Juliet . . . . .	52
Figura 5.10	Gráfico de espalhamento das concentrações. Foxtrot/OLAD5. . . . .	54
Figura 5.11	Gráfico de espalhamento das concentrações. Juliet/OLAD5. . . . .	54
Figura 5.12	Gráfico de espalhamento das concentrações. Foxtrot/OLAD12. . . . .	55
Figura 5.13	Gráfico de espalhamento das concentrações. Juliet/OLAD12. . . . .	55

## LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1	Coordenadas dos amostradores da rodovia Foxtrot. . . . .	36
Tabela 5.2	Coordenadas dos amostradores da rodovia Juliet. . . . .	37
Tabela 5.3	Dados de emissão - OLAD 5. . . . .	42
Tabela 5.4	Parâmetros de escala turbulenta - OLAD 5. . . . .	42
Tabela 5.5	Resultados da série (4.21) truncada em $L_d$ termos para cada fonte - LC115. . . . .	43
Tabela 5.6	Resultados da série (4.21) truncada em $L_d$ termos - OLAD5/LC115. . . . .	43
Tabela 5.7	Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Foxtrot - OLAD 5. . . . .	46
Tabela 5.8	Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Juliet - OLAD 5. . . . .	48
Tabela 5.9	Parâmetros de escala turbulenta - OLAD 12. . . . .	49
Tabela 5.10	Resultados da série (4.21) truncada em $L_d$ termos - OLAD12/LC115. . . . .	49
Tabela 5.11	Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Foxtrot - OLAD 12. . . . .	50
Tabela 5.12	Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Juliet - OLAD 12. . . . .	52
Tabela 5.13	Índices Estatísticos. . . . .	53
Tabela A	OLAD5/ Rodovia Foxtrot . . . . .	67
Tabela A	OLAD5/ Rodovia Juliet . . . . .	68
Tabela A	OLAD12/ Rodovia Foxtrot . . . . .	69
Tabela A	OLAD12/ Rodovia Juliet . . . . .	70



## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

3D-GILTT	Three Dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique
ADMM	Advection Diffusion Multilayer Method
CALPUFF	California Puff Model
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
CO	Concentração Observada
CP	Concentração Predita
CR	Camada Residual
CS	Camada Limite Superficial
COR	Coefficiente de Correlação
EDO	Equação Diferencial Ordinária
FMet	Faculdade de Meteorologia
FS	Desvio Fracional Padrão
GIADMT	Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique
GITT	Generalized Integral Transform Technique
INPE	Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
LAC	Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada
NMSE	Erro Quadrático Médio Normalizado
OLAD	Over-Land Alongwind Dispersion
OMS	Organização Mundial da Saúde
PROMECC	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
RS	Rio Grande do Sul

## **LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS (continuação)**

SPM	Skewed Puff Model
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
UFPel	Universidade Federal de Pelotas
ZE	Zona de Entranhamento

# LISTA DE SÍMBOLOS

## 1. Caracteres Arábicos

$A, B, E$	Matrizes dos coeficientes do problema transformado de segunda ordem
$A^{-1}$	Inversa da matriz A
$A_k$	Peso da Quadratura de Gauss
$C$	Variável genérica da equação governante
$\bar{C}$	Concentração média do contaminante passivo [ $g/m^3$ ]
$C'$	Componente turbulenta da concentração de um contaminante [ $g/m^3$ ]
$\bar{c}_{l_n}$	Coefficientes da expansão na série com autovalores dependentes de y
$\bar{c}_{l_i}$	Coefficientes da expansão na série com autovalores dependentes de z
$D$	Matriz diagonal dos autovalores da matriz P
$d_n$	Autovalores da matriz P
$F$	Fonte do problema transformado na qual $F = A^{-1}M$
$(f_m)_\nu$	Frequência do pico espectral
$(f_m)_{n,\nu}$	Frequência do pico espectral na estratificação neutra
$G$	Matriz dos coeficientes do problema transformado na qual $G = A^{-1}B$
$G_c$	Constante do coeficiente de difusão utilizado por Nieuwstadt
$H$	Matriz dos coeficientes do problema transformado na qual $H = A^{-1}E$
$H_s$	Altura da fonte [ $m$ ]
$I$	Matriz identidade
$K_\alpha$	Coefficiente de difusão onde $\alpha$ indica as direções $x$ e $y$ [ $m^2/s$ ]
$\overline{K_x}$	Média temporal do coeficiente de difusão turbulenta longitudinal [ $m^2/s$ ]
$\overline{K_y}$	Média temporal do coeficiente de difusão turbulenta lateral [ $m^2/s$ ]
$\overline{K_z}$	Média temporal do coeficiente de difusão turbulenta vertical [ $m^2/s$ ]
$k$	Constante de Von-Kármán
$k_x$	Coefficiente de difusão turbulenta longitudinal [ $m^2/s$ ]
$k_y$	Coefficiente de difusão turbulenta lateral [ $m^2/s$ ]
$k_z$	Coefficiente de difusão turbulenta vertical [ $m^2/s$ ]
$L$	Comprimento de <i>Monin-Obukhov</i> [ $m$ ]
$L_d$	Truncamento da série da decomposição

# LISTA DE SÍMBOLOS

## 1. Caracteres Arábicos (continuação)

$L_x, L_y$	Limites do domínio do problema [ $m$ ]
$M$	Fonte do problema transformado de segunda ordem
$N_y$	Truncamento da série com autovalores dependentes de $y$
$N_z$	Truncamento da série com autovalores dependentes de $z$
$O$	Matriz da inversa da transformada de Laplace $O = \mathfrak{L}^{-1}\{(rI + D)^{-1}\}$
$P$	Matriz em bloco do problema transformado de primeira ordem
$q$	Taxa de emissão [ $g/s$ ]
$r, s$	Variáveis da transformada de Laplace
$T$	Temperatura [ $K$ ]
$t$	Variável temporal [ $s$ ]
$u, v, w$	Componentes do vento nas direções $x, y$ e $z$ [ $m/s$ ]
$\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$	Velocidade média do vento nas direções $x, y$ e $z$ [ $m/s$ ]
$u', v', w'$	Componentes turbulentas do vento nas direções $x, y$ e $z$ [ $m/s$ ]
$\bar{u}_1$	Velocidade média do vento na altura de referência [ $m/s$ ]
$u_*$	Velocidade de Fricção [ $m/s$ ]
$V_g$	Velocidade de deposição [ $m/s$ ]
$W_k$	Raízes da Quadratura de Gauss
$x, y, z$	Coordenadas cartesianas
$X$	Matriz dos autovetores da matriz $P$
$X'$	Distância adimensional
$X^{-1}$	Inversa da matriz $X$
$Y(x, s)$	Vetor de incógnitas do problema transformado de segunda ordem
$Z(x, s)$	Vetor de incógnitas do problema transformado de primeira ordem
$z_i$	Altura da camada limite planetária [ $m$ ]
$z_t$	Altura predeterminada [ $m$ ]
$\overline{u'C'}$	Fluxos turbulentos do contaminante na direção $x$
$\overline{v'C'}$	Fluxos turbulentos do contaminante na direção $y$
$\overline{w'C'}$	Fluxos turbulentos do contaminante na direção $z$

# LISTA DE SÍMBOLOS

## 2. Caracteres Gregos

$\alpha, \beta$	constantes
$\alpha_1, \beta_1$	constantes do coeficiente de difusão horizontal
$\alpha_{n,m}$	Matriz
$\beta_{n,m}$	Matriz
$\Gamma$	Gradiente neutro ou adiabático (K/m)
$\delta$	Função Delta de Dirac
$\zeta_{l_n}$	Autofunções do problema de Sturm-Liouville
$\lambda_{l_n}$	Autovalores do problema de Sturm-Liouville
$\mu_{l_i}$	Autovalores do problema de Sturm-Liouville
$\xi_{l_n}$	Autofunções do problema de Sturm-Liouville
$\sigma_o$	Desvio padrão observado
$\sigma_p$	Desvio padrão predito

# 1 INTRODUÇÃO

É notório que a emissão de poluentes na atmosfera é motivo de preocupação mundial devido as suas diversas consequências, entre elas, problemas relacionados a saúde, tais como: problemas oftalmológicos, pulmonares, cardiovasculares e infecções respiratórias; além do impacto ambiental que atinge a flora e a fauna, a redução da camada de ozônio e o efeito estufa. Dados indicados pela OMS (Organização Mundial da Saúde), recentemente, estimam que a poluição do ar provoca morte de mais de 7 milhões de pessoas por ano [ONUBR, 2015]. Por esses motivos, pesquisadores de diversas áreas procuram compreender as consequências e/ou comportamento destes poluentes. Assim, verifica-se, na literatura, a existência de variados trabalhos sobre a poluição atmosférica. Entre eles, os relacionados aos modelos matemáticos que procuram entender o fenômeno, o qual controla o transporte, a dispersão e a transformação físico-química da imersão de poluentes na atmosfera.

Modelos matemáticos utilizados para o estudo do fenômeno em questão apresentam características específicas. Entre elas, cita-se a peculiaridade dos modelos eulerianos, os quais consideram o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço [Moreira and Tirabassi, 2004]. Com essa fundamentação, nesta tese, apresenta-se um modelo euleriano, o qual utiliza a equação de advecção-difusão para descrever a dispersão de poluentes na atmosfera.

O objetivo deste trabalho é considerar, no modelo, a variação temporal do campo de vento e dos coeficientes de difusão turbulenta, com isso, pretende-se contribuir no progresso de trabalhos já realizados. Além disso, a maioria dos trabalhos presentes na literatura utilizam fontes fixas, no entanto, sabe-se que uma quantidade considerável de emissões são realizadas através de fontes móveis. Portanto, outro ponto importante desta tese é representar uma fonte móvel através de fontes pontuais. Cabe salientar que a representação utilizada neste trabalho é um primeiro passo para descrever fontes móveis. Sabe-se ainda que existem outras possibilidades de representá-las, porém, devido a operacionalidade do procedimento, optou-se utilizar finitas fontes pontuais para representar o problema.

Com o intuito de alcançar esses objetivos, utilizam-se reconhecidos procedimentos na solução da equação mencionada. O primeiro é baseado na ideia do método da decomposição,

o qual gera um conjunto recursivo de equações de advecção-difusão. Nele, associa-se a técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) [Moreira et al., 2009b] para resolver tais equações. Ademais, implementa-se o modelo proposto, com o conjunto de dados do experimento de OLAD (*Over Land Alongwind Dispersion*), para comprovar sua viabilidade.

Sendo assim, esta tese estrutura-se da seguinte forma: o capítulo um traz a motivação e os objetivos do trabalho, além de mencionar o experimento utilizado na implementação do modelo; no capítulo dois, tem-se uma revisão bibliográfica de trabalhos realizados na área do tema abordado; o capítulo três expõe uma breve revisão da camada limite planetária (CLP); o capítulo quatro apresenta o modelo desenvolvido. Esse capítulo está subdividido em seções, as quais apresentam a demonstração da equação governante e o modelo proposto; o capítulo cinco apresenta a implementação do modelo. Nele, apontam-se as simplificações realizadas para implementá-lo, descreve-se o experimento utilizado, apresentam-se as parametrizações utilizadas e os resultados obtidos, além da análise estatística dos resultados; no capítulo seis, finaliza-se o trabalho com a conclusão, onde constata-se que o modelo obteve resultados satisfatórios e conseguiu simular de forma eficiente o fenômeno presente no experimento de OLAD. Além disso, apresentam-se perspectivas de trabalhos futuros. Ainda, o apêndice A apresenta, para cada amostrador, o truncamento da série da decomposição e, no apêndice B, demonstram-se termos citados no texto.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Historicamente, tem-se uma ampla pesquisa sobre o tema abordado nesta tese. Assim, na literatura, verificam-se diversos modelos que pretendem descrever o fenômeno físico da dispersão de poluentes na atmosfera. Sendo assim, a seguir, apresenta-se uma revisão bibliográfica dos trabalhos relacionados a este tema.

As primeiras soluções analíticas conhecidas da equação de advecção-difusão foram as chamadas Gaussianas. Os modelos baseados neste tipo de solução usam parâmetros de dispersão empíricos de modo a forçar a solução Gaussiana a representar o campo de concentração. Nestes modelos, o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura. Por outro lado, existem modelos baseados em soluções analíticas não-Gaussianas.

Roberts, 1923, apresentou uma solução bidimensional para fontes ao nível do solo com a velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical  $K_z$  ( $m^2/s$ ) dados pelas leis de potência como uma função da altura:

$$\bar{u} = \bar{u}_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^m \quad (2.1a)$$

$$K_z = K_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^n \quad (2.1b)$$

onde  $z_1$  é a altura na qual  $\bar{u}_1$  e  $K_1$  são analisados;  $m$  e  $n$  variam entre 0 e 1.

Rounds, 1955, encontrou uma solução bidimensional para fontes elevadas, com o mesmo perfil de vento, porém somente para perfis lineares de  $K_z$ .

Uma função potência da altura, com os expoentes seguindo a lei conjugada de Schmidt ( $\alpha = 1 - \beta$ ), para  $\bar{u}$  e  $K_z$ , foi a forma utilizada em [Smith, 1957a] para resolver a equação de transporte e difusão bidimensional. Smith, 1957b, divulgou uma outra solução com  $\bar{u}$  constante, contudo o  $K_z$  usado foi:

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

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



Uma solução muito utilizada, no Reino Unido, para o transporte de longa escala de poluentes foi proposta em [Scriven and Fisher, 1975]. Nesta solução,  $\bar{u}$  é considerado constante e  $K_z$  é definido por:

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

na qual  $z_t$  ( $m$ ) é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada superficial). Esta solução tem como condições de contorno:

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

em que  $V_g$  é a velocidade de deposição ( $m/s$ ).

Yeh and Huang, 1975, e Berlyand, 1975, apresentaram soluções para um problema bidimensional de fontes elevadas com  $\bar{u}$  e  $K_z$  dados por perfil de potência, considerando as condições de contorno  $K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$  e  $z = \infty$ . As soluções encontradas foram obtidas em termos de funções de Green. Demuth, 1978, apresentou uma solução dada em termos de funções de Bessel considerando uma camada verticalmente limitada, ou seja,  $K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$  e  $z = a$ , com  $a$  constante. Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de Yeh, Berlyand e Demuth têm sido utilizados: KAPPAG [Tirabassi et al., 1986], KAPPAG-LT [Tirabassi et al., 1989], CISP [Tirabassi and Rizza, 1992] e MAOC [Tirabassi and Rizza, 1993].

No trabalho [Van Ulden, 1978] foi utilizada a teoria da similaridade de Monin-Obukhov para gerar uma solução para a difusão vertical a partir de fontes contínuas próximas ao solo, supondo que  $\bar{u}$  e  $K_z$  seguem os perfis de similaridade. Com isso, Van Ulden obteve resultados similares aos de Roberts, porém ele formulou um modelo para fontes não superficiais, mas aplicável a fontes dentro da camada limite superficial. Esta solução é utilizada no modelo SPM [Tirabassi and Rizza, 1995].

Nieuwstadt, 1980, apresentou uma solução para um problema unidimensional dependente do tempo e utilizou os polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado por:

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

onde  $G_c$  é uma constante e  $u_*$  é a velocidade de fricção. Esta solução foi um caso particular da solução de [Smith, 1957b]. No ano seguinte, Nieuwstadt and Haan, 1981, estenderam esta solução utilizando os polinômios de Jacobi para o caso de crescimento da altura da camada limite.

Koch, 1989, desenvolveu uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, onde o vento e as difusividades seguem os perfis de potência, incluindo efeitos de absorção de contaminante pelo solo. A deposição foi considerada em termos de funções hipergeométricas.

Chrysikopoulos et al., 1992, apresentaram uma solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo de uma fonte aérea contínua ao nível do solo, para os mesmos perfis de  $\bar{u}$  e  $K_z$  definido pelas equações (2.1), incluindo um termo de deposição seca. As funções de Bessel e hipergeométricas foram incorporadas à solução.

Sharan desenvolveu outros modelos matemáticos, os quais são utilizados para dispersão tridimensional atmosférica [Sharan et al., 1996a], [Sharan et al., 1996b]. Nesses modelos, foram utilizados coeficientes de difusão constantes e parametrizações em termos da distância da fonte, respectivamente. As funções de Bessel e as combinações lineares da função de Green são usadas para essa solução. Sharan and Yadav, 1998, descreveram o processo de dispersão em condições de ventos fracos usando coeficientes de difusão variáveis, os quais foram considerados como uma função linear da distância da fonte. Resultados idênticos foram encontrados com o modelo de Cirillo and Poli, 1992.

Van Ulden, 1992, propôs uma solução aproximada para a dispersão de poluentes de contaminantes passivos liberados por uma fonte instantânea (*Puff*) próxima ao solo, descrevendo o campo de concentração como uma soma de *Puffs*. Tirabassi and Rizza, 1995, usaram esta solução no modelo chamado SPM - *Skewed Puff Model*. Ainda, um modelo *Puff* não-Gaussiano usando a expansão de Gram-Charlier para o campo de concentração e o sistema finito de equações para os momentos correspondentes foi desenvolvido em [Tirabassi and Rizza, 1997]. Com base nesta metodologia, [Sertori, 2001] apresentou um modelo que simula uma emissão (acidental ou contínua) de poluentes na proximidade do solo. Scire et al., 2000, apresentou um modelo para aplicações sobre o terreno complexo e com turbulência não homogênea, o qual foi denominado CALPUFF - *California Puff Model* e tem sido acoplado a modelos atmosféricos.

Observa-se que diversos métodos são aplicados para encontrar soluções analíticas da equação de advecção-difusão. Neste trabalho, são de interesse particular as soluções analíticas obtidas através da aplicação da técnica GITT (*Generalized Integral Transform Technique*). O teorema de Cauchy-Kowalewsky garante a existência e unicidade de uma solução analítica para a equação de advecção-difusão [Courant and Hilbert, 1989]. Sabe-se que as soluções analíticas podem ser expressas ou na forma integral, como é o caso da solução obtida aplicando a transformada de Laplace, ou com uma formulação em série, como na técnica GITT [Moreira et al., 2010]. Estas soluções são equivalentes e assim, a seguir, daremos enfoque aos modelos que utilizam essas técnicas para obter a solução analítica pretendida.

Vilhena et al., 1998, introduziram a técnica ADMM (*Advection Diffusion Multi-layer Method*). A ideia básica desse método é baseada na discretização da camada limite planetária (CLP) em  $N$  subcamadas, onde, em cada subcamada, resolve-se a equação de advecção-difusão pela técnica da transformada de Laplace considerando valores médios para o coeficiente de difusão e o perfil de vento. Assim, o problema com coeficiente variável foi substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes (coeficientes médios), acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminante nas interfaces. A solução semi-analítica é dada em forma integral. Desta forma, vários foram os trabalhos publicados utilizando esta técnica: [Moura et al., 1995], [Ferreira Neto, 2003], [Moreira et al., 2004], [Costa et al., 2004], [Moreira et al., 2005a], [Moreira et al., 2005b], [Moreira et al., 2005c], [Buligon et al., 2006]. Uma revisão completa do método ADMM pode ser encontrada em Moreira et al., 2006b.

A partir deste ponto, direcionamos o foco desta revisão aos trabalhos desenvolvidos pelo método da GITT (técnica da transformada integral generalizada) e por sua variação GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*), base do presente trabalho. A GITT é um método híbrido (analítico-numérico) [Cotta, 1993], [Cotta and Mikhaylov, 1997] derivado da transformação integral clássica de [Mikhaylov and Özisik, 1984] para problemas lineares de difusão, o qual vem sendo utilizado com grande êxito na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e advecção-difusão [Cheroto et al., 1999], [Liu et al., 2000], [Magno et al., 2002], [Pereira et al., 2002], [Alves, 2002], [Cotta and Barros, 2007]. É vasta a literatura a respeito da GITT, e a sua aplicação em problemas de

poluição atmosférica vem crescendo muito: [Moura, 1999], [Cataldi et al., 2000], [Ribeiro et al., 2000], [Ribeiro et al., 2002], [Velloso et al., 2003], [Storch and Pimentel, 2003], [Velloso et al., 2004], [Storch and Pimentel, 2005], [Pérez Guerrero et al., 2012].

Para a solução de problemas diferenciais parciais, a técnica de transformação integral GITT combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão, é usada uma base trigonométrica determinada com o apoio de um problema auxiliar. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada e faz proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. Este procedimento resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), que, uma vez solucionado, é facilmente invertido para a obtenção do resultado da equação original. A solução do sistema EDO (também chamado de problema transformado) resultante da aplicação da GITT é feita numericamente com o auxílio de subrotinas numéricas. A GITT tem como única aproximação o truncamento de um somatório infinito que fornece o resultado da equação governante do problema original. Determinado procedimento permite o controle automático do erro a partir da ordem de truncamento do referido somatório.

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

No ano de 2006, a técnica GITT foi utilizada juntamente com o método ADMM [Costa et al., 2006] para resolver a equação de advecção-difusão tridimensional. A técnica recebeu o nome de GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*). A ideia básica da solução do problema consiste na transformação do problema tridimensional num problema bidimensional pela aplicação da técnica GITT na variável  $y$ . O problema bidimensional é então resolvido pelo método ADMM. A aplicação do método GIADMT pode ser encontrada nos trabalhos [Costa et al., 2006], [Vilhena et al., 2008], [Costa et al., 2010] e [Costa et al., 2012].

Wortmann et al., 2005, apresentaram uma nova solução analítica para a equação de advecção-difusão bidimensional e simularam a dispersão de poluentes considerando um coeficiente de difusão variável com a altura. Nesse trabalho, o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) resultante da aplicação da GITT (problema transformado) foi resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Tal procedimento

recebeu o nome de GILTT e foi uma novidade em relação ao uso típico da GITT (na GITT a solução do problema transformado é numérica [Cotta, 1993], [Cotta and Mikhaylov, 1997]).

De acordo com os trabalhos analisados, pode-se resumir a obtenção da solução do problema via GILTT da seguinte forma: procede-se à transformação integral normalmente até a obtenção do sistema EDO. Aplica-se a transformada de Laplace neste sistema, o que resulta em um sistema algébrico. A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após a diagonalização, essa matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico. A inversão é analítica e sem custo computacional, por ser uma matriz diagonalizada. Assim, a solução analítica do problema transformado é finalmente encontrada.

Muitos avanços foram feitos no estudo da dispersão de poluentes utilizando o método GILTT na equação de advecção-difusão bidimensional, sendo que os trabalhos de maior relevância são os seguintes: [Wortmann et al., 2005], [Moreira et al., 2006a], [Buske et al., 2007b], [Buske et al., 2007c], [Tirabassi et al., 2008], [Buske et al., 2007a], [Tirabassi et al., 2009], [Moreira et al., 2009a], [Moreira et al., 2009b], [Buske et al., 2010] e [Schuch et al., 2011]. Uma revisão completa do método pode ser encontrada em [Moreira et al., 2009b].

Para obter a solução tridimensional aproximada, inicialmente, a técnica GILTT utilizava uma aproximação na variável  $y$  assumindo que a pluma de poluente possui uma distribuição gaussiana, essa solução recebe o nome de GILTTG. Em 2009, surgiu o novo método 3D-GILTT (*Three-dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique*) [Buske et al., 2009a], [Buske et al., 2009b], [Buske et al., 2011a], [Buske et al., 2011b], [Buske et al., 2012a], [Buske et al., 2012b], [Vilhena et al., 2012b]. Nele, resolveu-se a equação tridimensional de advecção-difusão de forma analítica. Para tanto, utilizou-se a técnica GITT na variável  $y$  do problema, e o problema bidimensional resultante foi resolvido pelo método GILTT conforme descrito acima. A GILTT segue sendo utilizada em diversos trabalhos como em [Weymar, 2012], onde foi resolvido um problema de dispersão de substâncias radioativas liberadas na atmosfera e, recentemente, em [Weymar, 2016], modela-se a dispersão de um poluente secundário formado por uma reação fotoquímica. Além disso, com o avanço dos estudos dessa técnica para resolver a equação de advecção-difusão, surgiram novas contribuições. Um novo problema auxiliar para a resolução da equação da advecção-difusão através do método GILTT foi utilizado em [Gonçalves et al., 2013], onde a solução deste

problema é dada pela função de Bessel.

Uma aplicação importante dos métodos ADMM e GILTT foi apresentada em [Pereira, 2007]. Neste trabalho, resolveu-se um problema a *puff* bidimensional transiente com o uso dos métodos mencionados e realizou-se um estudo comparativo entre os resultados obtidos com ambas as técnicas. Além disso, o modelo a *Puff* bidimensional foi descrito como o produto da solução analítica de um problema unidimensional transiente (em  $z$  e  $t$ ) por uma gaussiana em  $x$ , caracterizando a difusão nesta direção. Esta foi a primeira vez que os modelos ADMM e GILTT foram aplicados a uma fonte pontual. Em [Pereira et al., 2011], apresentou-se uma generalização do trabalho anterior, considerando uma Gaussiana em  $y$ , de modo a obter uma solução tridimensional, embora apenas resultados para o caso bidimensional foram apresentados. Ainda, foi publicado em [Tirabassi et al., 2010] uma comparação entre os resultados apresentados em [Pereira, 2007] e o método ADMM. Encontra-se, nos trabalhos [Silva, 2012], [Silva et al., 2013a] e [Silva et al., 2013b], uma solução para um problema a *Puff*, onde a equação de advecção-difusão é resolvida através do uso da solução produto demonstrada em [Ozisk, 1993], acompanhada da técnica GILTT.

Uma nova consideração para o problema de dispersão de poluentes é apresentada em [Vilhena et al., 2012a] e [Tirabassi et al., 2013]. Nos trabalhos citados, os autores consideraram o coeficiente de difusão turbulenta vertical dependente do tempo e, para resolver este problema, utilizaram a ideia do método da decomposição de Adomian. Nessa solução, usou-se apenas a parte da decomposição do método clássico de Adomian [Adomian, 1984], [Adomian, 1988] e [Adomian, 1994] para construir um conjunto recursivo de equações de advecção-difusão, as quais foram resolvidas pelo método GILTT. Como o problema é linear, os polinômios de Adomian não são utilizados.

Pode-se perceber, que a comunidade científica possui uma ampla pesquisa sobre problemas de dispersão de poluentes na atmosfera. Entretanto, ainda, há muito o que explorar neste campo de estudo. Sendo assim, o presente trabalho contribui com novas considerações na descrição desse fenômeno.

### 3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA (CLP)

É imprescindível o estudo da camada limite planetária quando pretende-se modelar a dispersão de poluentes na atmosfera, dado que, sua estrutura influencia diretamente o comportamento desse fenômeno. Sendo assim, neste capítulo, apresenta-se uma breve revisão dessa camada. Para um estudo mais aprofundado, sugere-se como referências: [Venkatram, 1980], [Panofsky and Dutton, 1984] e [Stull, 1988].

#### 3.1 Definição

A camada limite planetária, que também é denominada camada limite atmosférica (CLA), define-se como a parte da troposfera (representada na Figura 3.1) que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra, e que responde aos forçantes superficiais com uma escala de tempo de cerca de uma hora ou menos, entre eles, estão inclusos o cisalhamento do vento, os fluxos de umidade e calor, a emissão de poluentes e os efeitos da topografia. Além disso, a espessura da CLP é variável com o tempo e o espaço, podendo atingir algumas dezenas de metros a poucos quilômetros de altitude. A parte restante da troposfera é denominada atmosfera livre [Stull, 1988].

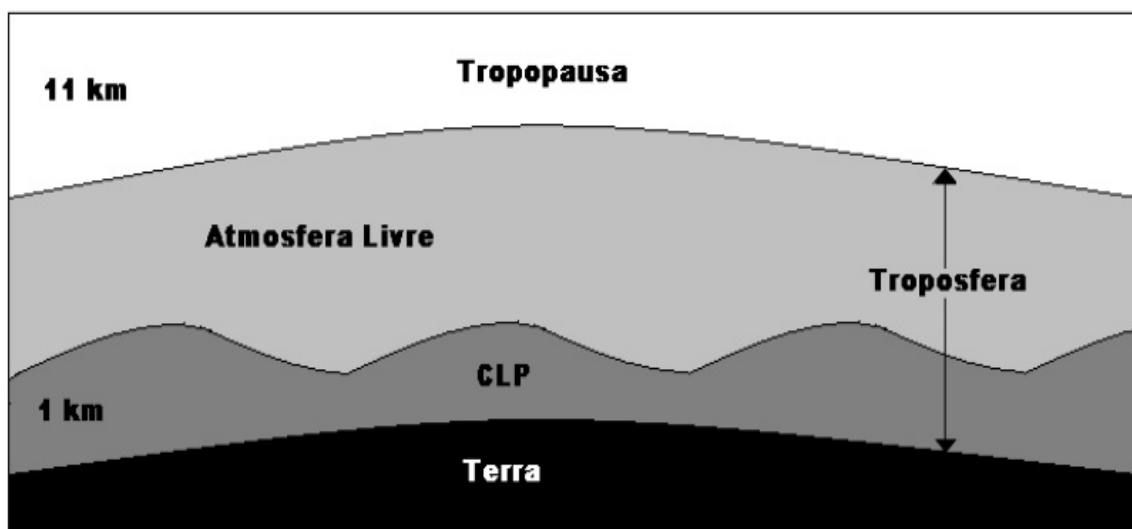


Figura 3.1: Representação da Troposfera. Imagem adaptada [Stull, 1988].

Uma importante característica da CLP é a variação diurna de temperatura. Essa variação está relacionada ao aquecimento e ao resfriamento da superfície da terra, a qual pode absorver uma grande parte da radiação incidente em dias ensolarados. Com isso, geram-se termas, massas de ar quente que se elevam a partir da superfície. Elas, junto com os turbilhões formados pelo cisalhamento provocado pelos ventos, contribuem com a formação da turbulência presente na camada limite atmosférica. A turbulência é composta pela soma de todos os turbilhões de tamanhos distintos, sobrepostos uns aos outros, sendo que, suas dimensões podem variar de 100 m a 3000 m de diâmetros.

Na camada limite atmosférica o vento médio (advecção) domina o transporte horizontal, enquanto que, o efeito da turbulência prevalece no transporte vertical. Sendo assim, verifica-se a importância das parametrizações turbulentas desses fatores, as quais serão discutidas no capítulo 5.

### 3.2 Estrutura

A CLP possui uma estrutura bem definida, a qual se desenvolve durante um ciclo diurno. Inicialmente, de acordo com os processo físicos envolvidos, pode-se classificá-la em três situações: camada limite convectiva (CLC), camada residual (CR) e camada limite estável (CLE). Pode-se observar essa estrutura na representação da Figura 3.2.

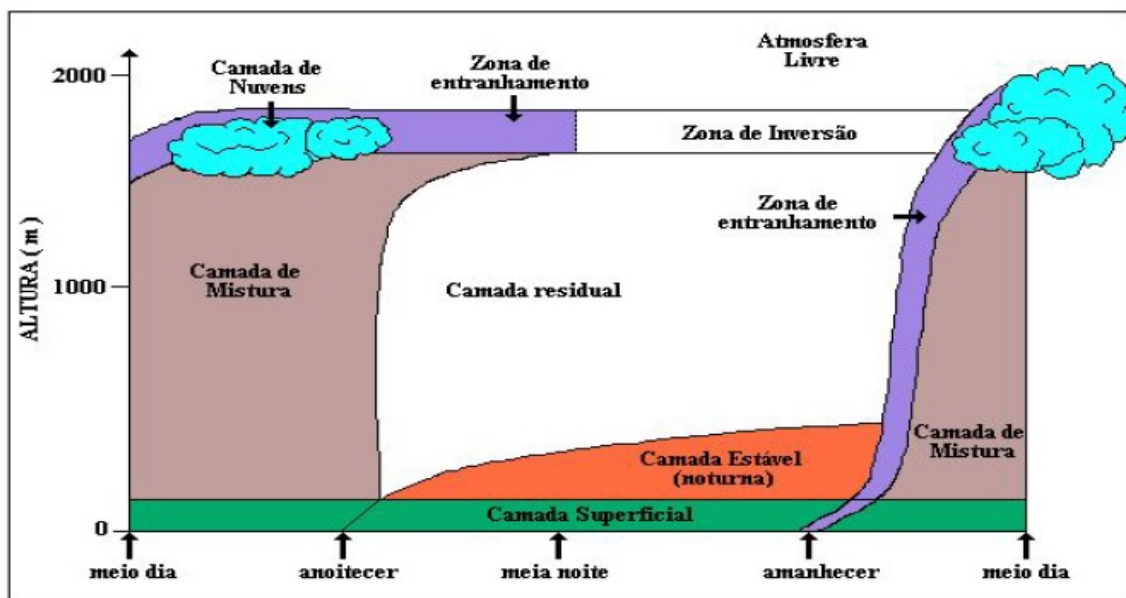


Figura 3.2: Representação do desenvolvimento da CLP. Imagem adaptada [Stull, 1988].



## Camada Limite Convectiva (CLC)

Define-se como a região da atmosfera que se estende do solo ( $z = 0$ ) até a base da inversão térmica ( $z = z_i$ ) e possui um ciclo que se inicia ao amanhecer e encerra-se ao pôr do sol. O processo de desenvolvimento dessa camada começa no momento em que o solo aquece a massa de ar próxima a superfície (fluxo de calor positivo), o que gera a convecção térmica; apresenta valor máximo próximo ao meio dia e finaliza-se ao anoitecer, quando o fluxo de calor torna-se negativo.

A CLC também é denominada camada limite instável, por apresentar como uma importante característica sua forte instabilidade. Além disso, de acordo com [Wyngaard, 1983], é possível subdividi-la em três subcamadas:

- **Camada Limite Superficial (CS):** parte inferior da camada limite convectiva e da camada limite estável. Encontra-se logo acima da superfície e corresponde a 10% da CLC. Tem a turbulência mecânica (cisalhamento do vento) predominante em sua estrutura. Ainda, são observados grandes gradientes de temperatura e velocidades. Nela, o fluxo turbulento é aproximadamente constante;
- **Camada de Mistura (CM):** corresponde a região central da CLC. Nessa camada ocorre forte mistura vertical e, devido a isso, essa região caracteriza-se por ser praticamente homogênea, onde os perfis de velocidade e temperatura são considerados constantes;
- **Zona de Entranhamento (ZE):** também definida como zona interfacial, localiza-se no topo da CLC, entre a CM e a atmosfera livre. Caracteriza-se pela inversão térmica e por limitar os movimentos verticais da CM.

## Camada Residual (CR)

A camada limite residual caracteriza-se pelo início do processo de decaimento dos grandes turbilhões que formavam a CLC. Isso ocorre por volta de meia hora antes do sol se pôr, momento em que há uma interrupção das termas. Observa-se, nessa camada, que a intensidade da turbulência é praticamente igual em todas as direções, pois encontra-se em condição de neutralidade, resultando assim uma tendência de homogeneidade na dissipação de plumas emitidas durante essa camada.

## Camada Limite Estável (CLE)

A CLE, também denominada camada limite noturna, forma-se quando o sol se põe, período em que não há incidência direta da radiação solar. Com isso, tem-se o resfriamento da superfície, o que gera fluxo de calor negativo. A turbulência presente, nessa camada, é predominantemente mecânica, ou seja, gerada pelo cisalhamento do vento. Assim, verifica-se que poluentes emitidos dentro da CLE se dispersam lentamente na vertical, e mais rapidamente na horizontal. Além disso, essa camada tem como característica possuir uma fraca turbulência.

### 3.3 Condições de Estabilidade e Característica da Pluma

A estabilidade atmosférica na CLP, mencionada na seção anterior, é definida pelo comportamento da temperatura e de seu gradiente vertical em função da altura. A atmosfera, em uma certa situação, exibe um gradiente de temperatura denominado de gradiente neutro ou adiabático  $\Gamma = 0.0098K/m$ . Porém, pode apresentar uma instabilidade atmosférica ou, ainda, uma condição estável, ambas por consequência do balanço superficial de radiação solar (Figura 3.3).

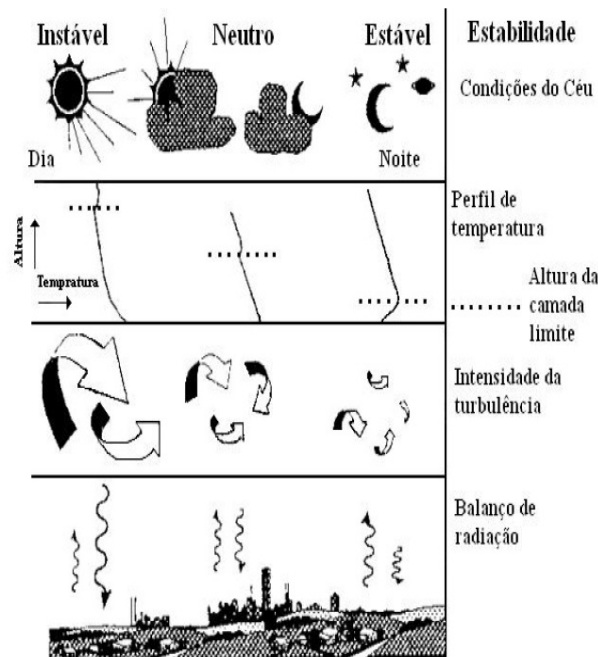


Figura 3.3: Neutralidade, instabilidade e estabilidade da CLP. Imagem adaptada [Erbrink et al., 1997].

A instabilidade atmosférica é provocada pela movimentação do fluxo de ar quente ascendente (updrafts) e do fluxo de ar frio descendente (downdraft), ocasionada pela incidência de raios solares que aquecem o solo. Nesse caso, tem-se a condição superadiabática ( $-\frac{\partial T}{\partial z} > \Gamma$ ). Como mencionado anteriormente, essa instabilidade é uma característica da camada limite convectiva e influencia diretamente a dispersão da pluma emitida sobre essa condição. Pode-se citar o *Looping* (Figura 3.4) como um exemplo de comportamento da pluma nessas condições.



Figura 3.4: Comportamento *Looping*.

Em condições de neutralidade da CLP ( $-\frac{\partial T}{\partial z} = \Gamma$ ), situação presente na camada limite residual, a pluma tende a dissipar-se na mesma proporção em ambas direções, horizontal e vertical. Sendo assim, assume um formato cônico representado na Figura 3.5.



Figura 3.5: Comportamento *Coning*.

Para uma condição de atmosfera estável, tem-se um perfil subadiabático ( $-\frac{\partial T}{\partial z} < \Gamma$ ). Isso ocorre ao anoitecer, no momento em que inicia o resfriamento da massa de ar próxima ao solo, essa situação é observada na CLE. Poluentes emitidos nessa camada dispersam-se relativamente pouco na vertical, com uma maior dissipação na horizontal. Verifica-se esse comportamento na representação do formato *Fanning* da dispersão, presente na Figura 3.6.

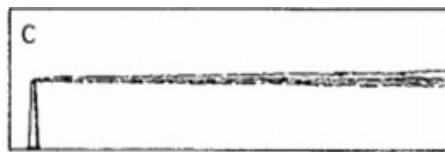


Figura 3.6: Comportamento *Fanning*.

## 4 MODELO MATEMÁTICO

Entre os modelos matemáticos conhecidos que descrevem o problema de dispersão de poluentes na atmosfera, encontram-se os lagrangeanos e os eulerianos, os quais diferenciam-se entre si pelo sistema de referência adotado. Enquanto o primeiro utiliza um sistema de referência que segue o movimento da atmosfera, o último considera o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço [Moreira and Tirabassi, 2004].

Neste trabalho, apresenta-se um modelo euleriano, o qual utiliza a equação de advecção-difusão com o fechamento de primeira ordem (Teoria K) para descrever o fenômeno da dispersão de poluentes. O presente capítulo descreve a origem da equação de advecção-difusão e o modelo proposto.

### 4.1 Equação Governante

#### Equação da conservação de massa

Considera-se que uma quantidade genérica, definida pela variável  $C$ , conserva-se na atmosfera. Sendo assim,

$$\frac{dC}{dt} = 0. \quad (4.1)$$

Ao expandir a derivada total em (4.1), tem-se

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad (4.2)$$

onde  $u$ ,  $v$  e  $w$  representam as componentes do campo de velocidade nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. O primeiro termo em (4.2) representa a variação local, ou euleriana de  $C$ , e os demais termos representam a advecção em cada uma das direções das componentes do vento [Moraes and Acevedo, 2005].

Tendo em vista que as variáveis estão contidas em um campo turbulento é necessário escrevê-las de forma a representar as irregularidades da turbulência. Sendo assim, através

do método de Reynolds, decompõe-se a variável  $C$  e as componentes do vento da seguinte forma [Stull, 1988]:

$$C = \bar{C} + C' \quad (4.3a)$$

$$u = \bar{u} + u' \quad (4.3b)$$

$$v = \bar{v} + v' \quad (4.3c)$$

$$w = \bar{w} + w' \quad (4.3d)$$

onde  $\bar{C}$ ,  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$  representam as médias temporais e  $C'$ ,  $u'$ ,  $v'$  e  $w'$  representam as flutuações dessas variáveis.

As equações (4.3) são substituídas em (4.2) e, em seguida, aplicam-se as propriedades do método de Reynolds [Stull, 1988]. Com isso, a equação (4.2) é reescrita como

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \overline{u' \frac{\partial C'}{\partial x}} + \overline{v' \frac{\partial C'}{\partial y}} + \overline{w' \frac{\partial C'}{\partial z}} = 0. \quad (4.4)$$

De acordo com [Schlichting, 1979], a equação de conservação de massa para fluidos incompressíveis é definida por

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (4.5)$$

Assim, ao substituir (4.3) em (4.5) obtém-se

$$\left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) + \left( \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} \right) = 0. \quad (4.6)$$

Verifica-se que  $\overline{u'} = \overline{v'} = \overline{w'} = 0$  através da hipótese de Reynolds. Logo, aplicam-se as médias na equação (4.6) e conclui-se que

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0. \quad (4.7)$$

Além disso, pode-se observar que

$$u' \frac{\partial C'}{\partial x} + v' \frac{\partial C'}{\partial y} + w' \frac{\partial C'}{\partial z} = \frac{\partial u' C'}{\partial x} + \frac{\partial v' C'}{\partial y} + \frac{\partial w' C'}{\partial z} - C' \left( \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} \right). \quad (4.8)$$

Portanto, após aplicar a média na equação (4.8) tem-se

$$\overline{u' \frac{\partial C'}{\partial x}} + \overline{v' \frac{\partial C'}{\partial y}} + \overline{w' \frac{\partial C'}{\partial z}} = \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v' C'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w' C'}}{\partial z}. \quad (4.9)$$

Com isso, a equação (4.4) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} = - \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v' C'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w' C'}}{\partial z}. \quad (4.10)$$

### Fechamento de Primeira Ordem

Em (4.10), os termos  $\overline{u' C'}$ ,  $\overline{v' C'}$  e  $\overline{w' C'}$  são definidos como os fluxos turbulentos de  $C$  nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. Para resolver o problema de fechamento, utiliza-se a Teoria K, a qual baseia-se na hipótese de transporte por gradiente, onde usa-se a analogia com a Lei de Fick da difusão molecular e assume-se que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média [Seinfeld and Pandis, 1997]. Logo, os fluxos turbulentos podem ser definidos como:

$$\overline{u' C'} = -k_x \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} \quad (4.11a)$$

$$\overline{v' C'} = -k_y \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} \quad (4.11b)$$

$$\overline{w' C'} = -k_z \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} \quad (4.11c)$$

Cabe salientar que, com o uso do fechamento de primeira ordem, obtém-se um modelo determinístico o qual representa apenas os valores médios dos aspectos estocásticos do fenômeno estudado. Conseqüentemente, para cada momento estocástico precisa-se então um modelo associado, ou seja, uma equação adicional. Observam-se os efeitos desta representação nos resultados apresentados no capítulo 5.

## Equação de Advecção-Difusão

Definida a equação (4.10) e o fechamento de primeira ordem, troca-se os fluxos turbulentos de (4.10) pelos termos presentes em (4.11). Assim, chega-se a uma formulação da equação de advecção-difusão como

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) + SO \quad (4.12)$$

onde  $\bar{C}$  representa a concentração média de poluentes;  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$ , e  $\bar{w}$  são as componentes do vento médio nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente;  $k_x$ ,  $k_y$  e  $k_z$  são os coeficientes de difusão turbulenta longitudinal, lateral e vertical e SO representa a fonte.

Essa equação pode ser verificada em [Arya, 1999].

## 4.2 Modelo

O modelo proposto, neste trabalho, refere-se a dispersão de poluentes na atmosfera liberados por uma fonte pontual. Sendo assim, para descrever este fenômeno, utiliza-se a equação de advecção-difusão mencionada anteriormente. Ela representa o transporte pela advecção através dos três últimos termos presentes no lado esquerdo da equação (4.12) e descreve a difusão turbulenta com os três primeiros termos do lado direito. Além disso, considera-se a situação não estacionária com o termo  $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t}$ . Ainda, escreve-se a fonte como uma condição do problema. Deste modo, apresenta-se a equação do modelo como:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right), \quad (4.13)$$

com a condição de fonte descrita por

$$\bar{u}\bar{C}(0, y, z, t) = \sum_{i=0}^N q \delta(y - y_{0_i}) \delta(z - H_s) \delta(t - t_{0_i}). \quad (4.14)$$

onde  $q$  representa a taxa de emissão,  $\delta$  as funções deltas de Dirac e o deslocamento é manifestado na relação entre  $y_{0_i}$  e  $t_{0_i}$  pela velocidade da fonte  $v = \frac{y_{0_i}}{t_{0_i}}$  para  $i > 0$ .

Parte-se do princípio que a atmosfera está livre de poluentes. Com isso, denota-se

a condição inicial ( $t = 0$ ) como

$$\overline{C}(x, y, z, 0) = 0 \quad (4.15)$$

Considera-se o fluxo nulo nos contornos do domínio  $0 \leq x \leq L_x$ ,  $0 \leq y \leq L_y$  e  $0 \leq z \leq z_i$ , onde  $z_i$  representa o topo da camada limite planetária, assim como,  $L_x$  e  $L_y$  são distâncias afastadas da fonte. Portanto, as condições de contorno são definidas por

$$k_x \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} = 0 \quad em \quad x = 0 \ e \ x = L_x \quad (4.16a)$$

$$k_y \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} = 0 \quad em \quad y = 0 \ e \ y = L_y \quad (4.16b)$$

$$k_z \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0 \ e \ z = z_i \quad (4.16c)$$

Neste trabalho, considera-se a hipótese de que o campo de velocidade e os coeficientes de difusão turbulenta variam com o tempo. Sendo assim, assume-se que:

$$\overline{u}(z, t) = \overline{U}(z) + U(z, t) \quad (4.17a)$$

$$\overline{v}(z, t) = \overline{V}(z) + V(z, t) \quad (4.17b)$$

$$\overline{w}(z, t) = \overline{W}(z) + W(z, t) \quad (4.17c)$$

para o campo de velocidade, onde  $\overline{U}(z)$ ,  $\overline{V}(z)$  e  $\overline{W}(z)$  são as médias temporais nas componentes  $\overline{u}$ ,  $\overline{v}$  e  $\overline{w}$ , além de

$$k_x(z, t) = \overline{K}_x(z) + K_x(z, t) \quad (4.18a)$$

$$k_y(z, t) = \overline{K}_y(z) + K_y(z, t) \quad (4.18b)$$

$$k_z(z, t) = \overline{K}_z(z) + K_z(z, t) \quad (4.18c)$$

para os coeficientes turbulentos, onde  $\overline{K}_x(z)$ ,  $\overline{K}_y(z)$  e  $\overline{K}_z(z)$  são as médias temporais dos coeficientes difusivos longitudinal, lateral e vertical, respectivamente. Portanto, aplica-se



(4.17) e (4.18) na equação (4.13) e, assim, obtém-se

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{V} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{W} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) = S_{ad}, \quad (4.19)$$

onde

$$S_{ad} = -U \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - V \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - W \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right). \quad (4.20)$$

#### 4.2.1 Conjunto de Equações Recursivas

Neste momento, utiliza-se a ideia do método da decomposição para resolver a equação (4.19). Logo, expande-se a concentração  $\bar{C}(x, y, z, t)$  na série truncada definida por

$$\bar{C}(x, y, z, t) = \sum_{l=0}^{L_d} \bar{C}_l(x, y, z, t). \quad (4.21)$$

Note-se que o esquema é exato no limite  $L_d \rightarrow \infty$ , enquanto, para fins de cálculos numéricos  $L_d$  é finito.

Assim, substitui-se (4.21) na equação (4.19) e obtém-se um conjunto recursivo de equações.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial x} + \bar{V} \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial y} + \bar{W} \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial z} \right) = 0 \\ \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial x} + \bar{V} \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial y} + \bar{W} \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial z} \right) = S_1 \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} + \bar{V} \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial y} + \bar{W} \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial z} \right) = S_{l-1} \end{array} \right. \quad (4.22)$$

no qual os termos  $S_{l-1}$  são definidos por

$$\begin{aligned}
 S_{l-1} = & -U \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial x} - V \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial y} - W \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial z} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Deve-se enfatizar que o esquema recursivo adotado não é único. Essa escolha dá-se por ele ser composto por equações que podem ser resolvidas analiticamente pelo método GILTT. É importante ressaltar, também, que a primeira equação do conjunto recursivo satisfaz as condições de contorno, a condição inicial e a condição de fonte do problema (4.13), enquanto as demais equações satisfazem condições homogêneas, ou seja, condições nulas. Nessa solução, utiliza-se apenas a parte da decomposição do método clássico de Adomian. Os polinômios de Adomian não estão presentes, por se tratar de um problema linear.

O próximo passo é utilizar a técnica da GILTT para resolver cada uma das equações presentes no conjunto recursivo (4.22). Com isso, calcula-se cada termo da série (4.21) e determina-se a solução do problema. Na próxima seção será apresentada a resolução através da técnica mencionada.

#### 4.2.2 Método GILTT

O método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) é uma ferramenta utilizada na resolução de problemas relacionados à dispersão de poluentes na atmosfera. Nele, utiliza-se a base de autofunções definidas pelo problema auxiliar de Sturm-Liouville, também chamado de problema de autovalores associados, para expandir a concentração. Além disso, emprega-se a transformada de Laplace.

Como citado anteriormente, usa-se a GILTT para resolver cada equação do conjunto recursivo (4.22). Sendo assim, aplica-se a transformada de Laplace às equações (4.22) e (4.23) transformando a variável  $t$ , de tal modo que  $\bar{c}_l(x, y, z, s) = \mathcal{L} \{ \bar{C}_l(x, y, z, t); t \rightarrow s \}$ . Considerando-se a condição inicial  $\bar{C}_l(x, y, z, 0) = 0$  tem-se

$$s\bar{c}_l + \bar{U}\frac{\partial\bar{c}_l}{\partial x} + \bar{V}\frac{\partial\bar{c}_l}{\partial y} + \bar{W}\frac{\partial\bar{c}_l}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{K}_x\frac{\partial\bar{c}_l}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\bar{K}_y\frac{\partial\bar{c}_l}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\bar{K}_z\frac{\partial\bar{c}_l}{\partial z}\right) = S_{l-1} \quad (4.24)$$

Após aplicar a transformada, utiliza-se a expansão da concentração na série definida por

$$\bar{c}_l(x, y, z, s) = \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l_n}(x, z, s)\zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.25)$$

onde os coeficientes  $\bar{c}_{l_n}(x, z, s)$  serão calculados. As autofunções definidas por  $\zeta_{l_n}(y)$  representam a solução do problema auxiliar e  $N_{l_n}$  é definido por

$$N_{l_n} = \int_0^{L_y} \zeta_{l_n}^2(y) dy. \quad (4.26)$$

O problema auxiliar de Sturm-Liouville mencionado é definido por

$$\zeta_{l_n}''(y) + \lambda_{l_n}^2 \zeta_{l_n}(y) = 0 \quad em \quad 0 < y < L_y \quad (4.27a)$$

$$\zeta_{l_n}'(y) = 0 \quad em \quad y = 0, L_y \quad (4.27b)$$

onde a solução é analítica e tem a forma

$$\zeta_{l_n}(y) = \cos(\lambda_{l_n} y). \quad (4.28)$$

$\lambda_{l_n} = n\pi/L_y$  representam os autovalores com  $n \in \mathbb{N}$ . Esses resultados encontram-se tabulados em [Ozisik, 1993].

Assim a equação (4.24), com o uso da série (4.25), torna-se

$$\begin{aligned}
& s \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l_n} \zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} + \bar{U} \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial x} \frac{\zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} + \bar{V} \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l_n}}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \zeta_{l_n}(y)}{\partial y} + \bar{W} \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial z} \frac{\zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} + \\
& - \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial x} \right) \frac{\zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} - \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l_n}}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \zeta_{l_n}(y)}{\partial y} \right) - \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial z} \right) \frac{\zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} = \\
& -U \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l-1_n}}{\partial x} \frac{\zeta_{l-1_n}(y)}{N_{l-1_n}^{\frac{1}{2}}} - V \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l-1_n}}{N_{l-1_n}^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \zeta_{l-1_n}(y)}{\partial y} - W \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l-1_n}}{\partial z} \frac{\zeta_{l-1_n}(y)}{N_{l-1_n}^{\frac{1}{2}}} + \\
& \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}_{l-1_n}}{\partial x} \right) \frac{\zeta_{l-1_n}(y)}{N_{l-1_n}^{\frac{1}{2}}} + \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l-1_n}}{N_{l-1_n}^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \zeta_{l-1_n}(y)}{\partial y} \right) + \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}_{l-1_n}}{\partial z} \right) \frac{\zeta_{l-1_n}(y)}{N_{l-1_n}^{\frac{1}{2}}}
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Em seguida, aplica-se, na equação (4.29), o operador integral definido por

$$\frac{1}{N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} (\cdot) \zeta_{l_m}(y) dy. \tag{4.30}$$

Pode-se observar que:

$$\zeta_{l_n}''(y) = -\lambda_{l_n}^2 \zeta_{l_n}(y), \text{ através da equação (4.27);}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \zeta_{l_n}(y)}{\partial y} \right) = k_y \frac{\partial^2 \zeta_{l_n}(y)}{\partial y^2}, \text{ pois considera-se o coeficiente de difusão lateral } (k_y) \text{ independente de } y.$$

Sendo assim, escreve-se

$$\sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l_n}}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \zeta_{l_n}(y)}{\partial y} \right) = -k_y \sum_{n=0}^{N_y} \lambda_{l_n}^2 \bar{c}_{l_n} \frac{\zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}}. \tag{4.31}$$

Como o problema é linear, as bases de autovalores permanecem as mesmas no conjunto recursivo. Deste modo, verifica-se que  $\zeta_{l-1_n} = \zeta_{l_n}$  e  $N_{l-1_n}^{\frac{1}{2}} = N_{l_n}^{\frac{1}{2}}$ . Logo, a equação (4.29) adquire a forma:

$$\begin{aligned}
& s \sum_{n=0}^{N_y} \bar{c}_{l_n} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \bar{U} \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \\
& + \bar{V} \sum_{n=0}^{N_y} \bar{c}_{l_n} \int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_{l_n}(y)}{\partial y} \frac{\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \bar{W} \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \\
& - \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial x} \right) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \bar{K}_y \sum_{n=0}^{N_y} \lambda_{l_n}^2 \bar{c}_{l_n} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \\
& - \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{c}_{l_n}}{\partial z} \right) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy = -U \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l_{-1n}}}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \\
& - V \sum_{n=0}^{N_y} \bar{c}_{l_{-1n}} \int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_{l_m}(y)}{\partial y} \frac{\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy - W \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial \bar{c}_{l_{-1n}}}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_m}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \\
& + \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}_{l_{-1n}}}{\partial x} \right) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_m}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy - K_y \sum_{n=0}^{N_y} \lambda_{l_n}^2 \bar{c}_{l_{-1n}} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_m}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy + \\
& + \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}_{l_{-1n}}}{\partial z} \right) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy
\end{aligned} \tag{4.32}$$

onde representam-se as integrais pelas matrizes definidas por

$$\alpha_{l_n, m} = \int_0^{L_y} \frac{\zeta_{l_n}(y)\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \tag{4.33}$$

e

$$\beta_{l_n, m} = \int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_{l_n}(y)}{\partial y} \frac{\zeta_{l_m}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}N_{l_m}^{\frac{1}{2}}} dy = \begin{cases} \frac{2n^2}{L_y(m^2-n^2)} [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1], & m \neq n \\ 0, & m = n \end{cases} \tag{4.34}$$

Os resultados dessas integrais podem ser conferidos no apêndice B.1 e B.2.

Assim, reescreve-se a equação (4.32) como

$$\begin{aligned}
& s\bar{c}_{l_n}\alpha_{l_n,m} + \bar{U}\frac{\partial\bar{c}_{l_n}}{\partial x}\alpha_{l_n,m} + \bar{V}\bar{c}_{l_n}\beta_{l_n,m} + \bar{W}\frac{\partial\bar{c}_{l_n}}{\partial z}\alpha_{l_n,m} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\bar{K}_x\frac{\partial\bar{c}_{l_n}}{\partial x}\right)\alpha_{l_n,m} + \\
& + \bar{K}_y\lambda_{l_n}^2\bar{c}_{l_n}\alpha_{l_n,m} - \frac{\partial}{\partial z}\left(\bar{K}_z\frac{\partial\bar{c}_{l_n}}{\partial z}\right)\alpha_{l_n,m} = -U\frac{\partial\bar{c}_{l-1n}}{\partial x}\alpha_{l_n,m} - V\bar{c}_{l-1n}\beta_{l_n,m} + \\
& -W\frac{\partial\bar{c}_{l-1n}}{\partial z}\alpha_{l_n,m} + \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial\bar{c}_{l-1n}}{\partial x}\right)\alpha_{l_n,m} - K_y\lambda_{l_n}^2\bar{c}_{l-1n}\alpha_{l_n,m} + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial\bar{c}_{l-1n}}{\partial z}\right)\alpha_{l_n,m}
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Após concluir essa etapa, repete-se o procedimento de expansão em séries para resolver a equação (4.35). Porém, agora, as autofunções são dependentes da variável  $z$ . Com isso, define-se a série como

$$\bar{c}_{l_n}(x, z, s) = \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_i}(x, s)\xi_{l_i}(z) \tag{4.36}$$

onde  $\bar{c}_{l_i}(x, s)$  são os coeficientes a serem encontrados e  $\xi_{l_i}(z)$  são autofunções, definidas como solução do problema auxiliar de Sturm-Liouville dado por

$$\xi_{l_i}''(z) + \mu_{l_i}^2\xi_{l_i}(z) = 0 \quad em \quad 0 < z < z_i \tag{4.37a}$$

$$\xi_{l_i}'(z) = 0 \quad em \quad z = 0, z_i \tag{4.37b}$$

Novamente, a solução analítica encontra-se tabulada em [Ozisik, 1993] e tem a forma definida por

$$\xi_{l_i}(z) = \cos(\mu_{l_i}z) \tag{4.38}$$

com os autovalores denotados por  $\mu_{l_i} = i\pi/z_i$ , onde  $i \in \mathbb{N}$ . Assim, ao substituir (4.36) na equação (4.35) tem-se

$$\begin{aligned}
& s \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \xi_{l_i}(z) \alpha_{l_{n,m}} + \bar{U} \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \xi_{l_i}(z) \alpha_{l_{n,m}} + \bar{V} \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \xi_{l_i}(z) \beta_{l_{n,m}} + \bar{W} \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \alpha_{l_{n,m}} + \\
& - \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \right) \xi_{l_i}(z) \alpha_{l_{n,m}} + \bar{K}_y \lambda_{l_n}^2 \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \xi_{l_i}(z) \alpha_{l_{n,m}} - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \alpha_{l_{n,m}} = \\
& - U \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \xi_{l_i}(z) \alpha_{l_{n,m}} - V \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \xi_{l_i}(z) \beta_{l_{n,m}} - W \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \alpha_{l_{n,m}} + \\
& + \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \right) \xi_{l_i}(z) \alpha_{l_{n,m}} - K_y \lambda_{l_n}^2 \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \xi_{l_i}(z) \alpha_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \alpha_{l_{n,m}}
\end{aligned} \tag{4.39}$$

e ao aplicar o operador integral  $\int_0^{z_i} (\cdot) \xi_{l_j}(z) dz$ , a equação (4.39) torna-se

$$\begin{aligned}
& s \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \int_0^{z_i} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \int_0^{z_i} \bar{U} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\
& + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \int_0^{z_i} \bar{V} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \beta_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \int_0^{z_i} \bar{W} \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\
& - \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{c}_i}{\partial x} \right) \int_0^{z_i} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \lambda_{l_n}^2 \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \int_0^{z_i} \bar{K}_y \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\
& - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_i \int_0^{z_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} = - \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \int_0^{z_i} U \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\
& - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} V \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \beta_{l_{n,m}} - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} W \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\
& + \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \right) \int_0^{z_i} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} - \lambda_{l_n}^2 \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} K_y \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\
& + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

O coeficiente de difusão longitudinal  $k_x$  apresenta dependência na variável  $x$ . Portanto, admite-se que  $\frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{c}_{l_i}}{\partial x} \right) = \frac{\partial k_x}{\partial x} \frac{\partial \bar{c}_{l_i}}{\partial x} + k_x \frac{\partial^2 \bar{c}_{l_i}}{\partial x^2}$ . Além disso,

$$\int_0^{z_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \xi_{l_j}(z) dz = -\frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} k_z \operatorname{sen} \left( \frac{i\pi}{z_i} z \right) \operatorname{sen} \left( \frac{j\pi}{z_i} z \right) dz. \quad (4.41)$$

Esse resultado pode ser verificado no apêndice B.3.

Com essas considerações, reescreve-se a equação (4.40) da forma

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial^2 \bar{c}_{l_i}}{\partial x^2} \int_0^{z_i} \bar{K}_x \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_{l_i}}{\partial x} \int_0^{z_i} \frac{\partial \bar{K}_x}{\partial x} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\ & - \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_{l_i}}{\partial x} \int_0^{z_i} \bar{U} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_i} \int_0^{z_i} s \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\ & - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_i} \int_0^{z_i} \bar{V} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \beta_{l_{n,m}} - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_i} \int_0^{z_i} \bar{W} \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\ & - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_i} \int_0^{z_i} \bar{K}_y \lambda_{l_n}^2 \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} - \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_i} \frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} \bar{K}_z \operatorname{sen} \left( \frac{i\pi}{z_i} z \right) \operatorname{sen} \left( \frac{j\pi}{z_i} z \right) dz \alpha_{l_{n,m}} = \\ & = \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_{l_{-1_i}}}{\partial x} \int_0^{z_i} U \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_{-1_i}} \int_0^{z_i} V \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \beta_{l_{n,m}} + \\ & + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_{-1_i}} \int_0^{z_i} W \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} - \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}_{l_{-1_i}}}{\partial x} \right) \int_0^{z_i} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \\ & + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_{-1_i}} \int_0^{z_i} K_y \lambda_{l_n}^2 \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \alpha_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_{-1_i}} \frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} K_z \operatorname{sen} \left( \frac{i\pi}{z_i} z \right) \operatorname{sen} \left( \frac{j\pi}{z_i} z \right) dz \alpha_{l_{n,m}} \end{aligned} \quad (4.42)$$

Neste momento, representa-se (4.42) através de um sistema de equações diferenciais ordinárias, onde  $Y(x, s)$  denota o vetor dos coeficientes  $\bar{c}_{l_i}(x, s)$ . Com isso, tem-se o problema transformado

$$AY''(x, s) + BY'(x, s) + EY(x, s) = M \quad (4.43)$$



onde os termos A, B, E e M são definidos por

$$A = \int_0^{z_i} \bar{K}_x \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \quad \alpha_{l_{n,m}}, \quad (4.44)$$

$$B = \left[ \int_0^{z_i} \frac{\partial \bar{K}_x}{\partial x} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz - \int_0^{z_i} \bar{U} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \right] \alpha_{l_{n,m}}, \quad (4.45)$$

$$E = \left[ - \int_0^{z_i} s \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz - \int_0^{z_i} \bar{W} \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \xi_{l_j}(z) dz - \lambda_{l_n}^2 \int_0^{z_i} \bar{K}_y \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz + \right. \\ \left. - \frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} \bar{K}_z \operatorname{sen} \left( \frac{i\pi}{z_i} z \right) \operatorname{sen} \left( \frac{j\pi}{z_i} z \right) dz \right] \alpha_{l_{n,m}} - \int_0^{z_i} \bar{V} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \quad \beta_{l_{n,m}} \quad (4.46)$$

e

$$M = \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \int_0^{z_i} U \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \quad \alpha_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} V \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \quad \beta_{l_{n,m}} + \\ + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} W \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \xi_{l_j}(z) dz \quad \alpha_{l_{n,m}} - \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \right) \int_0^{z_i} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \quad \alpha_{l_{n,m}} + \\ + \lambda_{l_n}^2 \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} K_y \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz \quad \alpha_{l_{n,m}} + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} K_z \operatorname{sen} \left( \frac{i\pi}{z_i} z \right) \operatorname{sen} \left( \frac{j\pi}{z_i} z \right) dz \quad \alpha_{l_{n,m}} \quad (4.47)$$

O problema transformado (4.43) possui solução analítica. Sua resolução dá-se através do uso da redução de ordem e da utilização da transformada de Laplace. Trabalhos referentes a essa resolução podem ser encontrados em [Vilhena and Wortmann, 2005] e [Buske, 2008].

O primeiro passo para resolver a equação (4.43) é multiplicá-la por  $A^{-1}$  e, assim, chega-se em

$$Y''(x, s) + GY'(x, s) + HY(x, s) = F \quad (4.48)$$

onde os termos  $G$ ,  $H$  e  $F$  são definidos como

$$G = A^{-1}B, \quad H = A^{-1}E \quad e \quad F = A^{-1}M \quad (4.49)$$

Agora, pretende-se reduzir a ordem da equação (4.48). Para isso, assume-se que

$$Z_1(x, s) = Y(x, s) \quad (4.50a)$$

$$Z_2(x, s) = Y'(x, s) \quad (4.50b)$$

Sendo assim, é possível escrever o seguinte sistema

$$\begin{cases} Z_1'(x, s) - Z_2(x, s) = 0 \\ Z_2'(x, s) + GZ_2(x, s) + HZ_1(x, s) = F \end{cases} \quad (4.51)$$

Ainda, de forma matricial, tem-se

$$Z' + P \cdot Z = R \quad (4.52)$$

onde  $Z$  e  $R$  são definidos como

$$Z = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{bmatrix} \quad e \quad R = \begin{bmatrix} 0 \\ F \end{bmatrix}. \quad (4.53)$$

$P$  é a matriz em forma de bloco dada por

$$P = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ H & G \end{bmatrix}. \quad (4.54)$$

Ao reduzir a ordem do problema transformado (4.48), obtém-se um sistema de equações diferenciais de primeira ordem. Para resolvê-lo, aplica-se a transformada de Laplace na equação (4.52). Logo

$$r\bar{Z}(r, s) - Z(0, s) + P\bar{Z}(r, s) = R \quad (4.55)$$

onde  $\bar{Z}(r, s) = \mathcal{L}\{Z(x, s); x \rightarrow r\}$  representa a transformada de Laplace de  $Z(x, s)$ . O passo seguinte é decompor a matriz  $P$  em seus autovetores e autovalores da seguinte forma

$$P = XDX^{-1} \quad (4.56)$$

onde  $D$  é a matriz diagonal de autovalores da matriz  $P$ ,  $X$  é a matriz dos respectivos autovetores e  $X^{-1}$  é a matriz inversa de  $X$ . Assim, substitui-se (4.56) em (4.55) e obtém-se

$$\bar{Z}(r, s) = X(rI + D)^{-1}X^{-1}Z(0, s) + X(rI + D)^{-1}X^{-1}R \quad (4.57)$$

Cabe salientar que essa resolução é aplicada a todas equações do sistema recursivo (4.22). No entanto, para primeira equação do sistema, tem-se o valor de  $M = 0$ , consequentemente,  $R = 0$ . Portanto, simplifica-se a equação (4.57) e apresenta-se como

$$\bar{Z}(r, s) = X(rI + D)^{-1}X^{-1}Z(0, s) \quad (4.58)$$

Por outro lado, as demais equações do sistema recursivo possuem condição de fonte nula. Com isso, verifica-se que  $Z(0, s) = 0$ . Logo, a (4.57) torna-se da forma

$$\bar{Z}(r, s) = X(rI + D)^{-1}X^{-1}R \quad (4.59)$$

Ainda, é necessário aplicar a transformada inversa de Laplace na equação (4.57) para obter a solução de (4.52). Sendo assim, observa-se que  $(rI + D)^{-1}$  é a matriz definida por

$$(rI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{r+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{r+d_N} \end{bmatrix}. \quad (4.60)$$

Portanto, a transformada inversa de Laplace  $\mathcal{L}^{-1}\{(rI + D)^{-1}; r \rightarrow x\}$  tem solução analítica

e é denotada por

$$O(x, s) = \mathfrak{L}^{-1}\{(rI + D)^{-1}\} = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_N x} \end{bmatrix}. \quad (4.61)$$

em que  $d_n$  são os autovalores da matriz  $P$ , ou ainda, os elementos da matriz diagonal  $D$ . Com isso, apresenta-se a solução do sistema de equações (4.52) da seguinte forma:

$$Z(x, s) = XOX^{-1}Z(0, s) + XOX^{-1}R \quad (4.62)$$

De forma a evitar a inversão da matriz  $X$ , define-se  $\eta = X^{-1}Z(0, s)$  (no caso da primeira equação do conjunto recursivo) ou  $\eta = X^{-1}R$  (para as demais equações). Assim, ao resolver o sistema linear  $X\eta = R$  ou  $X\eta = Z(0, s)$ , obtém-se o valor de  $\eta$  e, então, a solução de (4.52) pode ser escrita da seguinte forma:

$$Z(x, s) = XP\eta \quad (4.63)$$

Uma vez calculados os valores de  $Z(x, s)$ , encontram-se, também, os valores de  $Y(x, s)$  e, conseqüentemente, obtém-se os valores dos coeficientes  $\bar{c}_{l_i}(x, s)$ . Portanto a série

$$\bar{c}_{l_n}(x, z, s) = \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l_i}(x, s)\xi_{l_i}(z)$$

é bem definida. Com isso, determina-se, também:

$$\bar{c}_l(x, y, z, s) = \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l_n}(x, z, s)\zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}}$$

Para determinar a solução final da equação (??) utiliza-se a transformada inversa de Laplace. Com isso,  $\bar{C}_l(x, y, z, t) = \mathfrak{L}^{-1}\{\bar{c}_l(x, y, z, s); s \rightarrow t\}$ . Esta inversão é obtida numericamente através da quadratura de Gauss [Stroud and Secrest, 1966], de tal forma que

a solução é dada por:

$$\bar{C}_l(x, y, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{W_k}{t} A_k \sum_{n=0}^{N_y} \frac{\bar{c}_{l_n}(x, z, \frac{W_k}{t}) \zeta_{l_n}(y)}{N_{l_n}^{\frac{1}{2}}} \quad (4.64)$$

onde  $A_k$  representa os pesos da quadratura gaussiana e  $W_k$  são as raízes da quadratura.

## 5 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

Com o intuito de comprovar a viabilidade e relevância do trabalho, optou-se por utilizar o conjunto de dados do experimento Over-Land Alongwind Dispersion (OLAD) na simulação e na comparação dos resultados de concentração obtidos com o modelo. Nele, os parâmetros meteorológicos, bem como, os dados de concentração disponíveis são apresentados em médias de 15 minutos, assim justifica-se sua escolha. A seguir, apresenta-se uma breve descrição do experimento, a adaptação do modelo proposto para a simulação e as parametrizações turbulentas utilizadas. Maiores detalhes sobre a experimentação podem ser consultados em [Biltoft and Carter, 1999].

### 5.1 Experimento de OLAD

A experimentação intitulada Over-Land Alongwind Dispersion foi realizada de 8 a 25 de setembro de 1997 em Dugway (U.S. Army Dugway Proving Ground), no West Desert Test Center, que está localizado no centro-oeste do estado de Utah, aproximadamente 1300 m acima do nível do mar. O objetivo principal da investigação foi adquirir informações do deslocamento longitudinal da pluma de poluentes sobre distâncias de 2 a 20 km da emissão. O experimento foi realizado com a liberação de quantidades conhecidas de  $SF_6$  (hexafluoreto de enxofre) ao longo de uma linha perpendicular a direção prevalecente do vento. A Figura 5.1 apresenta o mapa do campo onde o experimento foi efetuado.

As liberações foram realizadas por sistemas de disseminação montados em um caminhão e em um avião. O sistema de disseminação montado no avião executou uma liberação de 33 kg/min de vazão, sobre uma distância de 20 km (fonte em linha de 20 km), sobre a rodovia Baseline, a 100 m do nível do solo, enquanto que o sistema montado no caminhão, a 3 m do nível do solo, liberou 1,5 kg/min de vazão, sobre uma distância de 10 km na rodovia Bravo (marcada em vermelho na Figura 5.1). A pluma de poluentes foi carregada na direção das bolsas de amostragem localizadas em três linhas paralelas às fontes, variando de 2 a 20 km de distância da rodovia Bravo.

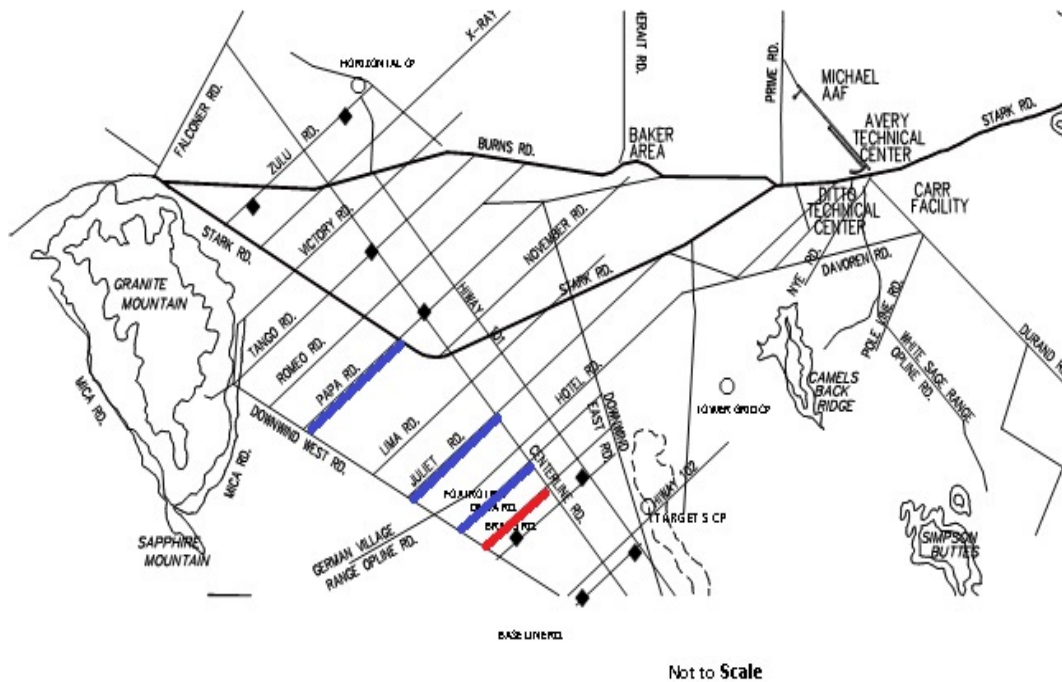


Figura 5.1: Imagem adaptada do campo de experimento de OLAD [Biltoft and Carter, 1999].

## 5.2 Adaptação do Modelo

Para simular o modelo proposto na seção 4.2, optou-se pela escolha dos experimentos do dia 12/09/1997 (OLAD 5) e do dia 25/09/1997 (OLAD 12). Esses, de acordo com [Chang and Hanna, 2002], caracterizam-se como casos de vento fraco, por apresentarem velocidade do vento, a 10 m de altura, menor ou igual a 3,5 m/s. Ambos os casos são de disseminação feita por um sistema acoplado a um caminhão, que desloca-se na rodovia Bravo, paralela às rodovias Foxtrot, Juliet e Papa (marcadas em azul no mapa da Figura 5.1), onde estão dispostas as bolsas de amostragem (denominadas LCs), e perpendicular à direção predominante do vento. A Figura 5.2 representa essa descrição. Destaca-se, aqui, o sentido em que o caminhão se desloca (partida/chegada) na rodovia, além da orientação dos analisadores em cada uma das linhas de amostragem.

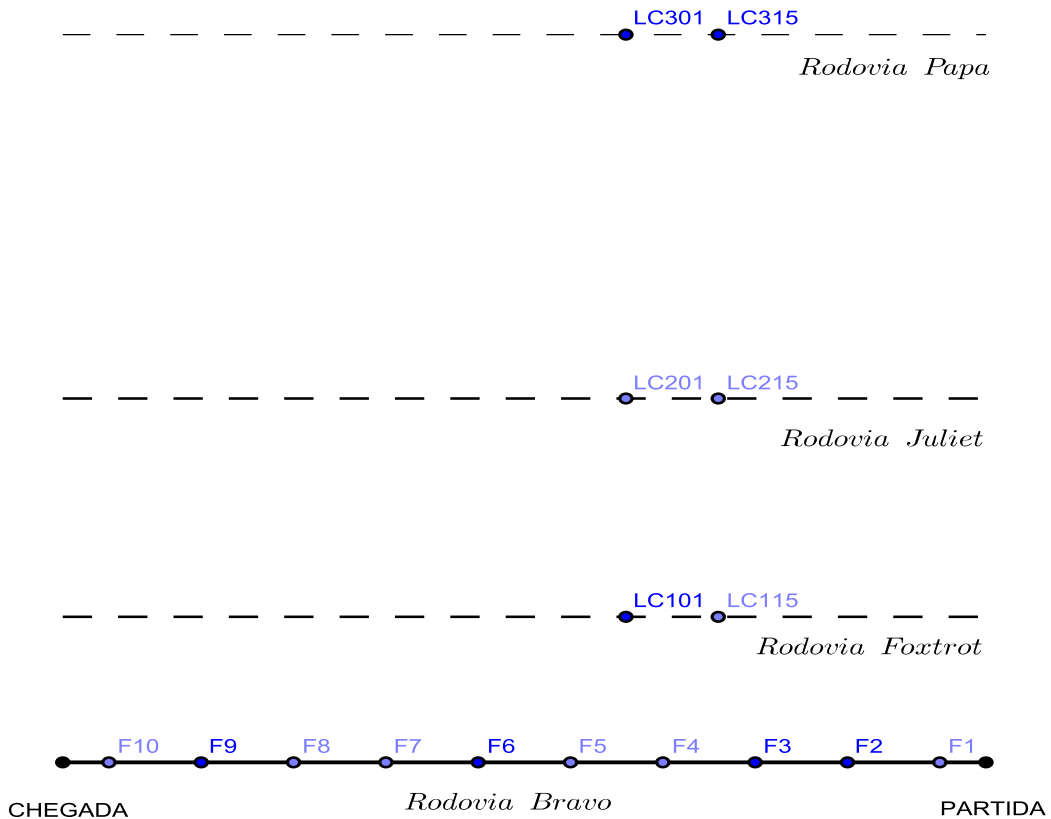


Figura 5.2: Representação da disseminação do traçador.

Entende-se que existem outras possibilidades de representar fontes móveis, por exemplo, por fontes de convolução. No entanto, para uma primeira representação e devido a sua operacionalidade, optou-se por aproximar a fonte em linha do experimento de OLAD através de uma sequência de fontes pontuais. Assim, foram utilizadas 10 fontes ( $F1, \dots, F10$ ) pontuais com emissão a uma taxa  $q$  estipulada, conforme a representação da Figura 5.2. Além disso, para considerar a mobilidade do sistema de disseminação presente no experimento, o tempo é defasado entre uma fonte e outra. Por fim, a concentração obtida nos pontos de amostragem é determinada através do somatório da concentração gerada por cada uma das 10 fontes pontuais. Sendo assim,

$$\bar{C}_T(x, y, z, t) = \sum_{a=0}^9 \bar{C}_l(x, y, z, t - a\Delta t - \frac{\Delta t}{2}) \quad (5.1)$$

onde  $\bar{C}_l$  é a concentração obtida para cada fonte pontual,  $\bar{C}_T$  é a concentração total com a contribuição de todas as fontes e  $\Delta t$  representa o intervalo de tempo entre as fontes.



As bolsas de amostragem foram dispostas espaçadas de 100 em 100 metros em cada rodovia (Foxtrot, Juliet e Papa) distantes 2, 5 e 10 km, respectivamente, da rodovia Bravo e produziram amostras de concentrações em médias de 15 minutos.

Considerando-se que os dados referentes aos analisadores presentes na rodovia Papa (3ª linha de amostragem), para OLAD 5 e OLAD 12, no período da simulação, apresentam-se como falhos (de acordo com [Biltoft and Carter, 1999]), em sua grande maioria, decidiu-se não utilizá-los neste trabalho. Sendo assim, a simulação foi realizada apenas para as duas primeiras linhas de coleta. Portanto, na Tabela 5.1 estão as coordenadas dos amostradores da primeira linha, localizada na rodovia Foxtrot e na Tabela 5.2 as coordenadas referentes aos amostradores da rodovia Juliet.

Tabela 5.1: Coordenadas dos amostradores da rodovia Foxtrot.

Amostrador	Latitude(°N)	Longitude (°W)
LC101	40,0807	113,0937
LC102	40,0807	113,0931
LC103	40,0811	113,0925
LC104	40,0821	113,0915
LC105	40,0827	113,0904
LC106	40,0829	113,0897
LC107	40,0834	113,0872
LC108	40,0841	113,0878
LC109	40,0849	113,0868
LC110	40,0855	113,0859
LC111	40,0859	113,0851
LC112	40,0862	113,0846
LC113	40,0868	113,0837
LC114	40,0873	113,0829
LC115	40,0878	113,0819

Tabela 5.2: Coordenadas dos amostradores da rodovia Juliet.

Amostrador	Latitude(°N)	Longitude (°W)
LC201	40,0966	113,1128
LC202	40,0971	113,1119
LC203	40,0976	113,1110
LC204	40,0980	113,1099
LC205	40,0985	113,1091
LC206	40,0993	113,1081
LC207	40,1002	113,1070
LC208	40,1003	113,1063
LC209	40,1011	113,1052
LC210	40,1014	113,1046
LC211	40,1021	113,1039
LC212	40,1028	113,1030
LC213	40,1033	113,1022
LC214	40,1036	113,1009
LC215	40,1046	113,1003

### Taxa de Emissão

Tendo em vista que a emissão realizada no experimento através do deslocamento do caminhão na rodovia Bravo segue a direção transversal à direção predominante do vento, torna-se necessário, para utilizar a fonte pontual do modelo, estipular uma forma de estimativa dessa taxa.

Os dados de massa total liberada em cada experimento e a distância percorrida pelo caminhão na disseminação são fornecidos em [Biltoft and Carter, 1999]. Sendo assim, é possível calcular a relação de massa por comprimento ( $g/m$ ). Além disso, tendo a componente  $\bar{u}(m/s)$  do vento como velocidade referência para o transporte do traçador, multiplica-se a relação massa/comprimento por  $\bar{u}$  e, assim, obtém-se uma estimativa para a taxa de emissão  $q(g/s)$ . A Figura 5.3 apresenta uma representação da estimativa da taxa de emissão. Cabe salientar, que essa forma de estipular o valor de  $q$  foi utilizado em [Degrazia, 2005].

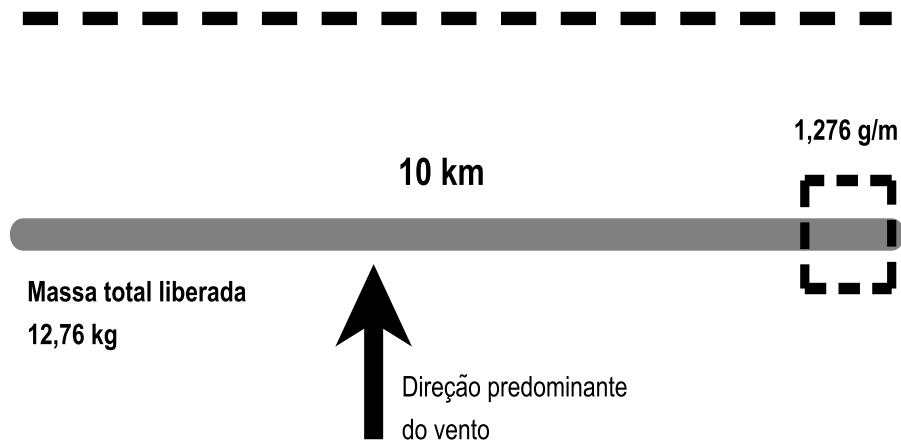


Figura 5.3: Representação para estimativa da emissão.

### Solução do problema

Os experimentos apresentam uma direção predominante do vento no período de análise das amostras. Sendo assim, é possível realizar algumas simplificações na equação de advecção-difusão (??) do modelo apresentado. Logo, assume-se que a componente  $\bar{u}$  está nessa direção, assim, pode-se desprezar a contribuição das componentes  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$ . Com isso, a equação que descreve o problema simulado torna-se

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) = S, \quad (5.2)$$

onde

$$S = -U \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right).$$

A resolução da equação (5.2) segue o mesmo procedimento apresentado na subseção (4.2.2). Logo, usa-se a série (4.21) para encontrar o conjunto recursivo definido por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}_0}{\partial z} \right) = 0 \\ \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial z} \right) = S_1 \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \bar{K}_x \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \bar{K}_y \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \bar{K}_z \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial z} \right) = S_{l-1} \end{array} \right. \quad (5.3)$$

no qual os termos  $S_{l-1}$  são definidos por

$$S_{l-1} = -U \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{C}_{l-1}}{\partial z} \right) \quad (5.4)$$

Com os passos vistos em (4.2.2), define-se o problema transformado

$$AY''(x, s) + BY'(x, s) + EY(x, s) = M \quad (5.5)$$

com os seguintes termos:

$$A = \int_0^{z_i} \bar{K}_x \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz,$$

$$B = \int_0^{z_i} \frac{\partial \bar{K}_x}{\partial x} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz - \int_0^{z_i} \bar{U} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz,$$

$$E = - \int_0^{z_i} s \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz - \lambda_{l_n}^2 \int_0^{z_i} \bar{K}_y \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz - \frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} \bar{K}_z \text{sen} \left( \frac{i\pi}{z_i} z \right) \text{sen} \left( \frac{j\pi}{z_i} z \right) dz,$$

e

$$\begin{aligned}
M = & \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \int_0^{z_i} U \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz - \sum_{i=0}^{N_z} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}_{l-1_i}}{\partial x} \right) \int_0^{z_i} \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz + \\
& + \lambda_{ln}^2 \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \int_0^{z_i} K_y \xi_{l_i}(z) \xi_{l_j}(z) dz + \sum_{i=0}^{N_z} \bar{c}_{l-1_i} \frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} K_z \operatorname{sen} \left( \frac{i\pi}{z_i} z \right) \operatorname{sen} \left( \frac{j\pi}{z_i} z \right) dz
\end{aligned}$$

A resolução do problema transformado (5.5) é a mesma apresentada para equação (4.43).

### 5.3 Parametrização Turbulenta

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

#### Perfil de Vento

A velocidade do perfil de vento pode ser descrita pela lei da potência [Panofsky and Dutton, 1984].

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_1} = \left( \frac{z}{z_1} \right)^n \quad (5.6)$$

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

#### Coefficientes de Difusão Turbulenta

Entre os coeficientes de difusão turbulenta presentes na literatura, optou-se pelos coeficientes apresentados a seguir, de acordo com a condição de estabilidade da CLP.

- Coeficiente de difusão vertical: [Degrazia et al., 2000]

$$K_z = \frac{0.3(1 - z/z_i)u_*z}{1 + 3.7(z/\Lambda)} \quad (5.7)$$

$$\Lambda = L(1 - z/z_i)^{5/4}$$

onde  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $z$  é a distância na vertical e  $z_i$  é a altura da camada limite.

- Coeficiente de difusão longitudinal e lateral: [Degrazia and Moraes, 1992], [Degrazia et al., 1996]:

$$\frac{K_\alpha}{u_*z_i} = \frac{2\sqrt{\pi}0.64a_\nu^2(1 - \frac{z}{z_i})^{\alpha_1}(\frac{z}{z_i})X'[2\sqrt{\pi}0.64a_\nu^2(\frac{z}{z_i}) + 8a_\nu(f_m)_\nu(1 - \frac{z}{z_i})^{\alpha_1/2}X']}{[2\sqrt{\pi}0.64(\frac{z}{z_i}) + 16a_\nu(f_m)_\nu(1 - \frac{z}{z_i})^{\alpha_1/2}X']^2} \quad (5.8)$$

onde  $(f_m)_\nu = (f_m)_{n,\nu}(1 + 3.7(z/\Lambda))$  é a frequência do pico espectral,  $(f_m)_{n,\nu} = 0.33$  é frequência do pico espectral na estratificação neutra e  $\Lambda = L(1 - z/z_i)^{(1.5\alpha_1 - \alpha_2)}$  ( $\alpha_1 = \frac{3}{2}$ ;  $\alpha_2 = 1$ ) o comprimento de Monin-Obukhov local.  $a_\nu = (2.7C_\nu)^{\frac{1}{2}}/(f_m)_{n,\nu}^{\frac{1}{3}}$ , onde  $C_\nu = 0.4$ ,  $u_*$  é a velocidade de fricção e  $X' = xu_*/\bar{u}z_i$  é a distância adimensional.

## 5.4 Resultados

Apresentam-se, nesta seção, resultados da simulação dos experimentos OLAD 5 e OLAD 12 com o modelo proposto no capítulo 4. Além das coordenadas das bolsas de amostragem responsáveis pela coleta das concentrações, apresentadas nas Tabelas 5.1 e 5.2, [Biltoft and Carter, 1999] disponibiliza informações relevantes sobre a emissão realizada pelo sistema acoplado a um caminhão, tais como, as coordenadas do ponto de partida e de chegada e a quantidade emitada de  $SF_6$ . Os parâmetros meteorológicos utilizados como dados de entrada foram calculados em [Degrazia, 2005] a partir dos dados fornecidos em [Biltoft and Carter, 1999].

### 5.4.1 OLAD 5

O experimento de OLAD 5, realizado no dia 12/09/97, dia Juliano 255, teve uma taxa de emissão estimada, conforme visto na seção 5.2, de  $q = 2,19$  ( $g/s$ ). Na Tabela 5.3 estão os dados do início e do fim da emissão.

Tabela 5.3: Dados de emissão - OLAD 5.

OLAD 5	Horário ( $hh : mm$ )	Latitude ( $^{\circ}N$ )	Longitude ( $^{\circ}W$ )
Início	06:58	40,092	113,046
Fim	07:08	40,042	113,119

O conjunto de dados micrometeorológicos utilizados para a essa simulação estão presentes Tabela 5.4. Estes parâmetros são apresentados com uma variação temporal a cada 15 minutos. É importante observar, que nesta primeira hora do experimento a camada limite planetária encontra-se estável, o que justifica a utilização das parametrizações apresentadas na seção 5.3.

Tabela 5.4: Parâmetros de escala turbulenta - OLAD 5.

Olad 5	$u(10m)$ ( $ms^{-1}$ )	$u_*$ ( $ms^{-1}$ )	$L$ ( $m$ )	$z_i$ ( $m$ )
6:45 - 7:00	1,71	0,10	43,48	171,60
7:00 - 7:15	1,95	0,12	64,81	223,80
7:15 - 7:30	1,82	0,11	127,27	303,03
7:30 - 7:45	1,90	0,11	221,12	407,32

De acordo com o modelo proposto no capítulo 4, utiliza-se a ideia do método da decomposição, onde a concentração de cada uma das 10 fontes é determinada através da série, cujos termos são calculados com o conjunto recursivo de equações (4.22). A Tabela 5.5 apresenta os resultados obtidos da concentração média, no período de 7h30min-7h45min, de cada uma das fontes pontuais para o amostrador LC115. Nessa simulação, utilizou-se 6 termos dessa série.

Tabela 5.5: Resultados da série (4.21) truncada em  $L_d$  termos para cada fonte - LC115.

Fontes \ $L_d$	0	1	2	3	4	5
1	421,40	410,88	409,65	408,65	408,24	408,24
2	748,58	729,81	727,60	725,82	725,07	725,07
3	1.983,06	1.933,43	1.927,60	1.922,89	1.920,93	1.920,93
4	3.070,09	2.994,27	2.985,38	2.978,21	2.975,23	2.975,23
5	1.278,97	1.246,36	1.242,52	1.239,40	1.238,10	1.238,10
6	915,65	892,09	889,30	887,05	886,10	886,10
7	756,37	736,76	734,44	732,56	731,77	731,77
8	665,32	647,94	645,88	644,20	643,50	643,50
9	605,46	589,52	587,63	586,08	585,44	585,44
10	562,46	547,54	545,76	544,31	543,70	543,70

Além disso, a concentração referente ao amostrador é obtida através da soma das concentrações de cada uma dessas fontes, como descrito na equação (5.1). Sendo assim, para o amostrador LC115, o resultado final está exposto na Tabela 5.6.

Tabela 5.6: Resultados da série (4.21) truncada em  $L_d$  termos - OLAD5/LC115.

$L_d$	Concentração
0	11007,36
1	10728,59
2	10695,75
3	10669,16
4	10658,07
5	10658,07

Para representar a contribuição de cada uma das fontes utilizadas na simulação, apresenta-se o gráfico da Figura 5.4. As concentrações graficadas são referentes a série truncada com 6 termos. Nele, é possível observar o comportamento do traçador ao decorrer da linha de emissão. Como esperado, os valores de concentração intensificam-se no momento em que as fontes estão dispostas mais próximas do ponto de coleta.



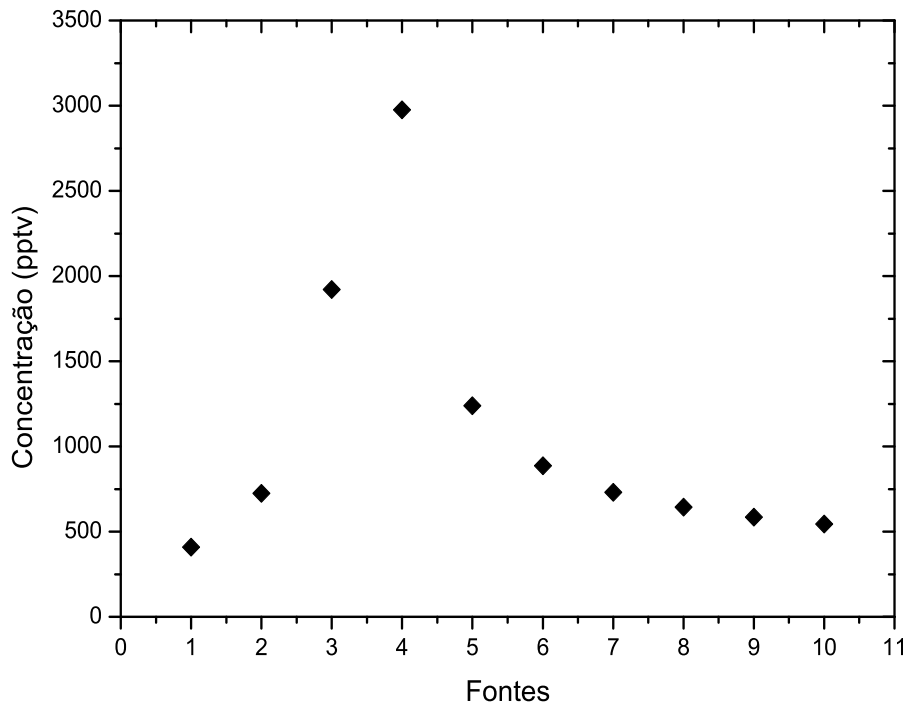


Figura 5.4: Concentrações das 10 fontes OLAD5/LC115.

Considerando a disposição das fontes, representada na Figura 5.2, observa-se que a primeira fonte está localizada à direita dos amostradores, enquanto a fonte 10 está à esquerda. Verifica-se, também, que os amostradores encontram-se, aproximadamente, entre as fontes 3 e 6. Os demais pontos de coleta seguem esse mesmo comportamento (Figura 5.5).

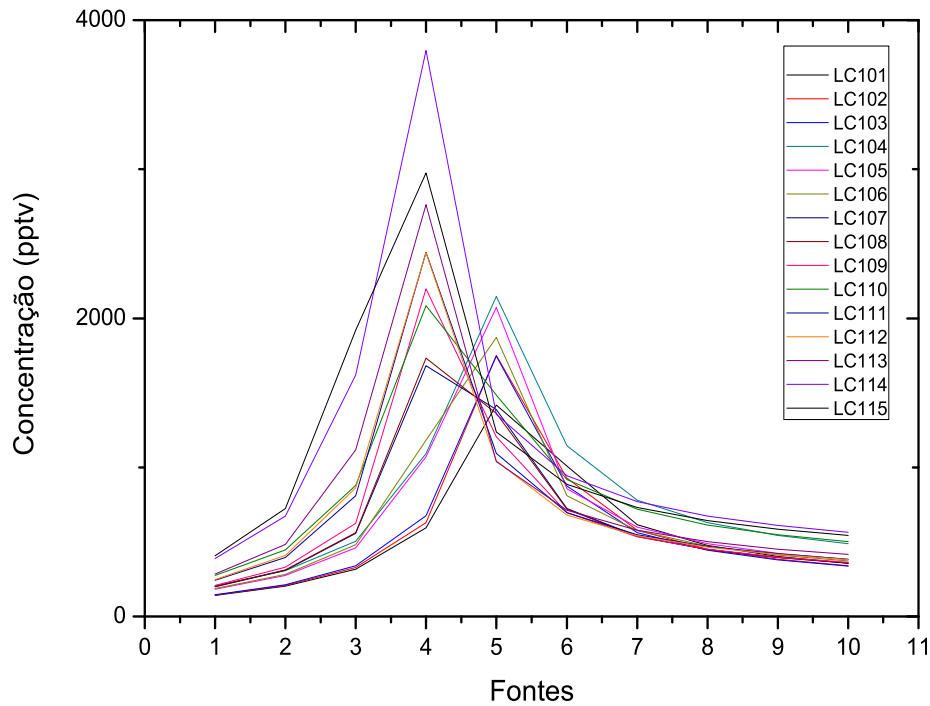


Figura 5.5: Concentrações dos amostradores da rodovia Foxtrot.

Os resultados da simulação para os 15 analisadores da primeira linha de amostragem estão presentes na Tabela 5.7. Com eles, observa-se que as concentrações obtidas com o modelo apresentado vão de acordo com as concentrações detectadas no experimento. Entretanto, para os amostradores LC101, LC102 e LC103 verifica-se uma clara discordância entre os valores observados e os valores preditos. Este fato não invalida o modelo, pois nitidamente os valores observados fogem do padrão apresentado pelos demais amostradores. Os desacordos em alguns amostradores podem ser atribuídos a comportamentos atípicos de condições meteorológicas limitadas ao intervalo de emissão e de medição. Além disso, essa discrepância pode ser relacionada ao fato do fenômeno ser estocástico e o modelo utilizado ser determinístico. Logo, o modelo reproduz apenas valores médios de concentração, enquanto que a medida observada é apenas uma amostra de uma distribuição desconhecida. Não pode-se descartar, também, um mau funcionamento dos instrumentos de medição do experimento.

Tabela 5.7: Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Foxtrot - OLAD 5.

Amostrador	CO (pptv)	CP (pptv)
LC101	470,1	5533,69
LC102	5,24	5744,58
LC103	76,04	5719,13
LC104	7951,42	7841,28
LC105	6433,66	6809,26
LC106	5697,37	6648,48
LC107	5930,83	6603,05
LC108	5974,47	6631,44
LC109	7565,40	7010,36
LC110	8498,44	8473,20
LC111	7878,68	7505,47
LC112	7329,51	7487,19
LC113	8294,43	8345,55
LC114	10190,91	11396,06
LC115	9198,10	10658,07

Cabe lembrar, que a liberação do traçador segue no sentido da ordem decrescente (de LC115 a LC101) dos amostradores, como mostra a representação da Figura 5.2. Com isso, nota-se um valor de concentração mais elevado nos primeiros pontos de coleta. Esse comportamento da pluma pode ser observado no gráfico da Figura 5.6, o qual apresenta a comparação entre as concentrações observadas (CO) e as concentrações previstas (CP) de cada um dos 15 amostradores. No eixo horizontal do gráfico, tem-se 1 para LC101, 2 para LC102 e assim sucessivamente.

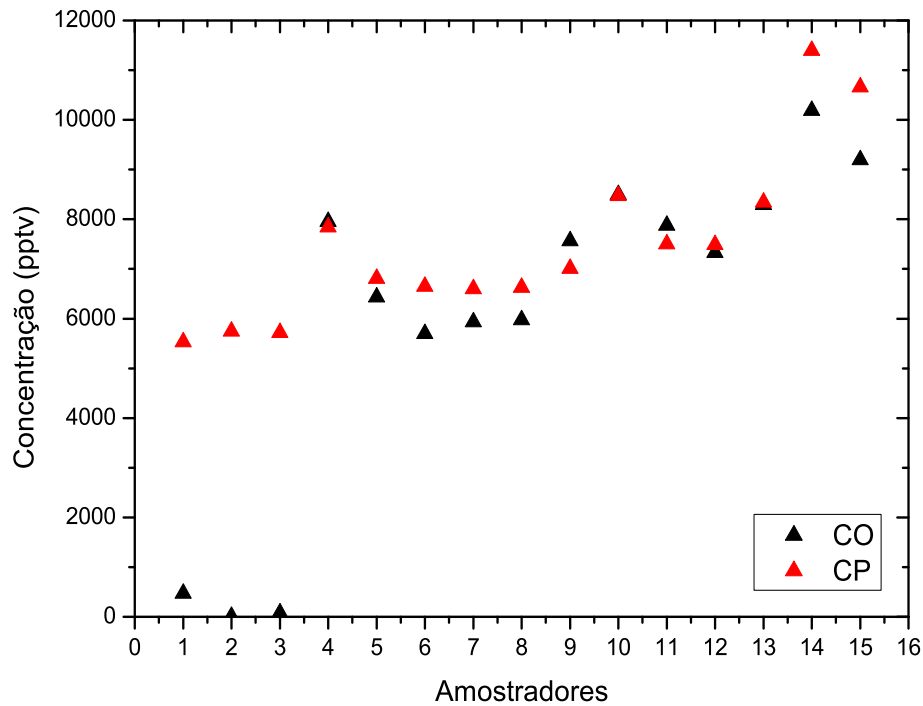


Figura 5.6: Concentrações OLAD 5 - Rodovia Foxtrot

Os resultados da simulação para a segunda linha de amostragem (rodovia Juliet) encontram-se na Tabela 5.8 e plotados no gráfico da Figura 5.7. Eles são referentes ao mesmo período utilizado na simulação da primeira linha.

A distância da rodovia Juliet à rodovia Bravo (linha de emissão) é de 5 km. Com isso, notam-se níveis de concentração mais baixos em comparação aos níveis de concentração da rodovia Foxtrot. Além disso, percebe-se que a pluma já apresenta uma distribuição mais equilibrada entre os amostradores nessa linha de coleta.

Com a análise dos resultados da Tabela 5.8, é possível verificar que as concentrações obtidas com modelo proposto neste trabalho concordam com o comportamento de dispersão da pluma. Mais uma vez, enfatiza-se que casos isolados de discordância entre as concentrações obtidas e as concentrações previstas não inviabilizam o modelo.

Tabela 5.8: Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Juliet - OLAD 5.

Amostrador	CO (pptv)	CP (pptv)
LC201	4695,90	1691,01
LC202	1569,08	1353,93
LC203	1411,76	1438,76
LC204	1570,88	1640,34
LC205	1629,87	1500,09
LC206	1832,38	1692,55
LC207	2299,55	1941,71
LC208	2316,71	2084,54
LC209	1718,11	1908,63
LC210	1761,93	1749,98
LC211	1983,98	1880,28
LC212	3650,52	1764,46
LC213	942,12	1567,15
LC214	909,32	1194,36
LC215	768,19	1186,90

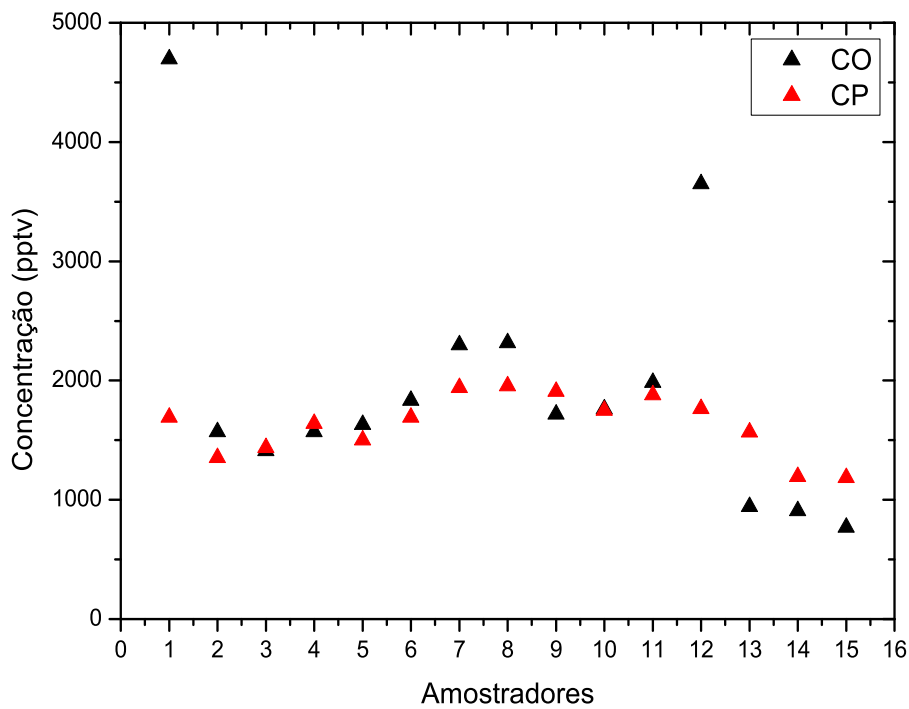


Figura 5.7: Concentrações OLAD 5 - Rodovia Juliet

### 5.4.2 OLAD 12

Com a finalidade de comprovar a eficácia do modelo, utilizou-se o experimento do dia 25/09/97, dia Juliano 268 para uma nova simulação. OLAD 12 teve uma taxa de emissão estimada de  $q = 3,24$  ( $g/s$ ), conforme a seção 5.2. As coordenadas da localização de partida e chegada do caminhão são as mesmas do OLAD 5. Porém, o horário da emissão iniciou às 4h, com uma interrupção às 4h06min devido a uma falha no sistema disseminador. Às 4h11min a emissão foi retomada e às 4h19min foi finalizada. A Tabela 5.9 apresenta os dados de entrada do modelo para a primeira hora.

Tabela 5.9: Parâmetros de escala turbulenta - OLAD 12.

Olad 5	$u(10m)$ ( $ms^{-1}$ )	$u_*$ ( $ms^{-1}$ )	$L$ ( $m$ )	$z_i$ ( $m$ )
4:00 - 4:15	3,30	0,19	195,73	38,90
4:15 - 4:30	2,91	0,15	142,35	25,44
4:30 - 4:45	2,80	0,14	126,32	21,70
4:45 - 5:00	2,51	0,10	72,73	10,39

As concentrações obtidas com o modelo são referentes ao período de 4h45min às 5h, o qual a camada limite planetária encontra-se em condição estável. Essa escolha dá-se pela qualidade dos dados fornecidos em [Biltoft and Carter, 1999] para esse intervalo de tempo.

Para simular OLAD 12 foram utilizados 5 termos da série (4.21). Assim na Tabela 5.10 encontram-se os valores de concentração obtidos para o amostrador LC115. Enfatiza-se que esses valores são dados pelo somatório da contribuição de cada uma das 10 fontes utilizadas no modelo.

Tabela 5.10: Resultados da série (4.21) truncada em  $L_d$  termos - OLAD12/LC115.

$L_d$	Concentração
0	8002,35
1	7931,26
2	7888,53
3	7874,63
4	7874,63

Como esperado, os valores obtidos descrevem o comportamento da dispersão do traçador com uma satisfatória efetividade, isso pode ser conferido na Tabela 5.11, a qual apresenta as concentrações da primeira linha de coleta (rodovia Foxtrot).

Tabela 5.11: Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Foxtrot - OLAD 12.

Amostrador	CO (pptv)	CP (pptv)
LC101	4366,00	5797,76
LC102	6197,21	6826,42
LC103	5321,99	5744,67
LC104	5847,05	6204,83
LC105	5815,15	5944,93
LC106	5747,84	5200,64
LC107	5259,64	5450,39
LC108	5447,81	6030,38
LC109	5975,37	6162,72
LC110	6001,43	6745,80
LC111	6070,38	6703,39
LC112	6552,55	6693,21
LC113	6811,21	7094,69
LC114	8692,07	7946,57
LC115	9180,40	7874,63

Para uma melhor análise, esses dados são dispostos no gráfico da Figura 5.8, o qual destaca a comparação entre as concentrações (CO e CP) para cada uma das 15 bolsas de amostragem, além do comportamento da pluma. Novamente, ressalta-se a orientação da disseminação do traçador (ver Figura 5.2).

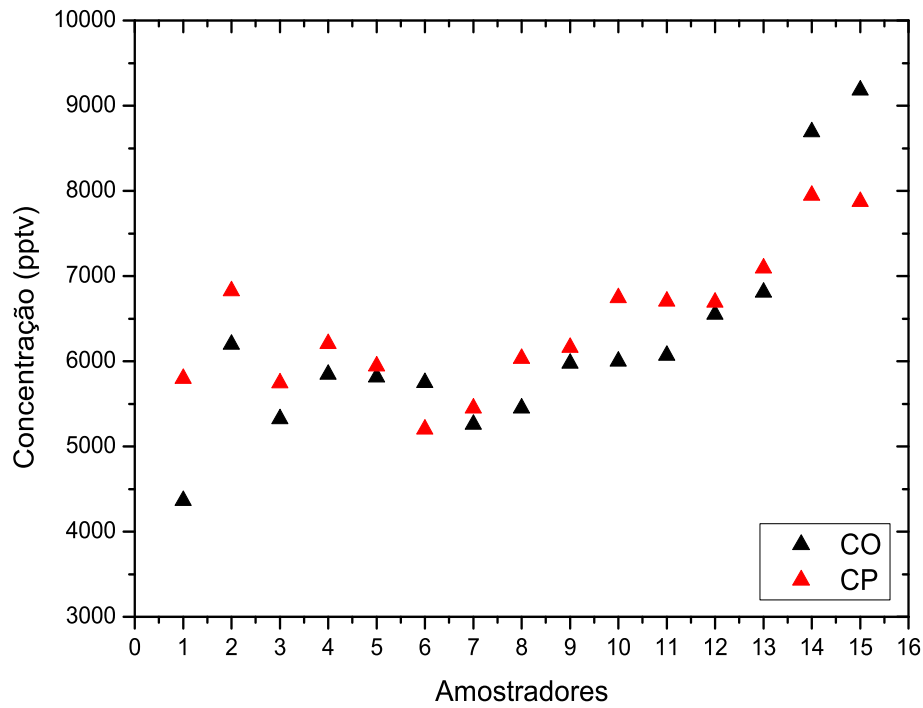


Figura 5.8: Concentrações OLAD 12 - Rodovia Foxtrot

Por fim, encontram-se, na Tabela 5.12 e no gráfico da Figura 5.9, os resultados de concentração obtidos referentes à segunda linha de amostragem (rodovia Juliet). Salienta-se que a concentração observada no amostrador LC201 foi definida em [Biltoft and Carter, 1999] como dado falho. Excetuando-se casos específicos, tem-se uma visível concordância nos valores de concentração. Com isso, confirma-se a coerência e a viabilidade do modelo apresentado neste trabalho.



Tabela 5.12: Concentrações Observadas (CO) e Concentrações Preditas (CP) dos amostradores da rodovia Juliet - OLAD 12.

Amostrador	CO (pptv)	CP (pptv)
LC201	218,24*	1076,04
LC202	844,38	926,77
LC203	1089,55	1033,18
LC204	1086,50	1238,96
LC205	1127,51	1182,43
LC206	2675,80	1433,14
LC207	1381,46	1270,37
LC208	1280,70	1190,93
LC209	1242,95	1189,69
LC210	1082,44	1270,12
LC211	1129,20	1188,12
LC212	1229,52	1371,62
LC213	1212,45	1435,69
LC214	1347,29	1263,93
LC215	1399,94	1425,32

\* Dados definidos como falhos

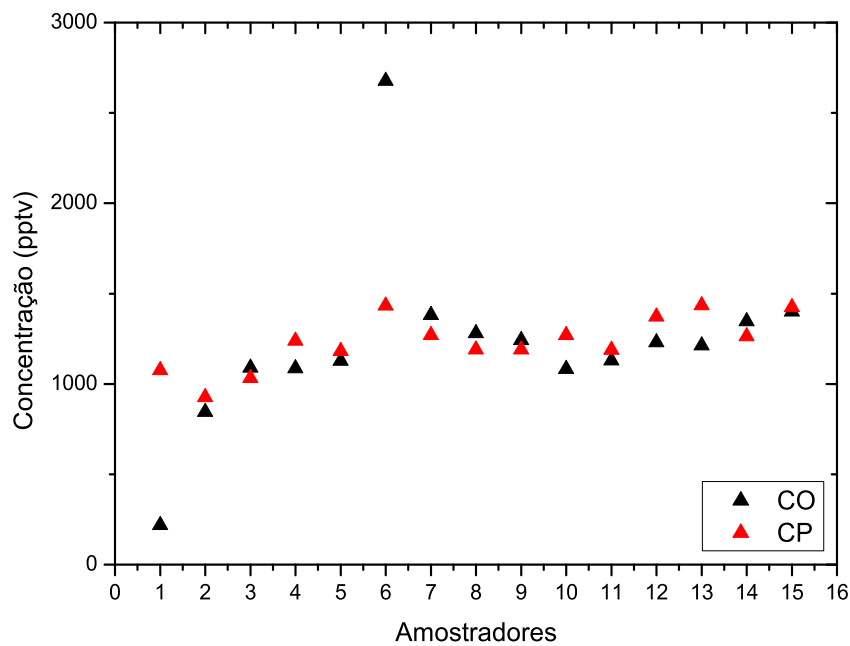


Figura 5.9: Concentrações OLAD 12 - Rodovia Juliet

## 5.5 Avaliação Estatística dos Resultados

Com a intenção de verificar o desempenho e a capacidade do modelo proposto em representar o fenômeno estudado, analisam-se os resultados obtidos através dos índices estatísticos definidos por

- Erro quadrático médio normalizado:  $NMSE = \frac{\overline{(CO-CP)^2}}{\overline{COCP}}$
- Coeficiente de correlação:  $COR = \frac{\overline{(CO-\overline{CO})(CP-\overline{CP})}}{\sigma_o\sigma_p}$
- Desvio fracional padrão:  $FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0.5(\sigma_o + \sigma_p)}$

onde CO e CP denotam concentração observada e concentração predita, respectivamente, os subíndices  $o$  e  $p$  representam, respectivamente, os dados observados e os preditos e  $\sigma$  é o desvio padrão. Utiliza-se um programa desenvolvido por [Hanna, 1989] para calculá-los. Por se tratar de um modelo determinístico que representa um fenômeno estocástico, consideram-se aceitáveis valores de  $NMSE > 0$ ,  $COR < 1$  e  $FS > 0$ .

Mesmo com um baixo número de amostras para a análise estatística, é possível verificar um bom desempenho do modelo. Pois, os valores presentes na tabela 5.13 indicam um erro baixo nas comparações e uma boa correlação nos casos de OLAD5/Foxtrot e OLAD12/Foxtrot. No entanto, o coeficiente de correlação baixo para os casos de OLAD5/Juliet e OLAD12/Juliet são ocasionados pelas discordâncias em valores específicos de concentração, o que é aceitável por se tratar da comparação de dados de um modelo determinístico com dados de um fenômeno estocástico. Esses casos podem ser verificados nos gráficos de espalhamento apresentados a seguir (Figuras 5.10, 5.11, 5.12 e 5.13).

Tabela 5.13: Índices Estatísticos.

Experimento	NMSE	COR	FS
OLAD 5/Foxtrot	0.14	0.80	0.64
OLAD 5/Juliet	0.28	0.48	1.18
OLAD 12/Foxtrot	0.01	0.88	0.43
OLAD 12/Juliet	0.11	0.62	1.08

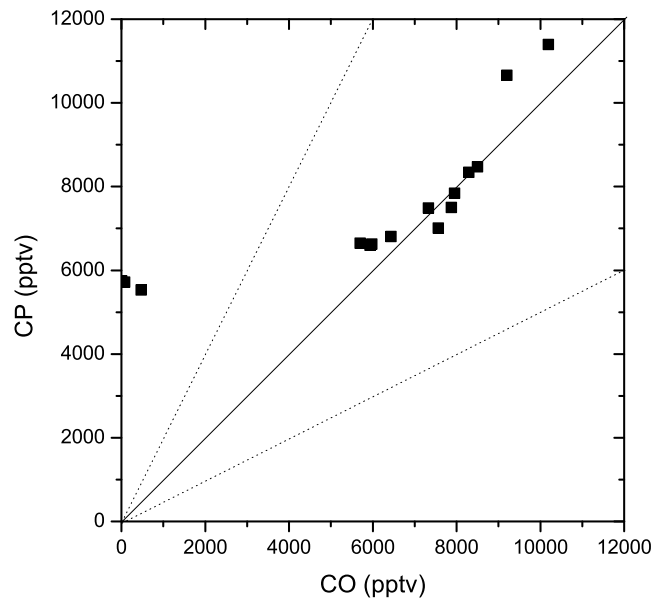


Figura 5.10: Gráfico de espalhamento das concentrações. Foxtrot/OLAD5.

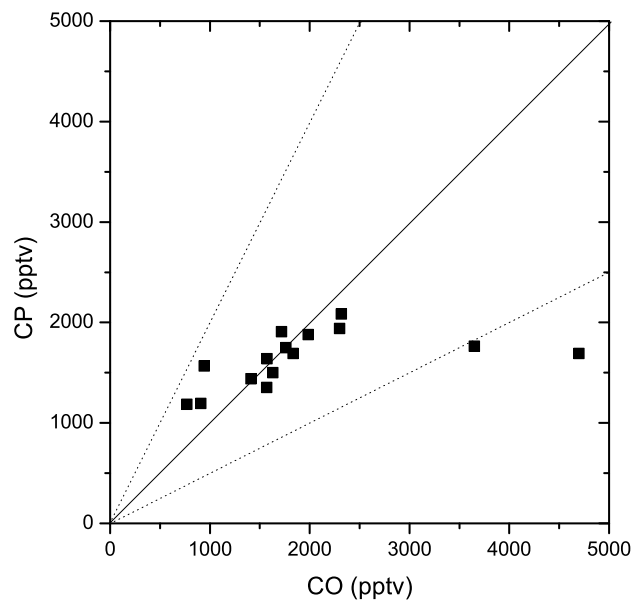


Figura 5.11: Gráfico de espalhamento das concentrações. Juliet/OLAD5.

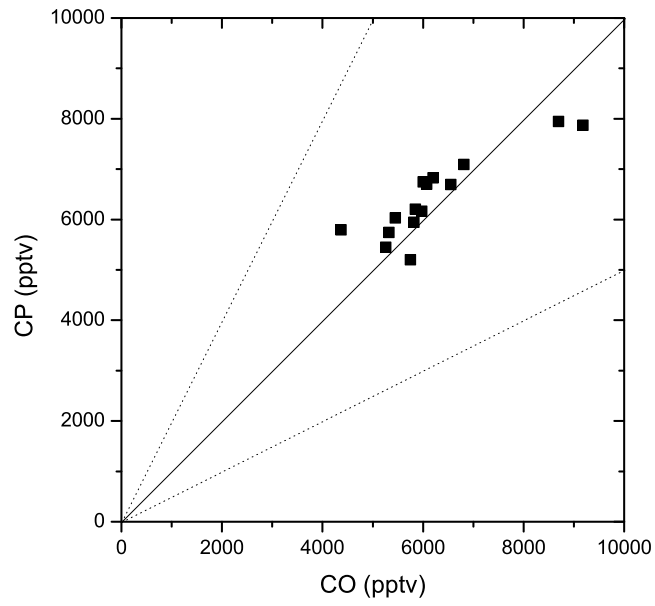


Figura 5.12: Gráfico de espalhamento das concentrações. Foxtrot/OLAD12.

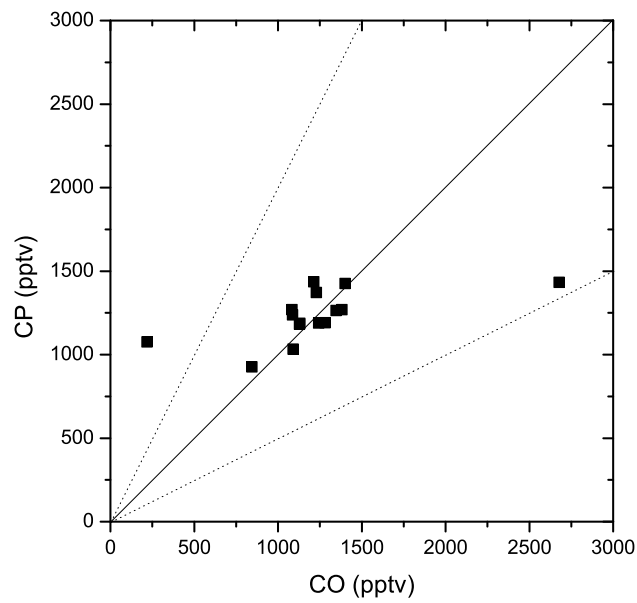


Figura 5.13: Gráfico de espalhamento das concentrações. Juliet/OLAD12.

## 6 CONCLUSÕES

Através da revisão bibliográfica apresentada no capítulo 2, observa-se uma evolução na capacidade dos modelos matemáticos em simular o problema de dispersão de poluentes na atmosfera. Seguindo essa tendência, esta tese apresentou um progresso em relação aos trabalhos já realizados no momento em que considera a variação temporal no perfil do vento e nos coeficientes de difusão. O primeiro é responsável pelo transporte advectivo, enquanto o último refere-se ao transporte turbulento. Em seguida, implementou-se o modelo proposto com o conjunto de dados de dois dias do experimento de OLAD, descrito no capítulo 4. Nesse experimento, realizou-se a emissão do traçador através de um sistema acoplado a um caminhão que se deslocou durante um determinado tempo e por uma distância definida. Portanto, tornou-se necessário representar essa fonte móvel através de fontes pontuais considerando a defasagem no tempo de uma fonte a outra. Assim, enfatiza-se essa consideração como outro fator importante deste trabalho, visto que a maioria dos trabalhos presentes na literatura utilizam fontes fixas, mas muitas emissões de poluentes são realizadas através de fontes em movimento.

O modelo proposto utiliza a equação de advecção difusão para descrever o fenômeno de dispersão. Sendo assim, recorreu-se ao uso de dois procedimentos bem desenvolvidos para resolvê-la analiticamente: a ideia do método da decomposição e a técnica GILTT.

A ideia do método da decomposição apresenta-se como uma boa ferramenta para solução do problema, uma vez que, com a hipótese da dependência temporal nos parâmetros mencionados, esse método gera um conjunto recursivo de equações de advecção difusão, as quais possuem soluções conhecidas através do método da GILTT. Além disso, o sistema recursivo corrige o valor de concentração através da soma dos termos da série 4.21. Com isso, obtêm-se resultados mais precisos.

A representação utilizada para descrever a fonte móvel mostra-se viável e útil, considerando a vantagem em resolver a equação de advecção difusão com uma fonte pontual em relação a uma fonte em linha. Existem outras formas de representar a mobilidade desta fonte, porém, a escolha dessa discretização em fonte pontuais justifica-se pela praticidade computacional. Além disso, com os resultados obtidos, percebe-se que essa proposta con-

segue simular de forma eficaz o comportamento da pluma de poluentes, tendo em vista os resultados do modelo.

Como mencionado no capítulo 5, foi apresentado um modelo determinístico para descrever um fenômeno estocástico. Isso pode justificar a discordância em alguns amostradores. Porém, outros fatores podem estar relacionados, tais como: comportamentos atípicos de condições meteorológicas ou até mesmo problemas nos aparelhos de medição. No entanto, esses casos esporádicos não inviabilizam o modelo. Sendo assim, pode-se concluir que os objetivos desta tese foram alcançados.

Para trabalhos futuros, pretende-se dar continuidade a pesquisa e explorar mais o modelo apresentado. Sendo assim, projeta-se realizar novas simulações com outros experimentos e em diferentes condições atmosféricas, além de, compará-lo com outros modelos. Outra proposta de sequência deste trabalho é descrever o problema de fonte móvel utilizando a transformação de coordenadas entre dois sistemas em movimento relativo ou utilizando função de convolução.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Adomian, G. A New Approach to Nonlinear Partial Differential Equations, **J. Math Anal. Appl.**, vol. 102(420-434), 1984.

Adomian, G. Review of the Decomposition Method in Applied Mathematics, **J. Math Anal. Appl.**, vol. 135(501-544), 1988.

Adomian, G. **Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method**, 1994.

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

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

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

Biltoft, C. A., T. S. D. W. T. B. C. G. H. and Carter, R. G., 1999, Over-Land Atmospheric Dispersion (OLAD) Test Summary and Analysis. Customer report, U.S. Army Dugway Proving Ground, USA.

Buligon, L., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T. 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, 2006.

Buske, D., 2008. “**Solução GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana: Simulação da Dispersão de Poluentes na Atmosfera**”, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande Do Sul, UFRGS.

Buske, D., Quadros, R., Vilhena, M., and Moreira, D. Simulação analítica da dispersão analítica de poluentes atmosféricos tridimensional, **Revista Ciência e Natura**, pages 29–32, 2009a.

Buske, D., Vilhena, M., and Moreira, D. A 3D analytical solution of the advection-diffusion equation applied to pollutant dispersion in atmosphere, **Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 2009b.

Buske, D., Vilhena, M. T., Bodmann, B., and Tirabassi, T., 2012a, “**Analytical Model for Air Pollution in the Atmospheric Boundary Layer**”, volume 1, pages 39–58. Air Pollution - Book 1, Organized by: M. Khare.

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

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

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

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2010, “**An Analytical Solution for the Transient Two-dimensional Advective-Diffusion Equation with Non-Fickian Closure in Cartesian Geometry by the General Integral Transform Technique**”, volume 2, pages 33–40. *Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications*, Organized by: C. Constanda; M. E. Pèrez, Birkhauser, Boston.

Buske, D., Vilhena, M. T., Segatto, C. F., and Quadros, R. S., 2011a, “**A General Analytical Solution of the Advection-Diffusion Equation for Fickian Closure**”, volume 1, pages 25–34. *Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications*, Organized by: C. Constanda; P. Harris, Birkhauser, Boston.

Buske, D., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., and Bodmann, B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution, **Journal of Environmental Protection**, vol. 4, pp. 1–10, 2012b.

Buske, D., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Quadros, R., and Segatto, C. F. Modelo analítico tridimensional de dispersão de poluentes na camada limite atmosférica, **Revista Ciência e Natura**, vol. 1, pp. 115–118, 2011b.

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

Chang, J.C., C. K. and Hanna, S. R. Evaluation of CALPUFF, HPAC and VL-STRACK with the Over-Land Alongwind Dispersion (OLAD) Field Data, **Development and Application of Computer Techniques to Environmental Studie**, 2002.

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

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



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

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

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

Costa, C. P., Tirabassi, T., and Vilhena, M. T., 2010, “**A Closed-Form Formulation for Pollutant Dispersion in the Atmosphere**”, volume 2, pages 141–150. *Integral Methods in Science and Engineering: Computational Methods*, Organized by: C. Constanda; M. E. Pèrez, Birkhauser, Boston.

Costa, C. P., Tirabassi, T., Vilhena, M. T., and Moreira, D. M. A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere, **Journal of Engineering Mathematics**, vol. 74, pp. 159–173, 2012.

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

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

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

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

Degrazia, F., 2005. “**Evolução da camada limite planetária para dispersão de poluentes pelo método da GILTT**”, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS.

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

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

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

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

Erbrink, J., Cenedes, A. and Cossemans, G., Lasserre-Bigorry, A., Weber, H., and Stubi, R. Pre-processing of meteorological data: vertical profile, **International Journal of Environment and Pollution**, vol. 8 (3-6), pp. 464–477, 1997.

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.

Gonçalves, G., Quadros, R., and Buske, D. An Analytical Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer., **Journal of Environmental Protection**, vol. 4(57-64), 2013.

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

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

Koch, W. 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, 1989.

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

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

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

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

Moraes, O. L. L. and Acevedo, O., 2005, “**Fluxos turbulentos na atmosfera**”. Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária, Organizadores: D.M. Moreira, J.C. Carvalho e M.T. Vilhena, Editora da UFRGS, Porto Alegre.

Moreira, D. and Tirabassi, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental, **Ambiente & Sociedade**, vol. 7, 2004.

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

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

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Buske, D., 2009a, “**On the GILTT Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer**”, volume 1, pages 179–202. *Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications*, Organized by: D. Moreira; M. Vilhena, CRC Press, Boca Raton - Flórida.

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

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D., and Tirabassi, T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere, **Atmospheric Research**, vol. 92, pp. 1–17, 2009b.

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

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Buske, D., and Costa, C. P. Comparison between analytical models to simulate pollutant dispersion in the atmosphere, **International Journal of Environment and Waste Management**, vol. 6, pp. 327–344, 2010.

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

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

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. Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável, **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 1995.

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

Nieuwstadt, F. T. M. and Haan, B. J. 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, 1981.

ONUBR, **OMS: Poluição do ar provoca morte de mais de 7 milhões de pessoas por ano**, <https://nacoesunidas.org/oms-poluicao-do-ar-provoca-morte-de-mais-de-7-milhoes-de-pessoas-por-ano/>, 2015. Acessado em: 18/07/2016.

Ozisik, M. N. **Heat Conduction**. John Wiley & Sons, New York, 1993.

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

Pereira, L., Costa, C., Vilhena, T., and Tirabassi, T. Puff Models for Simulation of Fugitive Hazardous Emissions in Atmosphere, **Journal of Environment Protection**, vol. 1, pp. 154–161, 2011.

Pereira, L. L., 2007. “**Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, resolvendo um problema advectivo - difusivo dependente do tempo com fonte arbitrária**”, Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

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

Pérez Guerrero, J., Pimentel, L., Oliveira-Júnior, J., Heilbron Filho, P., and Ulke, A. A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation, **Atmospheric Environment**, 2012.

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

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

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

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

Schlichting, L. **Boundary-Layer Theory**. McGraw-Hill Book Company, 1979.

Schuch, D., Weymar, G. J., Furtado, I., Quadros, R. S., and Buske, D. Simulação da dispersão de poluentes na camada limite atmosférica incluindo o efeito da deposição seca no solo, **Revista Ciência e Natura**, vol. 1, pp. 127–130, 2011.

Scire, J., D.G., S., and Yamartino, R. A user’s guide for the CALPUFF dispersion Model (Version 5), **Earth Tech. Inc. 196**, 2000.

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

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

Sertori, M., 2001. “**Un modello matematico a Puff non-gaussiani per lo studio della dispersione in atmosfera**”, Tesi di laurea, Universita’ Degli Studi di Urbino, Urbino.

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

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

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

Silva, E., 2012. “**Solução do modelo puff de dispersão de poluentes na camada limite atmosférica pelo método GILTT**”, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Silva, E., T., T., Buske, D., and Vilhena, M. A new puff model applying an exact solution of diffusion equation., **Ciência e Natura**, vol. 1(109-111), 2013a.

Silva, E., T., T., Vilhena, M., and Buske, D. A puff model using a three-dimensional analytical solution for the pollutant diffusion process, **Atmospheric Research**, vol. 134(131-136), 2013b.

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

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

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

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

Stroud, A. and Secrest, D. **Gaussian quadrature formulas**, 1966.

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

Tirabassi, T., Buske, D., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T. A two-dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground, **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, vol. 47, pp. 2096–2104, 2008.

Tirabassi, T., Moreira, D., Vilhena, T., and Costa, C. Comparison between Non-Gaussian Puff Model and a Model Based on a Time-Dependent Solution of Advection-Diffusion Equation, **Journal of Environment Protection**, vol. 1, pp. 172–178, 2010.

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

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

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

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

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

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

Tirabassi, T., Tiesi, A., Buske, D., Vilhena, M. T., and Moreira, D. M. Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection-diffusion equation, **Atmospheric Environment**, vol. 43, pp. 2221–2227, 2009.

Tirabassi, T., Vilhena, M., Buske, D., and Degrazia, G. An Analytical Air Pollution Model with Time Dependent Eddy Diffusivity., **Journal of Environmental Protection**, vol. 4(16-23), 2013.

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

Van Ulden, A. P. A surface layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground, **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 681–692, 1992.

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

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

Venkatram, A. Estimating the monin-obukhov length in the stable boundary layer for dispersion calculations., **Boundary Layer Meteorology**, vol. 19(4), pp. 481–485, 1980.

Vilhena, M., Buske, D., Degrazia, G., and Quadros, R. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer., **Physica A**, vol. 4(2576-2584), 2012a.

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

Vilhena, M. T., Buske, D., Degrazia, G. A., and Quadros, R. S. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer, **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, vol. 391, pp. 2576–2584, 2012b.

Vilhena, M. T., Costa, C. P., Moreira, D. M., and Tirabassi, T. A semi-analytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure, **Atmospheric Research**, vol. 1, pp. 63–69, 2008.

Vilhena, M. T. and Wortmann, S., 2005, “**Solução analítica de problemas em física-matemática pela transformada de Laplace**”. Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária, Organizadores: D.M. Moreira, J.C. Carvalho e M.T. Vilhena, Editora da UFRGS, Porto Alegre.

Weymar, G. J., 2012. “**Simulação analítica da dispersão de substâncias radioativas liberadas na atmosfera por usinas nucleares pelo método GILTT**”, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Weymar, G. J., 2016. “**Uma solução da equação multidimensional de advecção-difusão para a simulação da dispersão de contaminantes reativos na camada limite atmosférica**”, Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

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

Wyngaard, J. C., 1983, “**Lectures on the Planetary Boundary Layer**”. Mesoscale Meteorology-Theories, Observations and Models, Springer.

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

## APÊNDICE A - Resultados do conjunto recursivo

Os resultados presentes, neste apêndice, são referentes à série (4.21), truncada em  $L_d$  termos, do conjunto recursivo definido no capítulo 5. Portanto, as tabelas abaixo apresentam os valores para cada um dos pontos de coleta dos experimentos OLAD 5 e OLAD 12. Cabe enfatizar que a rodovia Foxtrot corresponde à primeira linha de amostragem e a rodovia Juliet corresponde a segunda linha.

Tabela A : OLAD5/ Rodovia Foxtrot

$L_d$	LC101	LC102	LC103	LC104	LC105
0	5682,74	5911,18	5856,12	8103,80	7043,42
1	5591,76	5839,79	5758,87	7930,78	6932,86
2	5551,09	5776,79	5730,31	7851,34	6857,06
3	5533,69	5748,14	5719,13	7841,28	6825,37
4	5533,69	5744,58	5719,13	7841,28	6809,26
5	5533,69	5744,58	5719,13	7841,28	6809,26
$L_d$	LC106	LC107	LC108	LC109	LC110
0	6770,13	6983,54	6861,56	7250,27	8626,31
1	6695,57	6724,16	6752,98	7136,96	8540,72
2	6664,37	6649,94	6678,49	7059,29	8492,97
3	6648,48	6618,88	6638,91	7026,85	8473,20
4	6648,48	6603,05	6631,44	7010,36	8473,20
5	6648,48	6603,05	6631,44	7010,36	8473,20
$L_d$	LC111	LC112	LC113	LC114	LC115
0	7865,42	7853,37	8621,37	11589,90	11007,36
1	7621,91	7665,46	8416,89	11470,40	10728,59
2	7569,98	7558,47	8356,84	11420,94	10695,75
3	7521,18	7509,75	8345,55	11396,10	10669,16
4	7505,47	7487,19	8345,55	11396,10	10658,07
5	7505,47	7487,19	8345,55	11396,10	10658,07



Tabela A : OLAD5/ Rodovia Juliet

$L_d$	LC201	LC202	LC203	LC204	LC205
0	1793,75	1483,46	1576,13	1765,29	1555,40
1	1723,91	1404,62	1492,52	1688,71	1529,44
2	1703,84	1364,46	1449,92	1649,94	1508,78
3	1691,01	1353,93	1438,76	1640,34	1500,09
4	1691,01	1353,93	1438,76	1640,34	1500,09
$L_d$	LC206	LC207	LC208	LC209	LC210
0	1755,52	2013,71	2212,01	2025,57	1843,08
1	1705,61	1956,63	2125,39	1946,12	1757,38
2	1694,65	1944,11	2089,95	1916,52	1749,98
3	1692,55	1941,71	2084,54	1908,63	1749,98
4	1692,55	1941,71	2084,54	1908,63	1749,98
$L_d$	LC211	LC212	LC213	LC214	LC215
0	1949,84	1829,83	1625,39	1325,79	1298,45
1	1885,18	1766,64	1573,66	1229,01	1210,03
2	1880,28	1764,46	1567,15	1197,43	1193,74
3	1880,28	1764,46	1567,15	1194,36	1186,90
4	1880,28	1764,46	1567,15	1194,36	1186,90

Tabela A : OLAD12/ Rodovia Foxtrot

$L_d$	LC101	LC102	LC103	LC104	LC105
0	5855,32	6936,86	5821,05	6281,51	6018,47
1	5818,94	6865,41	5775,10	6240,36	5957,61
2	5803,36	6834,38	5746,47	6212,58	5947,11
3	5797,76	6826,42	5744,67	6204,83	5944,93
4	5797,76	6826,42	5744,67	6204,83	5944,93
$L_d$	LC106	LC107	LC108	LC109	LC110
0	5276,19	5517,93	6093,18	6239,01	6855,07
1	5228,62	5477,01	6056,13	6201,15	6794,28
2	5207,90	5452,69	6036,54	6168,79	6760,77
3	5200,64	5450,39	6030,38	6162,72	6745,80
4	5200,64	5450,39	6030,38	6162,72	6745,80
$L_d$	LC111	LC112	LC113	LC114	LC115
0	6811,97	6801,63	7168,81	8045,00	8002,35
1	6751,56	6741,31	7126,39	7992,15	7931,26
2	6718,26	6708,06	7101,71	7956,53	7888,53
3	6703,39	6693,21	7094,69	7946,57	7874,63
4	6703,39	6693,21	7094,69	7946,57	7874,63

Tabela A : OLAD12/ Rodovia Juliet

$L_d$	LC201	LC202	LC203	LC204	LC205
0	1138,93	1007,46	1104,02	1313,98	1259,92
1	1101,09	967,03	1058,66	1268,15	1219,24
2	1078,39	931,75	1038,58	1240,59	1189,86
3	1076,04	926,77	1033,18	1238,96	1182,43
4	1076,04	926,77	1033,18	1238,96	1182,43
$L_d$	LC206	LC207	LC208	LC209	LC210
0	1514,78	1335,58	1241,25	1268,81	1361,78
1	1473,28	1295,19	1206,04	1227,76	1298,97
2	1439,71	1276,79	1193,10	1192,39	1272,39
3	1433,14	1270,37	1190,93	1189,69	1270,12
4	1433,14	1270,37	1190,93	1189,69	1270,12
$L_d$	LC211	LC212	LC213	LC214	LC215
0	1277,81	1438,86	1528,75	1348,95	1516,67
1	1223,33	1397,63	1457,77	1296,70	1463,31
2	1192,63	1372,48	1441,86	1264,51	1427,10
3	1188,12	1371,62	1435,69	1263,93	1425,32
4	1188,12	1371,62	1435,69	1263,93	1425,32

## APÊNDICE B - Demonstrações

Para calcular o valor de  $N_n$  definido no capítulo 4, considera-se que  $\zeta_n(y) = \cos(\lambda_n y)$  e  $\lambda_n y = \frac{n\pi}{L_y}$ . Portanto,

$$N_n = \int_0^{L_y} \zeta_n^2(y) dy = \int_0^{L_y} \cos^2(\lambda_n y) dy = \int_0^{L_y} \cos^2\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy$$

Se  $n = 0$ , tem-se

$$N_n = \int_0^{L_y} \cos^2(0) dy = \int_0^{L_y} 1 dy = L_y$$

Se  $n \neq 0$ , utilizam-se as identidades trigonométricas

$$\begin{aligned} \cos^2(ax) &= \frac{\cos(2ax) + 1}{2} \\ \text{sen}(2ax) &= 2\text{sen}(ax)\cos(ax) \end{aligned} \tag{B.1}$$

Logo, tem-se o valor da integral

$$\int_a^b \cos^2(ax) dx = \int_a^b \frac{\cos(2ax) + 1}{2} dx = \left[ \frac{\text{sen}(2ax)}{4a} + \frac{x}{2} \right]_a^b = \left[ \frac{\text{sen}(ax)\cos(ax)}{2a} + \frac{x}{2} \right]_a^b$$

Portanto,

$$N_n = \int_0^{L_y} \cos^2\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy = \left[ \frac{\text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)L_y}{2n\pi} + \frac{y}{2} \right]_0^{L_y}$$

Aplica-se o Teorema Fundamental do Cálculo para obter

$$\frac{\text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)L_y}{2n\pi} + \frac{y}{2} \Bigg|_0^{L_y} = \left( \frac{\text{sen}\left(\frac{n\pi L_y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{n\pi L_y}{L_y}\right)L_y}{2n\pi} + \frac{L_y}{2} \right) - \left( \frac{\text{sen}\left(\frac{n\pi 0}{L_y}\right)\cos\left(\frac{n\pi 0}{L_y}\right)L_y}{2n\pi} + \frac{0}{2} \right)$$

Logo, define-se

$$N_n = \int_0^{L_y} \zeta_n^2(y) dy = \frac{L_y}{2} \text{ e } N_m = \int_0^{L_y} \zeta_m^2(y) dy = \frac{L_y}{2}$$

### B.1 Matriz Alfa

Para calcular os valores da matriz  $\alpha_{n,m}$  definida por

$$\alpha_{n,m} = \frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy$$

observa-se que

$$\int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \int_0^{L_y} \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) dy$$

e verificam-se os seguintes casos:

Se  $n = m = 0$ , tem-se  $N_n = L_y$ . Logo

$$\frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} = \frac{1}{L_y}$$

$$\alpha_{n,m} = \frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \frac{1}{L_y} L_y = 1$$

Se  $n, m \neq 0$ , tem-se  $N_n = \frac{L_y}{2}$ . Com isso,

$$\frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} = \frac{2}{L_y}$$

$$\alpha_{n,m} = \frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \frac{2}{L_y} \frac{L_y}{2} = I_{n,m}$$

Se  $n \neq m$ , utiliza-se integração por partes para resolver a integral

$$\int_0^{L_y} \cos(ay)\cos(by)dy$$

onde  $a = \frac{n\pi}{L_y}$  e  $b = \frac{m\pi}{L_y}$ . Assim, tem-se

$$\begin{aligned} u = \cos(ay) &\Rightarrow du = -\text{sen}(ay)ady \\ dv = \cos(by)dy &\Rightarrow v = \frac{\text{sen}(by)}{b} \end{aligned}$$

Logo

$$\int_0^{L_y} \cos(ay)\cos(by)dy = \left. \frac{\cos(ay)\text{sen}(by)}{b} \right]_0^{L_y} + \frac{a}{b} \int_0^{L_y} \text{sen}(ay)\text{sen}(by)dy \quad (\text{B.2})$$

Novamente, aplica-se esse método para resolver a integral do lado direito da equação (B.2).

Portanto, tem-se

$$\begin{aligned} u = \text{sen}(ay) &\Rightarrow du = a\cos(ay)dy \\ dv = \text{sen}(by)dy &\Rightarrow v = \frac{-\cos(by)}{b} \end{aligned}$$

e

$$\int_0^{L_y} \cos(ay)\cos(by)dy = \left. \frac{\cos(ay)\text{sen}(by)}{b} \right]_0^{L_y} + \frac{a}{b} \left\{ \left. \frac{-\text{sen}(ay)\cos(by)}{b} \right]_0^{L_y} + \frac{a}{b} \int_0^{L_y} \cos(ay)\cos(by)dy \right\}$$

$$\int_0^{L_y} \cos(ay)\cos(by)dy \left( 1 - \frac{a^2}{b^2} \right) = \left[ \frac{\cos(ay)\text{sen}(by)}{b} - \frac{a}{b^2}(\text{sen}(ay)\cos(by)) \right]_0^{L_y}$$

$$\int_0^{L_y} \cos(ay)\cos(by)dy = \left( \frac{b^2}{b^2 - a^2} \right) \left[ \frac{b\cos(ay)\text{sen}(by) - a\text{sen}(ay)\cos(by)}{b^2} \right]_0^{L_y}$$

Substituindo  $a = \frac{n\pi}{L_y}$  e  $b = \frac{m\pi}{L_y}$ , escreve-se:

$$\int_0^{L_y} \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) dy = \left( \frac{L_y}{\pi(m^2 - n^2)} \right) \left[ m \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) - n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) \right]_0^{L_y}$$

$$\int_0^{L_y} \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) dy = \frac{L_y(m \cos(n\pi) \operatorname{sen}(m\pi) - n \operatorname{sen}(n\pi) \cos(m\pi))}{\pi(m^2 - n^2)}$$

como  $n, m \in \mathbb{N}$ , conclui-se que

$$\int_0^{L_y} \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) dy = 0$$

Logo

$$\alpha_{n,m} = \frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \frac{2}{L_y} 0 = 0$$

Com isso, define-se

$$\alpha_{n,m} = \frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}.$$

## B.2 Matriz Beta

Na equação 4.34, definiu-se

$$\beta_{n,m} = \frac{1}{N_n^{1/2} N_m^{1/2}} \int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy$$

onde

$$\zeta_n(y) = \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \Rightarrow \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} = -\frac{n\pi}{L_y} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)$$

Portanto,

$$\int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy = -\frac{n\pi}{L_y} \int_0^{L_y} \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy \quad (\text{B.3})$$

Assim, analisam-se os seguintes casos:

Se  $n = m$ , resolve-se a integral

$$\int_0^{L_y} \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy$$

por substituição, onde

$$u = \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \Rightarrow du = \frac{n\pi}{L_y} \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy$$

Logo,

$$\int_0^{L_y} \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy = \frac{L_y}{n\pi} \int_0^{L_y} u du = \frac{L_y}{n\pi} \frac{u^2}{2} = \frac{L_y}{n\pi} \frac{\text{sen}^2\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)}{2} \Bigg|_0^{L_y}$$

Com o Teorema Fundamental do Cálculo, obtém-se

$$\int_0^{L_y} \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy = \frac{L_y}{2n\pi} [\text{sen}^2(n\pi) - \text{sen}^2(0)] = \frac{L_y}{2n\pi} [\text{sen}^2(n\pi)]$$

Como  $n \in \mathbb{N}$ , conclui-se que

$$\int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy = \int_0^{L_y} \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy = 0$$

Assim, para  $n = m$

$$\beta_{n,m} = 0$$



Se  $n \neq m$ , calcula-se o valor da integral  $\int_0^{L_y} \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\text{cos}\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)dy$  presente na equação (B.3).

Primeiramente, considera-se  $a = \frac{n\pi}{L_y}$  e  $b = \frac{m\pi}{L_y}$ , assim, tem-se

$$\int_0^{L_y} \text{sen}(ay)\text{cos}(by)dy$$

Resolve-se essa integral pelo método de integração por partes. Sendo assim, considera-se

$$\begin{aligned} u &= \text{sen}(ay) \Rightarrow du = a\text{cos}(ay)dy \\ dv &= \text{cos}(by)dy \Rightarrow v = \frac{\text{sen}(by)}{b} \end{aligned}$$

Logo,

$$\int_0^{L_y} \text{sen}(ay)\text{cos}(by)dy = \left. \frac{\text{sen}(ay)\text{sen}(by)}{b} \right]_0^{L_y} - \frac{a}{b} \int_0^{L_y} \text{sen}(by)\text{cos}(ay)dy$$

Repete-se o método para resolver a integral do lado direito dessa equação. Com isso, define-se

$$\begin{aligned} u &= \text{cos}(ay) \Rightarrow du = -a\text{sen}(ay)dy \\ dv &= \text{sen}(by)dy \Rightarrow v = -\frac{\text{cos}(by)}{b} \end{aligned}$$

Portanto,

$$\int_0^{L_y} \text{sen}(ay)\text{cos}(by)dy = \left. \frac{\text{sen}(ay)\text{sen}(by)}{b} \right]_0^{L_y} + \frac{a}{b} \left\{ \left. \frac{\text{cos}(ay)\text{cos}(by)}{b} \right]_0^{L_y} + \frac{a}{b} \int_0^{L_y} \text{sen}(ay)\text{cos}(by) \right\}$$

$$\int_0^{L_y} \text{sen}(ay)\text{cos}(by)dy = \left( \frac{b^2}{b^2 - a^2} \right) \left[ \frac{b\text{sen}(ay)\text{sen}(by) + a\text{cos}(ay)\text{cos}(by)}{b^2} \right]_0^{L_y} \quad (\text{B.4})$$

Substitui-se  $a = \frac{n\pi}{L_y}$  e  $b = \frac{m\pi}{L_y}$  em (B.4) para obter:

$$\int_0^{L_y} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)dy = \left(\frac{L_y}{\pi(m^2 - n^2)}\right) \left[ m\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\operatorname{sen}\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) + n\cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right) \right]_0^{L_y}$$

Então, aplica-se o Teorema Fundamental do Cálculo para encontrar a solução

$$\begin{aligned} & \int_0^{L_y} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)dy = \\ & = \left(\frac{L_y}{\pi(m^2 - n^2)}\right) [(m\operatorname{sen}(n\pi)\operatorname{sen}(m\pi) + n\cos(n\pi)\cos(m\pi)) - (m\operatorname{sen}(0)\operatorname{sen}(0) + n\cos(0)\cos(0))] \end{aligned}$$

Logo,

$$\int_0^{L_y} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right)\cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right)dy = \left(\frac{L_y n}{\pi(m^2 - n^2)}\right) [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1]$$

Com isso, a solução da integral (B.3) é dada por

$$\int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy = -\frac{n\pi}{L_y} \left(\frac{L_y n}{\pi(m^2 - n^2)}\right) [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1]$$

ou ainda

$$\int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy = \frac{n^2 [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1]}{(n^2 - m^2)}$$

Portanto, para  $n \neq m$ , a matriz  $\beta_{n,m}$  é definida por

$$\beta_{n,m} = \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy = \frac{2n^2 [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1]}{L_y(n^2 - m^2)}$$

Assim, conclui-se que

$$\beta_{n,m} = \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy = \begin{cases} \frac{2n^2}{L_y(n^2 - m^2)} [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1], & m \neq n \\ 0, & m = n \end{cases}$$

### B.3 Integral definida na equação 4.41

Dada a integral

$$\int_0^{z_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \xi_{l_j}(z) dz \quad (\text{B.5})$$

onde  $\xi_{l_j}(z) = \cos(i\pi/z_i)$  e  $\xi_{l_j}(z) = \cos(j\pi/z_i)$ . Utiliza-se o método de integração por partes para resolvê-la. Sendo assim, considera-se:

$$u = \cos\left(\frac{i\pi}{z_i} z\right) \quad \Rightarrow \quad du = -\frac{i\pi}{z_i} \text{sen}\left(\frac{i\pi}{z_i} z\right)$$

$$dv = \frac{d}{dz} \left( k_z \frac{d[\cos(\frac{j\pi}{z_i} z)]}{dz} \right) \quad \Rightarrow \quad v = k_z \frac{d[\cos(\frac{j\pi}{z_i} z)]}{dz} = -\frac{j\pi}{z_i} k_z \text{sen}\left(\frac{j\pi}{z_i} z\right)$$

e através da fórmula  $\int_a^b u dv = uv|_a^b - \int_a^b v du$ , tem-se

$$\begin{aligned} \int_0^{z_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \xi_{l_j}(z) dz &= -\frac{j\pi}{z_i} k_z \text{sen}\left(\frac{j\pi}{z_i} z\right) \cos\left(\frac{i\pi}{z_i} z\right) \Big|_0^{z_i} + \\ &- \int_0^{z_i} -\frac{j\pi}{z_i} k_z \text{sen}\left(\frac{j\pi}{z_i} z\right) \left(-\frac{i\pi}{z_i} \text{sen}\left(\frac{i\pi}{z_i} z\right)\right) dz \end{aligned}$$

Pode-se observar que

$$-\frac{j\pi}{z_i} k_z \text{sen}\left(\frac{j\pi}{z_i} z\right) \cos\left(\frac{i\pi}{z_i} z\right) \Big|_0^{z_i} = 0$$

Portanto, define-se a integral (B.5) como

$$\int_0^{z_i} \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \xi_{l_i}(z)}{\partial z} \right) \xi_{l_j}(z) dz = -\frac{ij\pi^2}{z_i^2} \int_0^{z_i} k_z \text{sen}\left(\frac{j\pi}{z_i} z\right) \left(\text{sen}\left(\frac{i\pi}{z_i} z\right)\right) dz$$