

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

**Solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILTT aplicada
à dispersão de poluentes atmosféricos**

por

Daniela Buske

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2004

**Solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILTT aplicada
à dispersão de poluentes atmosféricos**

por

Daniela Buske

Dissertação 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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

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

Aprovada por:

Prof. Dr. Renato M. Cotta (UFRJ/RJ)

Prof. Dr. Davidson Martins Moreira (ULBRA/RS)

Prof. Dr. Gervázio Annes Degrazia (UFSM/RS)

Prof. Dra. Ivanilda Basso Aseka (UFSM/RS)

Prof. Dr. Paulo Schneider (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Jun Sérgio Ono Fonseca

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 16 de Dezembro de 2004

AGRADECIMENTOS

Agradeço

A Deus que possibilitou que eu estivesse aqui para realizar este trabalho;

A minha família, especialmente aos meus pais, Hilário e Mara, pelo incentivo e apoio, não somente durante a realização desta dissertação, mas no decorrer de toda a minha vida;

Ao meu companheiro Régis pela compreensão e companheirismo;

Aos professores Marco Tullio M. B. de Vilhena e Sérgio Wortmann pelo conhecimento transmitido e pela valiosa orientação prestada;

Ao professor Davidson Moreira pelas sugestões que foram decisivas para a obtenção dos resultados finais deste trabalho;

Ao CNPQ pelo suporte financeiro e ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes;

E a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

Solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILTT aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos

O objetivo deste trabalho é obter uma nova solução analítica para a equação de advecção-difusão. Para tanto, considera-se um problema bidimensional difusivo-advectivo estacionário com coeficiente de difusão turbulenta vertical variável que modela a dispersão de poluentes na atmosfera. São utilizados três coeficientes difusivos válidos na camada limite convectiva e que dependem da altura, da distância da fonte e do perfil de velocidade.

A abordagem utilizada para a resolução do problema é a técnica da Transformada Integral Generalizada, na qual a equação transformada do problema difusivo-advectivo é resolvida pela técnica da Transformada de Laplace com inversão analítica. Nenhuma aproximação é feita durante a derivação da solução, sendo assim, esta é exata exceto pelo erro de truncamento. O modelo é avaliado em condições moderadamente instáveis usando o experimento de Copenhagen. Apresentam-se os resultados numéricos e estatísticos, comparando os resultados obtidos com dados experimentais e com os resultados da literatura. O modelo proposto mostrou-se satisfatório em relação aos dados dos experimentos difusivos considerados.

Autor: Daniela Buske

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

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Dissertação de Mestrado em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2004.

ABSTRACT

Analytical solution of the advection-diffusion equation by the GILTT method applied to atmospheric pollutant dispersion

The objective of this work is to present a new analytical approach for the solution of the advection-diffusion equation. For reach this goal, is considered a two dimensional diffusive-advective problem with variable coefficients modelling the pollutant dispersion in the planetary boundary layer atmosphere. Are used tree diffusive coefficients valid in the convective boundary layer witch depend on height, distance of source and velocity profile.

This goal is reached applying the Generalized Integral Transform Technique, in witch the transformed advection-diffusion equation proposed is solved by the Laplace transform technique with analytical inversion. No approximation is made along the solution derivation, so that is an exact solution except for the round-off error. The present model has been evaluated in moderately unstable conditions using the Copenhagen experiment. The numerical and statistical results are presented and compared with experimental data and with the results of the literature. The proposed model has performed very well with the data from the diffusion experiments considered.

Author: Daniela Buske

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

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Dissertação de Mestrado em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2004.

ÍNDICE

1	Introdução	1
1.1	Revisão Bibliográfica.....	3
2	Camada Limite Planetária	9
2.1	Camada Limite Convectiva	11
2.2	A Estrutura da Turbulência na CLC	12
3	O Método Utilizado	14
3.1	A GITT	14
3.2	Solução do Problema Transformado	17
4	Solução da equação de difusão-advecção	19
4.1	O Modelo Matemático	19
4.2	Solução via GILTT	21
5	Validação do Modelo	25
5.1	Dados Experimentais	25
5.1.1	O Experimento de Copenhagen	25
5.2	Coefficientes de Difusão.....	27
5.3	Índices Estatísticos	28
6	Resultados	30
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	40
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	41
	APÊNDICES	48

I A New Analytical Approach to Simulate the Pollutant Dispersion in the PBL..... 48

I.1 Introduction 49

I.2 The model and the GILTT solution 50

I.3 Turbulent parameterisation 54

I.4 Experimental data and evaluation of the model..... 55

I.5 Conclusions 58

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

A	operador diferencial parcial genérico
B	matriz de coeficientes do problema transformado
B^*	operador diferencial genérico
c	concentração média de um contaminante passivo (g/m^3)
\bar{c}	concentração média integrada lateralmente ao vento (g/m^2)
$\bar{c}_i(z)$	variável dependente do problema difusivo
$c(x, z)$	variável dependente original
C_o	concentrações observadas experimentalmente
C_p	concentrações preditas pelo modelo
CLC	camada limite convectiva
CLE	camada limite estável
CLN	camada limite noturna
CLP	camada limite planetária
CLR	camada limite residual
CLS	camada limite superficial
CM	camada de mistura
Cor	coeficiente de correlação
D	matriz diagonal dos autovalores da matriz F de coeficientes do problema transformado
E	matriz de coeficientes do problema transformado
F	matriz de coeficientes do problema transformado
$Fa2$	fator de dois
Fb	fração de inclinação
$F_i^E(n)$	espectro euleriano de energia
$F_i^E(0)$	espectro euleriano de energia em $n = 0$
Fs	desvio fracional padrão

g	aceleração da gravidade
H_s	altura da fonte (m)
k	constante de Von-Kármán
K_x	coeficiente de difusão na direção x (m^2/s)
K_y	coeficiente de difusão na direção y (m^2/s)
K_z	coeficiente de difusão na direção z (m^2/s)
L	comprimento de Monin-Obukov (m)
L^*	operador diferencial associado ao problema de Sturm-Liouville
n	freqüência (s)
n'	freqüência adimensional
N	número de autovalores
N_i	norma L^2
$Nmse$	erro quadrático médio normalizado
Q	intensidade da fonte (g/s)
t	tempo (s)
u_*	velocidade de fricção (m/s)
U	velocidade média do vento orientado na direção x (m/s)
w_*	escala de velocidade convectiva (m/s)
x	distância da fonte (m)
X	matriz dos autovetores da matriz F de coeficientes do problema transformado
X^*	escala de tempo adimensional
$Y(x)$	vetor de incógnitas do problema transformado
z	altura acima da superfície (m)
z_0	comprimento de rugosidade aerodinâmico (m)
z_i	altura da camada limite convectiva (m)
ZE	camada interfacial ou zona de entranhamento
$(\overline{w\theta})$	fluxo de calor turbulento na superfície

2. Caracteres Gregos

β_i	razão das escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana
δ	função delta de Dirac
ϵ	taxa média da dissipação da energia cinética turbulenta
λ ou λ_i	autovalor do problema de Sturm-Liouville
ψ	taxa de dissipação molecular
ψ_m	função estabilidade
σ_i	desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento
σ_i^2	variância generalizada
ϑ	temperatura potencial média
ξ	vetor representado por $X^{-1}Y(0)$
ζ ou ζ_i	autofunção do problema de Sturm-Liouville

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1	Evolução temporal da CLP [Stull, 1988]	10
4.1	Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes	20
5.1	Experimento de Copenhagen.	26
5.2	Perfil dos coeficientes de difusão em função da altura com dados experimentais de Copenhagen.	28
6.1	Convergência numérica da concentração de poluentes utilizando a equação (5.1)	32
6.2	Tempo de processamento em função do número de autovalores	32
6.3	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observados experimentalmente de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p) utilizando: a) equação (5.1), b) equação (5.4) e c) equação (5.2).	37
6.4	Gráfico da concentração superficial em função da posição para o experimento de Copenhagen utilizando: a) equação (5.1), b) equação (5.4) e c) equação (5.2).	38
6.5	Gráfico da altura em função da concentração superficial para o experimento de Copenhagen utilizando: a) equação (5.1), b) equação (5.4) e c) equação (5.2).	39
I.1	Observed (C_o) and predicted (C_p) crosswind ground-level integrated concentration, normalised with emission (\bar{c}/Q), scatter diagram for the new model. Lines indicate a factor of two.	61
I.2	Vertical profile of concentration ($C^* = \bar{c}/Q$) for various downstream distances considering the experiment nine of Copenhagen: $x = 1000, 2000, 4000$ and 6000 m.	61
I.3	Crosswind integrated concentration function of source distance for two different nondimensional source height ($H_s/z_i = 0.05$ and $H_s/z_i = 0.1$).	63
I.4	Convergence of the new model for the experiment nine of Copenhagen.	63

ÍNDICE DE TABELAS

5.1	Condições meteorológicas do experimento de Copenhagen [Gryning et al., 1987]	26
6.1	Comportamento da concentração para o experimento 9 de Copenhagen utilizando a equação (5.1)	31
6.2	Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen utilizando a equação (5.1) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $\bar{c}(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.	33
6.3	Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen utilizando a equação (5.4) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $\bar{c}(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.	34
6.4	Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen utilizando a equação (5.2) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $\bar{c}(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.	35
6.5	Avaliação estatística do modelo	36
I.1	Observed and modelled ground-level crosswind integrated concentration \bar{c}/Q at different distances from the source with the convergence test (function of the amount of eigenvalues N) of the new model.	62
I.2	Statistical evaluation of models results for ground-level concentration.	62

CAPÍTULO 1

Introdução

A qualidade do ar das cidades é fator fundamental para a qualidade de vida da população e do meio ambiente. Devido a isso, diferentes grupos de pesquisa vêm trabalhando na modelagem do fenômeno atmosférico e na sua simulação computacional. Assim, o grande desafio tem sido desenvolver ferramentas numéricas capazes de estimar o nível de concentração de contaminantes na atmosfera provenientes das diversas fontes de emissão antropogênicas e naturais. A partir da estimativa do nível de concentração próximo à fonte, pode-se avaliar o impacto ambiental causado e agir no sentido de solucionar o problema da forma mais conveniente possível.

Na literatura, encontram-se disponíveis inúmeros trabalhos que concentram-se no estudo da dinâmica da camada limite planetária (CLP)*, onde são considerados diversos modelos para fechamento das equações dos fluxos turbulentos tais como: modelos de primeira ordem ou teoria K, segunda ordem e de larga escala.

A descrição do fenômeno da dispersão de poluentes pode ser feita através de dois procedimentos: o Euleriano, em que o comportamento da concentração é descrito em relação a um sistema de coordenadas fixo e o Lagrangeano, no qual as mudanças na concentração são descritas em relação a um sistema de coordenadas que movimenta-se com o fluido.

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera, emprega-se, normalmente, a equação de difusão-advecção, que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade, sendo que os modelos Eulerianos de dispersão têm como característica a solução desta. Sob certas condições, pode-se obter expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de

*Também chamada de camada limite atmosférica. Maiores detalhes no Capítulo 2.

variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma [Pasquill, 1974].

A maneira mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de difusão-advecção é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K), onde os fluxos turbulentos de concentração são relacionados à concentração média via um coeficiente de difusão turbulento. A teoria K tem sido utilizada com grande sucesso como um modelo prático de estimativa da dispersão de poluentes na atmosfera.

O objetivo deste trabalho é obter a solução analítica de um problema bidimensional difusivo-advectivo estacionário que modela a dispersão de poluentes na atmosfera. Para tanto, é considerada a emissão de um contaminante passivo a partir de uma fonte contínua elevada. No fechamento do fluxo turbulento de concentração vertical, utilizam-se três coeficientes de difusão turbulenta válidos na camada limite convectiva: dois para grandes tempos de difusão e outro que é adicionalmente função da distância da fonte. A abordagem utilizada será a da técnica da transformada integral generalizada com solução analítica do problema transformado pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização. Nenhuma aproximação é feita durante a derivação da solução, e, assim, é exata exceto pelo erro de truncamento. O modelo será avaliado em condições moderadamente instáveis usando o experimento de Copenhagen.

A presente dissertação encontra-se estruturada em sete capítulos. O capítulo 2 é dedicado à descrição da camada limite planetária. Dá-se ênfase à camada limite convectiva e às propriedades da turbulência nesta. No capítulo 3, faz-se uma breve descrição da técnica da transformada integral generalizada e da solução do problema transformado com coeficientes constantes. No capítulo 4, apresentam-se o modelo matemático de poluição atmosférica e o método de solução da equação de difusão-advecção. A validação do modelo é apresentada no capítulo 5. Neste, faz-se a descrição do experimento de Copenhagen, das parametrizações turbulentas e dos dados estatísticos utilizadas no modelo. No capítulo 6, apresentam-se os resultados numéricos e estatísticos obtidos com o modelo. Estes resultados são comparados com dados experimentais e com os resultados de [Moreira, 1999] e [Degrazia et al., 2001]. As conclusões são apresentadas no capítulo 7.

Para motivar a realização deste trabalho, apresenta-se na seção seguinte uma revisão bibliográfica.

1.1 Revisão Bibliográfica

Uma grande variedade de soluções numéricas da equação de difusão-advecção pode ser encontrada na literatura ([Nieuwstadt e Van Ulden, 1978], [Lamb, 1978], [Carvalho, 1996]). Porém, a busca de soluções analíticas para problemas de dispersão ainda é uma das principais direções de pesquisa nesta área, pois todos os parâmetros aparecem explicitamente na solução, facilitando a investigação de suas influências. Sendo assim, apresenta-se uma revisão sobre algumas soluções analíticas da equação de advecção-difusão aplicadas à dispersão de poluentes encontradas na literatura.

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

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0, \quad \text{e} \quad z \rightarrow \infty \quad (1.1)$$

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

Roberts [Roberts, 1923] apresentou uma solução bidimensional, somente para fontes superficiais, onde tanto a velocidade do vento U quanto o coeficiente difusivo K_z seguem uma lei de potência em função da altura z , ou seja:

$$U = U_1 \left(\frac{z}{z_1}\right)^m ; \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1}\right)^n \quad (1.2)$$

sendo z_1 a altura onde U_1 e K_1 são avaliados, m e n variam entre 0 e 1. Rounds [Rounds, 1955] obteve uma solução bidimensional válida somente para fontes elevadas, utilizando o mesmo perfil de vento acima, porém, somente para perfis lineares de K_z .

A equação bidimensional de transporte e difusão - sendo U e K_z funções de potência da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$) - foi resolvida por [Smith, 1957]. Smith também apresentou uma solução para o caso de U constante, mas com o seguinte K_z :

$$K_z = K_0 z^\alpha (z_i - z)^\beta \quad (1.3)$$

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

Em [Scriven e Fisher, 1975], é apresentada a solução com U constante e K_z como

$$K_z = z \text{ para } 0 \leq z \leq z_t \text{ e } K_z = K_z(z_t) \text{ para } z_t \leq z \leq z_i \quad (1.4)$$

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

Em 1975, Yeh e Huang [Yeh e Huang, 1975] e Berlyand [Berlyand, 1975] publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com U e K_z seguindo os perfis de potência, mas para uma atmosfera sem contorno superior ($K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$). Estas soluções foram obtidas em termos de funções de Green. Demuth [Demuth, 1978] avançou a solução, dada em termos de funções de Bessel, para uma camada verticalmente limitada ($K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ em $z = z_i$). A solução de Berlyand tem sido usada na Rússia. Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de Yeh e Huang, Beryland e Demuth têm sido adotados: KAPPAG [Tirabassi et al., 1986], KAPPAG-LT [Tirabassi et al., 1989], CISP [Tirabassi e Rizza, 1992] e MAOC [Tirabassi e Rizza, 1993]. Em 1997, Lin e Hildeman [Lin e Hildeman, 1997] estenderam as soluções de Yeh e Huang e Berlyand para o caso de deposição seca no solo. Estas soluções foram apresentadas em termos de funções modificadas de Bessel.

Com a aplicação da teoria da similaridade de Monin-Obukhov à difusão, Van Ulden [Van Ulden, 1978] derivou a solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, supondo que U e K_z seguem os perfis de potência.

Em 1980, Nieuwstadt [Nieuwstadt, 1980] apresentou uma solução para um problema unidimensional dependente do tempo, utilizando os polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado por

$$K_z = Gu_* z \left(1 - \frac{z}{z_i}\right) \quad (1.5)$$

onde G é uma constante e u_* é a velocidade de fricção. Um ano depois, Nieuwstadt e Haan [Nieuwstadt e Haan, 1981] estenderam esta solução, em termos de polinômios de Jacobi,

para o caso de crescimento da altura da camada limite.

Quase no fim da década de oitenta, Koch [Koch, 1989] apresentou uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, na qual o vento e as difusividades ainda seguem os perfis de potência, incluindo efeitos de absorção de contaminante pelo solo. A deposição foi imaginada em termos de funções hipergeométricas. Em 1992, [Chrysikopoulos et al., 1992] desenvolveram uma solução tridimensional para uma fonte aérea contínua ao nível do solo com U e K_z dados pela equação (1.2), incluindo um termo de deposição seca. As funções de Bessel e hipergeométricas foram incorporadas à solução.

Observe 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 da transformada de Laplace e também da técnica da transformada integral generalizada.

Moura et al. [Moura et al., 1995] propuseram uma solução analítica para a dispersão de contaminantes passivos em uma camada limite estável[†]. Para a obtenção dos resultados, foi aplicada a transformada de Laplace e usou-se um coeficiente de difusão K_z constante dado por [Degrazia e Moraes, 1992]. Após, Pires [Pires, 1996] apresentou uma solução similar para uma camada limite convectiva (CLC)[‡], utilizando o coeficiente difusivo de [Degrazia et al., 1995]. Moreira [Moreira, 1996] foi além, propondo a solução para o caso bidimensional estacionário usando o mesmo artifício dos trabalhos anteriores também na CLC. Em 1999, [Moreira et al., 1999] utilizaram os dados do experimento de Praire-Grass e o coeficiente difusivo de [Degrazia et al., 1997] na mesma equação.

Em 2001, Degrazia et al. desenvolveram um coeficiente difusivo K_z , resultante de um equacionamento bidimensional, difusivo-advectivo com coeficiente variável. Em [Degrazia et al., 2001], são apresentados os detalhes de sua dedução e da determinação da solução aproximada. A descrição do fenômeno da dispersão de poluentes é feita através do procedimento Euleriano, utilizando os dados do experimento de Copenhagen.

Pode-se resumir o procedimento adotado por [Moura et al., 1995], [Pires, 1996], [Moreira, 1996], [Moreira et al., 1999] e [Degrazia et al., 2001], citados anteriormente, da seguinte forma: o domínio foi dividido em vários sub-domínios e em cada um deles

[†]Também conhecida como camada limite noturna. Maiores detalhes no Capítulo 2.

[‡]É a camada que começa a se formar depois do nascer do sol, dura o dia todo e cessa com o pôr do sol. Maiores detalhes no Capítulo 2.

foram tomados valores médios do coeficiente difusivo K_z . 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 de cada um deles foi obtida pelo uso da transformada de Laplace. A inversão desta foi calculada numericamente.

Problemas de engenharia mais elaborados, geralmente, recaem em equações diferenciais parciais que raramente possuem solução analítica. A necessidade da utilização de métodos numéricos ou de métodos conhecidos como híbridos analítico-numéricos para a obtenção dos potenciais desejados torna-se eminente. A técnica da transformada integral generalizada (GITT) é um método híbrido analítico-numérico [Cotta, 1993], [Cotta e Mikhaylov, 1997] derivado da transformação integral clássica [Mikhaylov e Özisik, 1984] para problemas lineares de difusão. A GITT vem sendo utilizada com grande êxito na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e difusão-advecção. Com ela tem se obtido excelentes resultados não só sob o ponto de vista de precisão como também sob a ótica de custos computacionais.

Para a solução de problemas diferenciais parciais, esta técnica de transformação integral combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão, é usada uma base trigonométrica determinada com o auxílio de um problema auxiliar. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. Este procedimento resulta em um sistema de equações diferenciais 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 do somatório infinito da chamada fórmula da inversa da GITT, que fornece o resultado da equação governante do problema original. Este 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 pela transformada de Laplace [Degrazia et al., 2001] reside no fato de que com a técnica da GITT não há necessidade de discretização do domínio.

É vasta a literatura a respeito da GITT. Porém, a aplicação desta técnica em problemas de poluição atmosférica é ainda recente. Cataldi et al. [Cataldi et al., 2000] desenvolveram um modelo matemático que obtém a solução da equação de difusão atmosférica para uma fonte pontual instantânea. Ribeiro et al. [Ribeiro et al., 2000] geraram posteriormente uma simulação computacional para a dispersão de poluentes com uma fonte contínua e em condições de neutralidade atmosférica. Os estudos de [Cataldi et al., 2000] e [Ribeiro et al., 2000] concentraram-se na região da camada limite superficial[§]. Em 2002, Ribeiro et al. [Ribeiro et al., 2002] fizeram um avanço, avaliando o transporte de poluentes em toda a região da camada limite atmosférica. Velloso et al. [Velloso et al., 2003] utilizaram a GITT num modelo que permite simular mecanismos de transporte na atmosfera, incluindo os processos de deposição de poluentes. Em 2003, Storch e Pimentel [Storch e Pimentel, 2003] simularam a dispersão de poluentes através da equação difusiva-advectiva. Para a obtenção dos resultados numéricos, foi considerado o transporte turbulento apenas na direção vertical.

Em 1999, Moura [Moura, 1999] resolveu analiticamente a equação de advecção-difusão estacionária bidimensional e tridimensional, numa geometria cartesiana, pela GITT. O K_z utilizado era constante e válido na CLC.

Recentemente, um problema transiente difusivo unidimensional com coeficiente de difusão variável foi resolvido por [Wortmann et al., 2000]. De acordo com o conhecimento dos autores, é a primeira vez que a GITT foi aplicada para simular a dispersão de poluentes na atmosfera com coeficiente difusivo K_z variável. Neste trabalho, o sistema EDO resultante da aplicação da GITT (problema transformado) é resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Este procedimento recebeu o nome de GILTT ("Generalized Integral Laplace Transform Technique")[¶].

Utilizando a idéia desenvolvida por [Wortmann et al., 2000], [Buske et al., 2003] apresentaram a derivação matemática de um problema bidimensional difusivo-advectivo estacionário, que modela a dispersão de poluentes na camada limite planetária (CLP). O método GILTT foi aplicado. Os resultados deste problema são apresentados em [Wortmann

[§]Maiores detalhes no Capítulo 2

[¶]A GITT com solução analítica do problema transformado, via transformada de Laplace e diagonalização, recebeu o nome GILTT em 2004. Seus autores foram os professores Dr. Marco Túlio M. B. de Vilhena e Dr. Sérgio Wortmann.

et al., 2004]^{||} e comparados com os modelos ADMM ([Vilhena et al., 1998]) e KAPPA-G ([Tirabassi et al., 1986]). Utilizou-se um coeficiente difusivo variável com a altura dado em [Degrazia et al., 1997].

Pode-se resumir o procedimento adotado nas referências [Cataldi et al., 2000],[Ribeiro et al., 2000], [Ribeiro et al., 2002], [Velloso et al., 2003] e [Storch e Pimentel, 2003], citadas anteriormente, da seguinte forma: primeiramente é feita a transformação integral das equações governantes do problema em questão. Após, o sistema resultante da transformação integral é resolvido numericamente. Em seguida, procede-se a inversão da transformação integral para reconstituir o potencial original.

Uma novidade em relação ao uso típico da GITT, que obtém a solução do problema transformado numericamente [Cotta, 1993], [Cotta e Mikhaylov, 1997], surgiu com o trabalho de [Wortmann et al., 2000]. A vantagem em utilizar a GILTT está no fato de que o problema transformado é resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Assim, nos trabalhos de [Wortmann et al., 2000], [Buske et al., 2003] e [Wortmann et al., 2004] procede-se a 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 fatoração, esta matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico. Esta inversão é analítica e sem custo computacional por ser de uma matriz diagonalizada. A transformada de Laplace também é. Assim, a solução analítica do problema transformado é finalmente encontrada.

Diante disso, sugere-se que a técnica da GILTT seja usada para se obter uma nova solução analítica da equação de advecção-difusão aplicada ao problema de dispersão de poluentes citado em [Degrazia et al., 2001].

^{||}maiores detalhes no Apêndice 1.

CAPÍTULO 2

Camada Limite Planetária

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

A troposfera é a região da atmosfera que vai desde a superfície até cerca de 11Km de altura. Está dividida em duas partes: a camada limite planetária (CLP), que é a região que vai desde a superfície até aproximadamente 3km e o restante da troposfera, que é denominada atmosfera livre.

A CLP é a região da atmosfera mais diretamente influenciada pela superfície da terra e que responde a forçantes superficiais tais como os fluxos de calor, umidade, *momentum*, emissão de poluentes e modificações de fluxo induzidas pelo terreno, em uma escala de tempo de uma hora ou menos. A espessura da CLP varia de 100 a 3000m de altura a partir da superfície e é uma função direta dos forçantes térmicos e mecânicos (produção de turbulência pode ocorrer por empuxo e/ou cisalhamento do vento).

Uma das suas principais características é a variação diurna de temperatura, provocada pelo aquecimento e resfriamento da superfície da terra. A radiação de onda longa, proveniente do solo que absorve nos dias ensolarados cerca de 90% da radiação, faz com que a variação diurna seja bastante acentuada próximo ao solo, o que não ocorre a grandes altitudes. As massas de ar quente que se elevam a partir da superfície são chamadas de termas, turbilhões ou vórtices.

Nesta camada, o transporte é dominado na horizontal pelo vento médio (advecção) e na vertical pela turbulência. A turbulência é constituída de vários turbilhões que se sobrepõem, cujos tamanhos são variáveis (da ordem de 1mm a 3000m de diâmetro). A soma

das contribuições de todos estes turbilhões constitui o espectro de energia turbulenta.

A CLP se subdivide, de acordo com os processos físicos envolvidos (turbulência mecânica e/ou convectiva), em camada limite convectiva, camada residual noturna e camada limite estável ou noturna (figura 2).

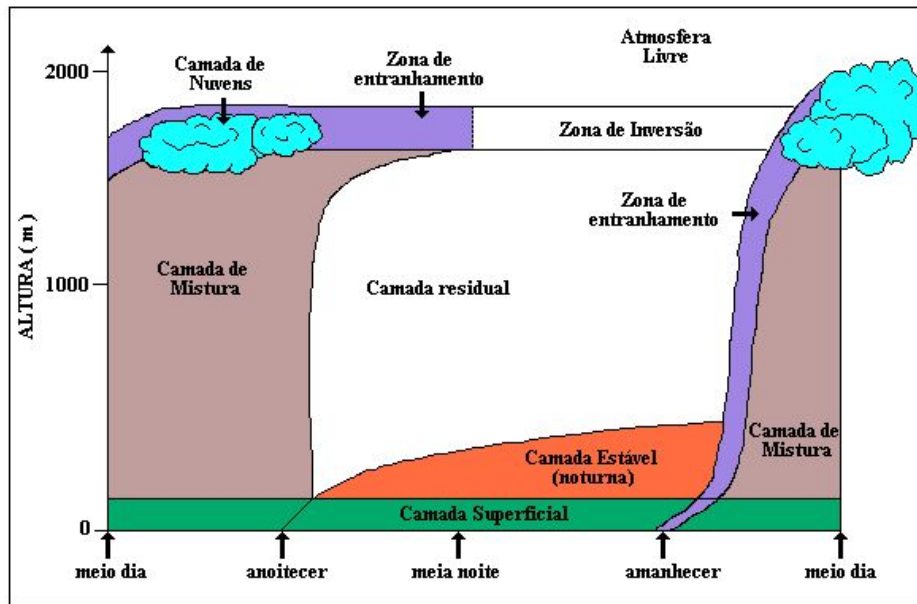


Figura 2.1 – Evolução temporal da CLP [Stull, 1988]

A **camada limite convectiva** (CLC) é provocada pelo aquecimento diurno da superfície. O aquecimento da superfície da terra forma termas de ar quente que se elevam, modificando o topo da CLP. Essa estrutura convectiva dura o dia todo e cessa com o pôr-do-sol.

Por volta de meia hora antes do pôr-do-sol, as termas cessam, permitindo que a turbulência decaia. O resultado é uma camada de ar que é denominada de **camada limite residual** (CLR), pois suas características permanecem as mesmas do decaimento recente da camada convectiva. Esta camada não tem contato com o solo, pois se encontra acima da camada limite estável.

A **camada limite estável** (CLE) ou noturna (CLN) ocorre quando a superfície terrestre se resfria. Este resfriamento provoca um fluxo de calor negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões, permitindo somente que pequenos turbilhões sobrevivam. Portanto, a turbulência na CLE é menos intensa que na CLC, conseqüentemente, poluentes

emitidos dentro da CLE se dispersam lentamente na horizontal (efeito dos ventos). Esta camada alcança uma altura de 100 a 300m e é formada por pequenos turbilhões que agem localmente.

Neste trabalho, será dada ênfase à CLC.

2.1 Camada Limite Convectiva

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

A CLC é definida como a região da baixa atmosfera que estende-se do solo ($z = 0$) até a base de inversão térmica ($z = z_i$, onde z_i é a altura da CLC, que geralmente varia de 1000 a 2000m). É caracterizada por uma forte mistura vertical, gerada pelo fluxo de calor turbulento positivo, devido ao aquecimento solar da superfície.

Freqüentemente, a turbulência na CLC está em equilíbrio local com os forçantes externos. Isto significa que o tempo de relaxação da turbulência associado aos grandes turbilhões é muito menor que a escala de tempo associada a mudanças externas, de modo que a estrutura da CLC não depende explicitamente do tempo [Driedonks e Tennekes, 1984].

A CLC pode ser subdividida em três camadas diferenciadas em função dos parâmetros predominantes (escalas de comprimento, de velocidade e de temperatura), considerados relevantes para a descrição da turbulência.

A primeira camada é denominada de **camada limite superficial** (CLS), na qual predomina a turbulência mecânica (cisalhamento do vento). Está restrita a alturas menores do que $z = |L|$, onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, definido por

$$L = -\frac{u_*^3}{k \frac{g}{\vartheta} (\overline{w\theta})}, \quad (2.1)$$

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

Para uma CLC bem desenvolvida, $|L|$ apresenta valores típicos entre 10 e 100m, de modo que $z_i/|L| \geq 10$ [Panofsky e Dutton, 1984]. A razão $z_i/|L|$ pode ser considerada um

parâmetro de estabilidade, uma vez que expressa a importância da turbulência convectiva (fluxo de calor) em relação à turbulência mecânica (cisalhamento do vento). Na CLS, são observados grandes gradientes de temperatura e velocidade, e o fluxo de calor turbulento é aproximadamente constante.

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

$$w_* = \left(\frac{g}{\vartheta}(\overline{w\theta})z_i\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.2)$$

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

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

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

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

2.2 A Estrutura da Turbulência na CLC

Na CLC, o fluxo de calor sensível turbulento, gerado pelo aquecimento solar da superfície terrestre, dá origem a uma estrutura de plumas térmicas* circundadas por ar

*ar quente que se eleva até a base da inversão térmica

mais frio que desce do topo das nuvens em direção ao solo. Para condições suficientemente instáveis, estas estruturas são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional, com escalas de tempo da ordem de 15 minutos.

As observações na atmosfera indicam que 40% da área de uma CLC é ocupada por plumas térmicas (*updrafts*), enquanto 60% é ocupada por ar mais frio que desce (*down-drafts*). Pela lei de conservação de massa, o ar quente subindo tem uma velocidade maior do que o ar frio que desce. Modelos numéricos mostram que esta estrutura assimétrica da CLC é responsável por padrões de dispersão vertical que são distintos dos tradicionais padrões Gaussianos [Lamb, 1982]. Esta assimetria na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés na CLC.

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

CAPÍTULO 3

O Método Utilizado

3.1 A GITT

Mostram-se a seguir os passos básicos para a obtenção da solução de um problema unidimensional dependente da altura pela técnica da GITT em geometria cartesiana. Para problemas multidimensionais, o procedimento é análogo. Faz-se uso da metodologia adotada por [Wortmann, 2003].

Considere a equação

$$Ac(x, z) = 0, \text{ em } a < x < b \text{ e } z > 0, \quad (3.1)$$

sujeita às condições de contorno homogêneas

$$\alpha_1 \frac{\partial c(a, z)}{\partial x} + \alpha_2 c(a, z) = 0, \quad (3.1a)$$

$$\beta_1 \frac{\partial c(b, z)}{\partial x} + \beta_2 c(b, z) = 0, \quad (3.1b)$$

onde A é um operador diferencial parcial, e as constantes α_1 , α_2 , β_1 e β_2 dependem das propriedades físicas do problema.

O primeiro passo é expandir $c(x, z)$ em uma base adequada. Assim, A é reescrito como

$$Ac(x, z) = B^*c(x, z) + L^*c(x, z), \quad (3.2)$$

sendo L^* um operador auto-adjunto associado ao problema de Sturm-Liouville e B^* um operador associado aos termos restantes.

Na sua forma mais geral, L^* é escrito como

$$L^*\zeta(\lambda, x) \equiv \nabla \cdot [p(x)\nabla \zeta(\lambda, x)] + q(x)\zeta(\lambda, x). \quad (3.3)$$

As funções $p(x)$ e $q(x)$ devem ser reais. Toma-se $q(x)$ contínua e $p(x) > 0$ continuamente diferenciável no intervalo (a, b) definido no problema (3.1), para garantir a existência de soluções. Algumas destas parcelas podem ser nulas dependendo do problema a ser avaliado, com exceção de $p(x)$.

Quanto ao operador L^* , tem-se

$$L^*\zeta(\lambda, x) + \lambda^2 \zeta(\lambda, x) = 0 \text{ em } a < x < b \quad (3.4)$$

que juntamente com as condições de contorno

$$\alpha_1 \frac{\partial \zeta(\lambda, a)}{\partial x} + \alpha_2 \zeta(\lambda, a) = 0 \text{ e} \quad (3.4a)$$

$$\beta_1 \frac{\partial \zeta(\lambda, b)}{\partial x} + \beta_2 \zeta(\lambda, b) = 0. \quad (3.4b)$$

constituem um sistema de Sturm-Liouville, também chamado de problema auxiliar na teoria da GITT. Os parâmetros α_1 , α_2 , β_1 e β_2 devem ser os mesmos do problema original dado em (3.1). Se o problema original não tem condições de contorno homogêneas, faz-se o uso de filtros para homogeneizá-las [Cotta, 1993], [Cotta e Mikhaylov, 1997].

Pode-se reescrever (3.4) utilizando um parâmetro independente das constantes α_1 , α_2 , β_1 e β_2 . Neste caso, λ_i é tal que $\zeta_i(x) \equiv \zeta(\lambda_i, x)$, logo

$$L^*\zeta_i(x) + \lambda_i^2 \zeta_i(x) = 0. \quad (3.5)$$

Análogo ao sistema de equações lineares, os valores de λ_i para os quais o sistema de Sturm-Liouville tem uma solução não-trivial são chamados de autovalores, e as soluções correspondentes $\zeta_i(x)$ são as suas autofunções. O conjunto de todos os autovalores de um sistema de Sturm-Liouville é chamado espectro do sistema.

As autofunções e autovalores formam uma base para o espaço que contém o operador L^* e estas possuem a propriedade de ortogonalidade, que é definida da seguinte forma [Özsisik,

1974]

$$\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}} N_n^{\frac{1}{2}}} \int_v \zeta_m(x) \zeta_n(x) dv = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \quad (3.6)$$

onde N_m é dado por

$$N_m = \int_v \zeta_m^2(x) dv. \quad (3.7)$$

A base de autofunções é usada para expandir a variável $c(x, z)$ da equação (3.1) da seguinte forma

$$c(x, z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{c_i(z)} \zeta_i(x)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \quad (3.8)$$

sendo esta equação conhecida como fórmula da inversa da GITT.

Após resolver o problema auxiliar e feita a expansão da variável dependente, aplica-se na equação (3.1) o operador integral

$$\frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}}} \int_v \zeta_i(x) dv. \quad (3.9)$$

Executando-se as integrações, obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), cuja variável dependente é $\overline{c_i(z)}$. A obtenção desta variável é feita solucionando-se este sistema de equações, no qual a autofunção $\zeta_i(x)$ é obtida da solução do problema auxiliar. Feito isso, o somatório da equação (3.8) é truncado num número de termos suficientemente grande para a determinação do potencial original $c(x, z)$.

A seguir, apresenta-se resumidamente os principais passos para a obtenção da solução de uma equação pela GITT:

- a) Determina-se o problema auxiliar, identificando o operador L^* na equação a ser resolvida. Para o problema auxiliar, objetiva-se levar o máximo de informações do problema original, visando minimizar o número de termos necessários para o truncamento da equação (3.8). A base carregará mais informação na medida em que menos termos do operador L^* forem nulos.
- b) Resolve-se o problema auxiliar.

- c) Transforma-se a equação principal, usando o operador definido na equação (3.9) num sistema de equações transformadas (também chamado de problema transformado).
- d) Resolve-se o problema transformado.
- e) Trunca-se a fórmula da inversa da GITT em um valor suficientemente grande de termos para obter a solução final do problema.

3.2 Solução do Problema Transformado

Nas aplicações típicas da GITT, a solução do sistema EDO transformado é obtida numericamente. Aqui pretende-se encontrá-la analiticamente, e, para alcançar este objetivo, são utilizadas a transformada de Laplace e diagonalização.

Neste trabalho, utiliza-se um sistema EDO linear com coeficientes constantes. A resolução para um sistema EDO com coeficientes variáveis linear e não linear podem ser observados em [Wortmann, 2003].

Considere a seguinte equação

$$B.Y'(x) + E.Y(x) = 0 \quad (3.10)$$

onde B e E são matrizes e $Y(x)$ é o vetor de incógnitas.

Primeiramente, faz-se

$$Y'(x) + F.Y(x) = 0, \quad (3.11)$$

na qual $F \equiv B^{-1}.E$.

O problema transformado da equação (3.11) será resolvido por transformada de Laplace e diagonalização [Wortmann, 2003]. Aplicando Laplace, transforma-se x em s e Y em \bar{Y} da forma

$$s\bar{Y}(s) - Y(0) + F.\bar{Y}(s) = 0 \quad (3.12)$$

onde a barra superior representa o potencial transformado.

A seguir, decompõe-se a matriz F em seus autovalores e respectivos autovetores

como segue

$$F = X.D.X^{-1}, \quad (3.13)$$

onde D é a matriz diagonal dos autovalores, e X é a matriz dos autovetores de F . Este procedimento é válido quando os autovalores da matriz F são distintos e não nulos.

Logo, aplicando a equação (3.13) na equação (3.12)

$$s\bar{Y}(s) - Y(0) + X.D.X^{-1}.\bar{Y}(s) = 0 \quad (3.14)$$

ou ainda,

$$(sI + X.D.X^{-1}).\bar{Y}(s) = Y(0), \quad (3.15)$$

onde I é a matriz identidade. Como $X.X^{-1} = I$, a matriz dos autovetores e sua inversa são colocadas em evidência de forma que

$$X.(sI + D).X^{-1}.\bar{Y}(s) = Y(0). \quad (3.16)$$

Multiplicando ambos os lados da equação (3.16) por X^{-1} , $(sI + D)^{-1}$ e X consecutivamente, obtemos

$$\bar{Y}(s) = X.(sI + D)^{-1}.X^{-1}.Y(0). \quad (3.17)$$

Os elementos da matriz $(sI + D)$ são da forma $\{s + d_i\}$, onde d_i são os autovalores da matriz F dada na equação (3.11).

Da álgebra matricial, a inversa de uma matriz diagonal é a inversa dos seus elementos, ou seja, os elementos $(sI + D)^{-1}$ são $\frac{1}{s+d_i}$ cuja transformada inversa de Laplace é $e^{-d_i x}$.

Sendo $G(x)$ a matriz diagonal cujos elementos são $e^{-d_i x}$, a solução final torna-se

$$Y(x) = X.G(x).X^{-1}.Y(0), \quad (3.18)$$

e assim a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares com coeficientes constantes, representada pela equação (3.18), fica totalmente detalhada.

CAPÍTULO 4

Solução da equação de difusão-advecção

Toda substância emitida na atmosfera se dispersa através da difusão turbulenta causada pela variação de temperatura na camada limite. Esta variação provoca o aquecimento e/ou resfriamento da superfície da terra, fazendo com que o transporte das partículas seja dominado na horizontal pela advecção e na vertical pela turbulência. Como consequência, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera é, geralmente, descrito pela equação de advecção-difusão.

Neste capítulo, apresentam-se a formulação matemática de um modelo de dispersão de poluentes, e a sua solução. O equacionamento matemático clássico é dado pela equação de advecção-difusão [Moura et al., 1995].

4.1 O Modelo Matemático

Consideremos um experimento de dispersão de poluentes na atmosfera, no qual uma fonte aérea libera um traçador químico. Este é abandonado sem empuxo, a partir de uma torre com altura H_s , que emite poluentes com intensidade Q a uma taxa constante conforme a figura (4.1). No nível do solo e na altura da CLP (z_i), considera-se que não há fluxo de poluente.

Segundo [Vilhena et al., 1998] e [Moreira et al., 1999], para um sistema de coordenadas cartesianas, a equação da conservação das espécies químicas no regime estacionário, pode ser escrita como

$$U(z) \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial z} \right), \quad (4.1)$$

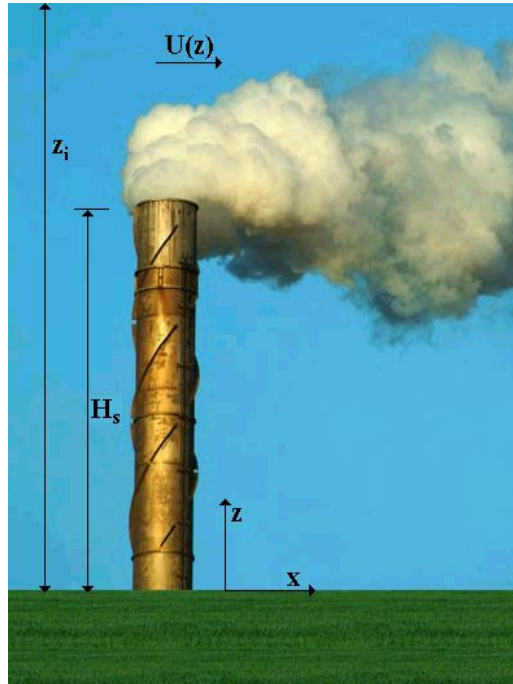


Figura 4.1 – Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes

onde $0 < x < \infty$, $-\infty < y < \infty$, $0 < z < z_i$. Na equação (4.1), $c(x, y, z)$ denota a concentração média do contaminante passivo, $U(z)$ é a velocidade do vento orientado na direção x , e K_x , K_y , K_z são os coeficientes de difusão turbulenta longitudinal, lateral e vertical, respectivamente.

Desprezando-se a difusão longitudinal (termo de transporte em x é muito maior que o difusivo)* e integrando-se lateralmente a equação (4.1), teremos

$$U(z) \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial z} \right), \dagger \quad (4.2)$$

sujeita à condição de contorno

$$K_z \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0, \quad z = z_i, \quad (4.2a)$$

*ou seja, $|U \frac{\partial c}{\partial x}| \gg |\frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial c}{\partial x})|$

†Considera-se um coeficiente de difusão turbulento vertical K_z , variável na direção vertical (z) e paralelo ao vento dominante (x), ou apenas com dependência de (z), dependendo da parametrização turbulenta a ser utilizada, conforme seção 5.2.

e à condição de fonte

$$U(z)\bar{c}(0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad em \quad x = 0, \quad (4.2b)$$

onde o novo $\bar{c}(x, z)$ denota a concentração média integrada lateralmente de um poluente passivo e é representado por $\bar{c}(x, z) = \frac{1}{z_i} \int_0^{z_i} c(x, y, z) dy$; Q é a intensidade da fonte; z_i é a altura da CLC e H_s a altura da fonte. Nesta equação, δ representa a função delta de Dirac dada por $\delta(z) = \begin{cases} \infty, & z = H_s \\ 0, & z \neq H_s \end{cases}$.

4.2 Solução via GILTT

Inicia-se a aplicação formal da GITT pela escolha do problema auxiliar[‡] e suas respectivas condições de contorno, utilizando a equação (3.4), como sendo

$$\frac{d}{dz} \left[K_z \frac{d\zeta_i(z)}{dz} \right] + \lambda_i^2 \zeta_i(z) = 0 \quad em \quad 0 < z < z_i, \quad (4.3)$$

$$\zeta_i'(z) = 0 \quad em \quad z = 0 \quad e \quad z = z_i. \quad (4.3a)$$

Observe que, da maneira como o problema auxiliar está definido, este é de difícil solução. Usando um artifício que permite determinar um problema auxiliar mais simples, conforme feito por [Wortmann, 2003], o termo do segundo membro da equação (4.2) é, então, reescrito aplicando a derivada do produto no termo que tem o coeficiente K_z . Isto permite a simplificação do chamado problema auxiliar, cuja escolha é feita como procedimento de praxe no uso da GITT [Cotta e Mikhaylov, 1997], [Cotta, 1993]. Assim,

$$U(z) \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}(x, z)}{\partial z^2} + K_z' \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial z}. \quad (4.4)$$

Dividindo a equação anterior por K_z , teremos

$$\frac{U(z)}{K_z} \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial^2 \bar{c}(x, z)}{\partial z^2} + \frac{K_z'}{K_z} \frac{\partial \bar{c}(x, z)}{\partial z}. \quad (4.5)$$

[‡]tomando na equação (3.3) $x = z$, $p(x) = K_z$ e $q(x) = 0$, de forma a identificar o operador L^* aplicado à variável $\zeta_i(z)$ como sendo $\frac{d}{dz} \left[K_z \frac{d\zeta_i(z)}{dz} \right]$.

Desta forma, o novo problema de Sturm-Liouville é dado por

$$\zeta_i''(z) + \lambda_i^2 \zeta_i(z) = 0 \quad em \quad 0 < z < z_i, \quad (4.6)$$

e suas respectivas condições de contorno são

$$\zeta_i'(z) = 0 \quad em \quad z = 0 \quad e \quad z = z_i. \quad (4.6a)$$

A solução do problema auxiliar da equação (4.6) pode ser escrita [Özisik, 1974] como sendo

$$\zeta_i(z) = \cos(\lambda_i z), \quad (4.7)$$

onde λ_i são as raízes positivas da expressão $\text{sen}(\lambda_i z_i) = 0$. Assim $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_i = \frac{i\pi}{z_i}$.

Seguindo o formalismo da GITT, o primeiro passo é expandir a variável $\bar{c}(x, z)$ na seguinte forma

$$\bar{c}(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)} \zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.8)$$

Substituindo (4.8) em (4.4) tem-se

$$U(z) \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i'(x)} \zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}} = K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)} \zeta_i''(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}} + K'_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)} \zeta_i'(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}}, \quad (4.9)$$

onde ' e '' são usadas para indicar derivadas de primeira e segunda ordem, respectivamente.

O próximo passo é aplicar o operador $\int_0^{z_i} \frac{\zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}} dz$ na equação (4.9) e usar a equação (4.6) para concluir que $\zeta_i''(z) = -\lambda_i^2 \zeta_i(z)$. Assim

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \left[-\frac{\overline{c_j'(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^{z_i} U(z) \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz - \frac{\overline{c_j(x)} \lambda_j^2}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^{z_i} K_z \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz + \right. \\ \left. + \frac{\overline{c_j(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^{z_i} K'_z \zeta_i(z) \zeta_j'(z) dz \right] = 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Tomando:

$$Y(x) = \{\overline{c_j(x)}\},$$

$$B = \{ b_{i,j} \} \text{ onde } b_{i,j} = - \frac{\int_0^{z_i} U(z) \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}},$$

$$E = \{ e_{i,j} \} \text{ onde } e_{i,j} = \frac{\int_0^{z_i} K'_z \zeta_i(z) \zeta'_j(z) dz}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} - \frac{\lambda_j^2 \int_0^{z_i} K_z \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \quad e$$

$$F = B^{-1}E$$

onde as integrais em B e E são resolvidas numericamente via Quadratura de Gauss.

Assim, a equação (4.10) em notação matricial fica

$$Y'(x) + F.Y(x) = 0. \quad (4.11)$$

Para a condição de fonte da equação (4.2b), utiliza-se o mesmo procedimento aplicado anteriormente, ou seja, tomando

$$U(z) \bar{c}(0, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{U(z) \overline{c_i(0)} \zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}}, \quad (4.12)$$

e aplicando o operador $\int_0^{z_i} \frac{\zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}} dz$, resulta em

$$\int_0^{z_i} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{U(z) \overline{c_i(0)} \zeta_i(z) \zeta_j(z)}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} dz = \int_0^{z_i} \frac{Q \delta(z - H_s) \zeta_i(z) dz}{N_i^{\frac{1}{2}}}. \quad (4.13)$$

Assim, fazendo uso da equação (3.6) e executando as devidas substituições e integrações, a condição de fonte fica

$$\overline{c_0(0)} = \frac{\sqrt{z_i} Q \zeta_0(H_s)}{\int_0^{z_i} U(z) \zeta_0^2(z) dz} \text{ para } i = 0 \quad e \quad \overline{c_i(0)} = \frac{\sqrt{\frac{z_i}{2}} Q \zeta_i(H_s)}{\int_0^{z_i} U(z) \zeta_i^2(z) dz} \text{ para } i \neq 0. \quad (4.14)$$

e para U constante teremos

$$\overline{c_0(0)} = \frac{Q \zeta_0(H_s)}{U \sqrt{z_i}} \text{ para } i = 0 \quad e \quad \overline{c_i(0)} = \frac{Q \zeta_i(H_s)}{U \sqrt{\frac{z_i}{2}}} \text{ para } i \neq 0. \quad (4.15)$$

Finalmente,

$$Y(0) = \{ \overline{c_i(0)} \}. \quad (4.16)$$

O que foi apresentado até aqui segue o procedimento da GITT conforme [Cotta, 1993] e [Cotta e Mikhaylov, 1997]. Estes problemas transformados são resolvidos numericamente.

mente. Neste trabalho, esta equação matricial será resolvida analiticamente, por transformada de Laplace e diagonalização, seguindo a metodologia adotada em [Wortmann, 2003].

De acordo com a seção (3.2), a solução da equação (4.11) é

$$Y(x) = X.G(x).X^{-1}.Y(0). \quad (4.17)$$

Utiliza-se um procedimento alternativo para a inversão da matriz X , sugerido por [Segatto e Vilhena, 1999].

Inicialmente, é determinado o vetor ξ da seguinte forma

$$\xi = X^{-1}.Y(0). \quad (4.18)$$

Substituindo a equação (4.18) na (3.17) tem-se o resultado

$$\bar{Y}(s) = X.(sI + D)^{-1}.\xi. \quad (4.19)$$

Para determinar ξ , reescreve-se a equação (4.18) na forma

$$X.\xi = Y(0) \quad (4.20)$$

onde seus valores são calculados por decomposição LU, cujo custo computacional é menor que uma inversão de matrizes.

Logo a solução final passa a ser

$$Y(x) = X.G(x).\xi. \quad (4.21)$$

Utilizando a fórmula da inversa, dada pela equação (4.8), chega-se à solução final do problema proposto, onde $\zeta_i(z)$ é encontrada do problema de Sturm-Liouville fornecida pela equação (4.6) e $\overline{c_i(x)}$ resulta da solução do problema transformado dado pela equação (4.11), uma vez que $Y(x) = \{\overline{c_i(x)}\}$.

Nenhuma aproximação é feita durante a derivação da solução, e, assim, a equação (4.8) é exata exceto pelo erro de truncamento. Esta solução é válida para qualquer perfil de U , seja ele constante ou uma função dependente da altura.

CAPÍTULO 5

Validação do Modelo

5.1 Dados Experimentais

Para avaliar a performance do modelo, utilizam-se dados observados do experimento de Copenhagen, que é um experimento de fonte alta. Estes dados serão confrontados com os gerados pelo modelo.

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

$$\begin{aligned} \text{se } \frac{H_s}{z_i} < 0.1 & \quad , \text{ o experimento é considerado de fonte baixa;} \\ \text{se } \frac{H_s}{z_i} > 0.1 & \quad , \text{ o experimento é considerado de fonte alta.} \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \frac{z_i}{|L|} < 5 & \quad \text{tem-se convecção fraca;} \\ 5 < \frac{z_i}{|L|} < 10 & \quad \text{tem-se convecção moderada;} \\ \frac{z_i}{|L|} > 10 & \quad \text{tem-se convecção alta.} \end{aligned}$$

5.1.1 O Experimento de Copenhagen

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

O traçador foi abandonado sem empuxo a partir de uma torre com altura de 115m, sendo coletado ao nível do solo ($z = 0$), em unidades de amostragem localizadas em três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem foram posicionadas a

uma distância entre 2 a 6km, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente, como mostra a figura (5.1).

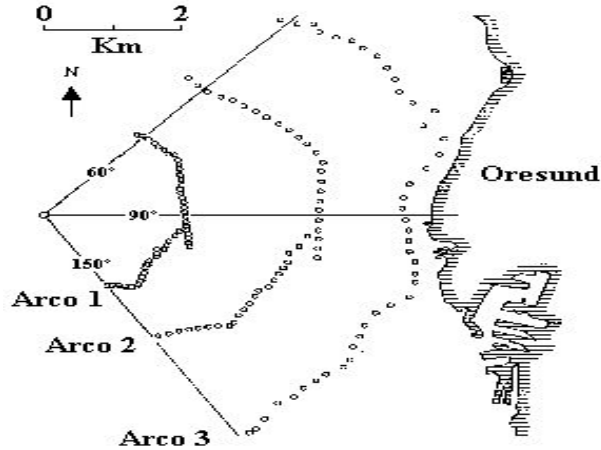


Figura 5.1 – Experimento de Copenhagen.

As liberações de SF_6 começaram uma hora antes do início da amostragem, onde o tempo médio das medidas foi de 1h. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de 0.6m.

A tabela (5.1) mostra os dados micrometeorológicos dos experimentos de dispersão na CLC de Copenhagen a serem utilizados no modelo dado pela equação (4.8).

Tabela 5.1 – Condições meteorológicas do experimento de Copenhagen
[Gryning et al., 1987]

Expt	U ($H_s=115m$) (ms^{-1})	U ($H_s=10m$) (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	w_* (ms^{-1})	z_i (m)	H_s/z_i	$z_i / L $
1	3,4	2,1	0,36	-37	1,8	1980	0,06	53,51
2	10,6	4,9	0,73	-292	1,8	1920	0,06	6,57
3	5,0	2,4	0,38	-71	1,3	1120	0,1	15,77
4	4,6	2,5	0,38	-133	0,7	390	0,29	2,93
5	6,7	3,1	0,45	-444	0,7	820	0,14	1,85
6	13,2	7,2	1,05	-432	2,0	1300	0,09	3,01
7	7,6	4,1	0,64	-104	2,2	1850	0,06	17,78
8	9,4	4,2	0,69	-56	2,2	810	0,14	14,46
9	10,5	5,1	0,75	-289	1,9	2090	0,06	7,23

5.2 Coeficientes de Difusão

Em problemas de difusão atmosférica, 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 que substitui um termo desconhecido. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros são calculados e relacionados ao entendimento da CLP.

Neste trabalho, utilizam-se três coeficientes de difusão turbulenta vertical válidos na CLC, sendo representados pelas equações (5.1), (5.2) e (5.4).

O primeiro coeficiente de difusão turbulento utilizado foi deduzido por Degrazia em 1997 [Degrazia et al., 1997], sendo este

$$\frac{K_z(z)}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{-\frac{4z}{z_i}} - 0.0003e^{\frac{8z}{z_i}}\right]. \quad (5.1)$$

A equação (5.1) é válida para grandes tempos de difusão.

Outro coeficiente de difusão turbulento $K_z(x, z)$ usado foi deduzido por [Degrazia et al., 2001] e é dado por

$$\frac{K_z(x, z)}{w_* z_i} = 0.12 \psi^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{-\frac{4z}{z_i}} - 0.0003e^{\frac{8z}{z_i}}\right]^{\frac{4}{3}} \int_0^\infty \frac{\text{sen} 3.17 \left[1 - e^{-\frac{4z}{z_i}} - 0.0003e^{\frac{8z}{z_i}}\right]^{\frac{-2}{3}} \psi^{\frac{1}{3}} X^* n'}{(1+n')^{\frac{5}{3}}} \frac{dn'}{n'}. \quad (5.2)$$

onde $X^* = \frac{xw_*}{U z_i}$ é uma distância adimensional, definida pelo raio do tempo de viagem $\frac{x}{U}$ pela escala de tempo convectiva $\frac{z_i}{w_*}$. w_* é a escala de velocidade convectiva e n' é uma frequência adimensional.

A função taxa de dissipação molecular ψ é descrita como

$$\psi^{\frac{1}{3}} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{\frac{-2}{3}} + 0.75\right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.3)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov.

O limite assintótico do coeficiente de difusão da equação (5.2) é dado por

$$\frac{K_z(z)}{w_* z_i} = 0.19 \psi^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{-\frac{4z}{z_i}} - 0.0003e^{\frac{8z}{z_i}}\right]^{\frac{4}{3}}. \quad (5.4)$$

A equação (5.2), dependente da distância da fonte, é válida para perto da fonte e

distâncias intermediárias. O limite assintótico, dado pela equação (5.4), é válido para longe da fonte (grandes tempos de difusão).

Os respectivos valores e detalhes físicos das grandezas, anteriormente abordados (equações (5.1), (5.2) e (5.4)), fogem ao escopo deste trabalho, mas podem ser encontrados em [Degrazia et al., 1997] e [Degrazia et al., 2001]. Estes coeficientes de difusão são construídos a partir da teoria da difusão estatística de Taylor e pelo emprego do espectro de energia cinética turbulenta.

Na figura (5.2), apresentam-se os perfis dos três coeficientes de difusão representados pelas equações (5.1), (5.2), (5.4).

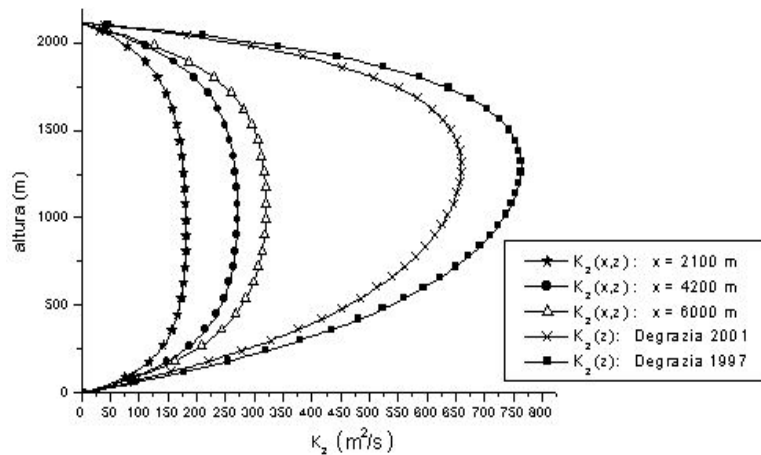


Figura 5.2 – Perfil dos coeficientes de difusão em função da altura com dados experimentais de Copenhagen.

O coeficiente difusivo $K_z(x, z)$, dado pela equação (5.2), é aplicado para cada valor x , ou seja, no integrando fixa-se a distância x pretendida e realiza-se uma interpolação polinomial em z através do método de Newton.

Os três coeficientes de difusão são introduzidos no modelo (equação (4.8)) para que se possa calcular a concentração de poluentes ao nível do solo.

5.3 Índices Estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados no experimento de Copenhagen é realizada através de índices estatísticos presentes na literatura.

Para a elaboração desta análise estatística, emprega-se um programa desenvolvido por Hanna em 1989 [Hanna, 1989]. Estes índices estatísticos são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental Americana (USEPA), pela Força Aérea Americana (US Air Force), pelo Instituto Americano do Petróleo (API), bem como pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera após o Workshop "Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessments in Europe", realizado na Bélgica em 1994.

As notações utilizadas para os índices o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas e preditas, \bar{C} é a concentração de poluentes, e σ é o desvio padrão.

Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

1. Erro quadrático médio normalizado: $Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p}$
informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.
2. Coeficiente de correlação: $Cor = \frac{\overline{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p}$
descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para um boa performance, o seu valor deve ser 1.
3. Fator de dois: $Fa2$
fração de dados (%) que estão entre $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$
4. Fração de Inclinação: $Fb = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0,5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)}$
informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.
5. Desvio fracional padrão: $Fs = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}$
O valor ótimo é zero.

CAPÍTULO 6

Resultados

Neste capítulo, apresentam-se os resultados numéricos e estatísticos obtidos nas simulações do modelo representado pela equação (4.8). Para a obtenção da concentração de poluentes, os dados micrometeorológicos do experimento de Copenhague (seção 5.1.1) e três parametrizações turbulentas (seção 5.2) foram utilizados. A comparação entre os resultados obtidos através da GILTT é feita com dados experimentais e com os resultados obtidos por [Moreira, 1999] e [Degrazia et al., 2001].

Para a obtenção dos resultados numéricos, utilizou-se computação simbólica. Todas as simulações foram feitas em um microcomputador PENTIUM III 750 MHz com 64 MB de memória RAM. Para estas simulações, o perfil de vento U foi tomado constante e é dado na tabela (5.1), embora as soluções admitam uma variação do mesmo com a altura.

Primeiramente, foram utilizados os dados do experimento nove de Copenhague para verificar o comportamento da concentração de poluentes ao nível do solo. Para tanto, foram escolhidos 150 autovalores, e a concentração de poluentes foi avaliada de 5 em 5. Na tabela (6.1), mostra-se o comportamento dos resultados como uma função da soma dos autovalores N , da concentração de poluentes normalizada pela taxa de emissão Q em diferentes distâncias da fonte. A seguir, observa-se pela figura (6.1) uma convergência numérica dos resultados da concentração de poluentes, obtidos na tabela (6.1), com o aumento do número de autovalores N .

Na figura (6.2), mostra-se o gráfico do tempo de processamento em função do número de autovalores para o cálculo da concentração de poluentes.

Nas tabelas (6.2), (6.3) e (6.4), respectivamente, encontram-se as concentrações superficiais integradas lateralmente para os nove experimentos de Copenhague. As concen-

Tabela 6.1 – Comportamento da concentração para o experimento 9 de Copenhagen utilizando a equação (5.1)

N	x=2100m	x=2400m	x=6000m
5	0,000377650	0,000253846	0,000202018
10	0,000452964	0,000287986	0,000222102
15	0,000477731	0,000300683	0,000229864
20	0,000481429	0,000305062	0,000232740
25	0,000479521	0,000307094	0,000234311
30	0,000479312	0,000309077	0,000235691
35	0,000482469	0,000311634	0,000237293
40	0,000487491	0,000314332	0,000238848
45	0,000492085	0,000316687	0,000240212
50	0,000494799	0,000318343	0,000241179
55	0,000495580	0,000319385	0,000241844
60	0,000495386	0,000320071	0,000242307
65	0,000495366	0,000320732	0,000242750
70	0,000496159	0,000321516	0,000243227
75	0,000497672	0,000322422	0,000243755
80	0,000499324	0,000323299	0,000244250
85	0,000500527	0,000324028	0,000244674
90	0,000501049	0,000324550	0,000244989
95	0,000501096	0,000324932	0,000245238
100	0,000501102	0,000325273	0,000245458
105	0,000501420	0,000325667	0,000245701
110	0,000502116	0,000326125	0,000245966
115	0,000502983	0,000326607	0,000246240
120	0,000503711	0,000327034	0,000246483
125	0,000504110	0,000327370	0,000246684
130	0,000504212	0,000327619	0,000246839
135	0,000504224	0,000327837	0,000246979
140	0,000504373	0,000328074	0,000247124
145	0,000504455	0,000328357	0,000247291
150	0,000504479	0,000328666	0,000247466

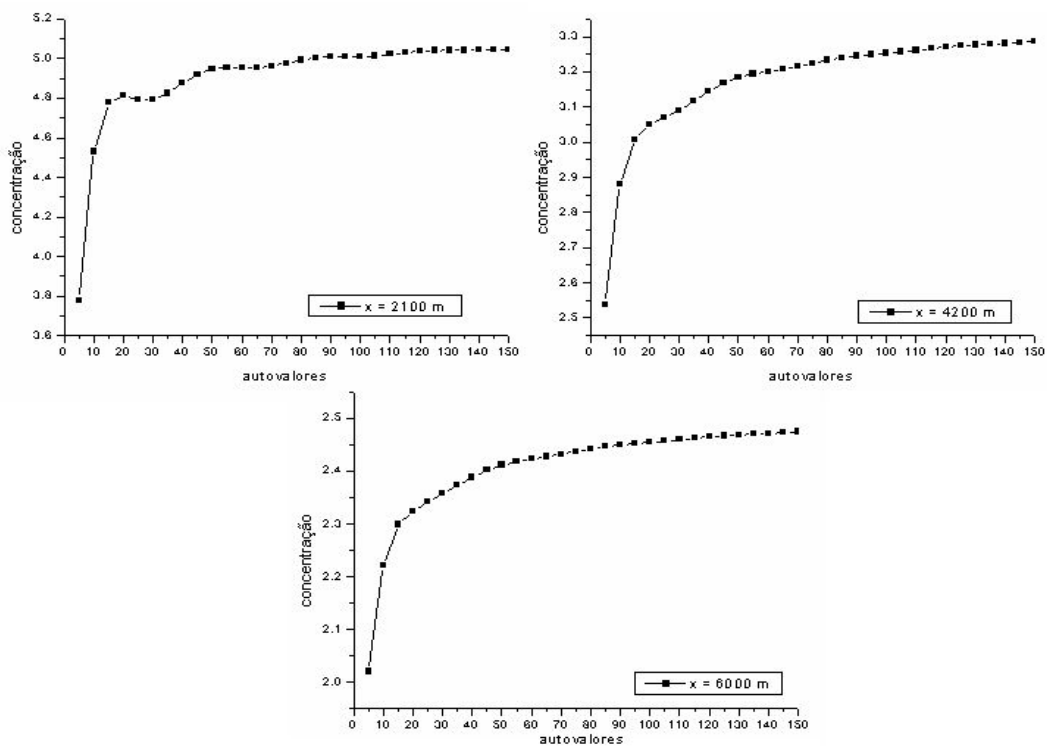


Figura 6.1 – Convergência numérica da concentração de poluentes utilizando a equação (5.1)

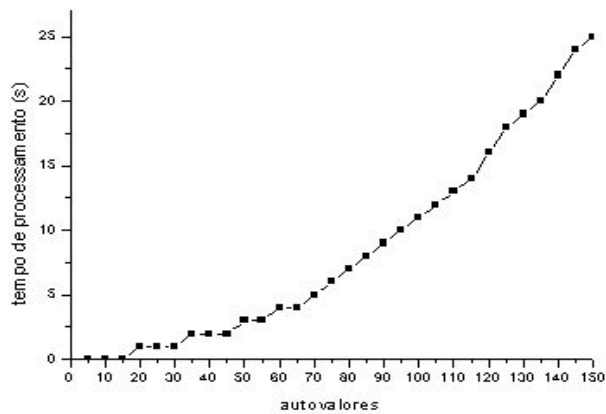


Figura 6.2 – Tempo de processamento em função do número de autovalores

Tabela 6.2 – Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen utilizando a equação (5.1) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $\bar{c}(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.

Expt	Dist. (m)	Dados - C_o ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	GILTT - C_p ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	[Moreira, 1999] - C_p ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)
1	1900	6,48	7,65043	7,16
	3700	2,31	4,50890	3,95
2	2100	5,38	5,23717	4,05
	4200	2,95	3,41317	2,87
3	1900	8,20	9,21936	7,86
	3700	6,22	5,97158	5,12
	5400	4,30	4,74508	3,78
4	4000	11,66	11,1931	9,04
5	2100	6,72	9,82700	7,18
	4200	5,84	7,66664	6,08
	6100	4,97	6,20676	5,04
6	2000	3,96	4,00187	2,97
	4200	2,22	2,82775	2,30
	5900	1,83	2,24403	1,86
7	2000	6,70	5,23744	4,42
	4100	3,25	3,09964	2,71
	5300	2,23	2,53198	2,14
8	1900	4,16	5,52323	4,70
	3600	2,02	3,85524	3,23
	5300	1,25	3,26302	2,50
9	2100	4,58	5,01102	3,91
	4200	3,11	3,25273	2,75
	6000	2,59	2,45458	1,00

trações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $\bar{c}(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente. Os resultados obtidos utilizando a GILTT são confrontados com os resultados experimentais e com os obtidos por [Moreira, 1999] e [Degrazia et al., 2001].

Analisando-se as tabelas (6.2), (6.3) e (6.4), verifica-se uma boa concordância dos resultados do modelo com os dados experimentais. É necessário salientar que os resultados obtidos utilizando o coeficiente de difusão dependente da distância da fonte (eq. (5.2)) estão mais próximos dos dados obtidos experimentalmente.

A tabela (6.5) apresenta o resultado dos índices estatísticos, obtidos pela GILTT

Tabela 6.3 – Concentrações superficiais integradas lateralmente (Cp) para o experimento de Copenhagen utilizando a equação (5.4) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $\bar{c}(x, 0)/Q$, e Co representa as concentrações observadas experimentalmente.

Expt	Dist. (m)	Dados - Co ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	GILTT - Cp ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	[Degrazia et al., 2001] - Cp ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)
1	1900	6,48	6,06647	5,37
	3700	2,31	3,74246	3,12
2	2100	5,38	3,62174	3,16
	4200	2,95	2,28186	1,84
3	1900	8,20	7,35706	6,53
	3700	6,22	4,95098	3,99
	5400	4,30	4,18687	3,31
4	4000	11,66	10,5612	7,96
5	2100	6,72	7,91977	7,12
	4200	5,84	5,60219	4,58
	6100	4,97	4,74142	3,74
6	2000	3,96	2,94586	2,58
	4200	2,22	1,90553	1,53
	5900	1,83	1,56817	1,24
7	2000	6,70	3,88365	3,39
	4100	3,25	2,35772	1,89
	5300	2,23	1,98998	1,59
8	1900	4,16	4,61773	4,11
	3600	2,02	3,39254	2,70
	5300	1,25	3,06304	2,37
9	2100	4,58	3,44453	2,96
	4200	3,11	2,15113	1,73
	6000	2,59	1,69026	1,34

Tabela 6.4 – Concentrações superficiais integradas lateralmente (C_p) para o experimento de Copenhagen utilizando a equação (5.2) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações de poluente são normalizadas pela taxa de emissão $\bar{c}(x, 0)/Q$, e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.

Expt	Dist. (m)	Dados - C_o ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	GILTT - C_p ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	[Degrazia et al., 2001] - C_p ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)
1	1900	6,48	7,10598	8,33
	3700	2,31	3,20682	4,53
2	2100	5,38	4,36514	4,28
	4200	2,95	2,62837	2,56
3	1900	8,20	8,42979	8,67
	3700	6,22	5,35316	5,32
	5400	4,30	4,37974	3,99
4	4000	11,66	10,6759	8,97
5	2100	6,72	7,05913	7,55
	4200	5,84	6,13991	5,64
	6100	4,97	5,03336	4,43
6	2000	3,96	3,48209	3,22
	4200	2,22	2,15272	2,02
	5900	1,83	1,72497	1,58
7	2000	6,70	5,62368	4,91
	4100	3,25	2,66422	2,73
	5300	2,23	2,20235	2,21
8	1900	4,16	5,14635	5,30
	3600	2,02	2,58031	3,35
	5300	1,25	2,11062	2,60
9	2100	4,58	4,77552	4,19
	4200	3,11	2,80212	2,48
	6000	2,59	2,11062	1,80

Tabela 6.5 – Avaliação estatística do modelo

Modelos	NMSE	COR	FA2	FB	FS
(eq. (5.1)) GILTT	0,06	0,92	1,00	-0,14	-0,02
(eq. (5.1)) [Moreira, 1999]	0,06	0,92	1,00	0,06	0,19
(eq. (5.4)) GILTT	0,07	0,90	1,00	0,09	0,09
(eq. (5.4)) [Degrazia et al., 2001]	0,16	0,89	1,00	0,28	0,27
(eq. (5.2)) GILTT	0,02	0,97	1,00	0,01	0,05
(eq. (5.2)) [Degrazia et al., 2001]	0,06	0,89	1,00	0,03	0,10

e comparados com os obtidos em [Moreira, 1999] e [Degrazia et al., 2001]. Observa-se, nos resultados obtidos pela GILTT, um erro quadrático médio (Nmse) baixo, coeficiente de correlação (Cor) alto (em torno de 90 %) e um fator de dois (Fa2) de 100 %, indicando bons resultados.

Novamente os dados obtidos com o coeficiente de difusão dependente da distância da fonte se mostraram melhores, pois apresentam os menores NMSE, FB e FS (próximos de zero), FA2 igual a 1 e COR muito próximo de 1 .

A seguir, nas figuras (6.3 a)), (6.3 b)) e (6.3 c)), apresentam-se, respectivamente, os gráficos de espalhamento, onde temos as concentrações observadas experimentalmente em função das preditas pelo modelo, utilizando-se os coeficientes de difusão dados pelas equações (5.1), (5.4) e (5.2). Os resultados foram obtidos com $N=100$ autovalores. Juntamente aos gráficos de espalhamento obtidos pela GILTT, têm-se os gráficos obtidos em [Moreira, 1999] e [Degrazia et al., 2001] com os mesmos coeficientes difusivos.

Normalmente, na análise de gráficos de espalhamento, introduz-se uma reta formando um ângulo de 45° com a linha vertical e horizontal para a melhor visualização da concordância dos resultados. Quanto mais próximos estiverem os resultados desta reta, melhores os resultados. As demais retas indicam o fator de dois (FA2), ou seja, se todos os dados obtidos estão entre estas retas tem-se um FA2 igual a 1 (100 %).

Observa-se pelo gráfico de espalhamento das figuras (6.3 a)), (6.3 b)) e (6.3 c)) uma boa concordância dos resultados obtidos com a GILTT quando usam-se como coeficientes de difusão as equações (5.1), (5.4) e (5.2) para os nove experimentos de Copenhagen. Mais uma vez, pode-se notar que os melhores resultados foram encontrados utilizando a equação (5.2).

É muito importante ter conhecimento da distância da fonte onde ocorre a concentração máxima de poluentes. Para isto, analisam-se a seguir os gráficos da concentração ao

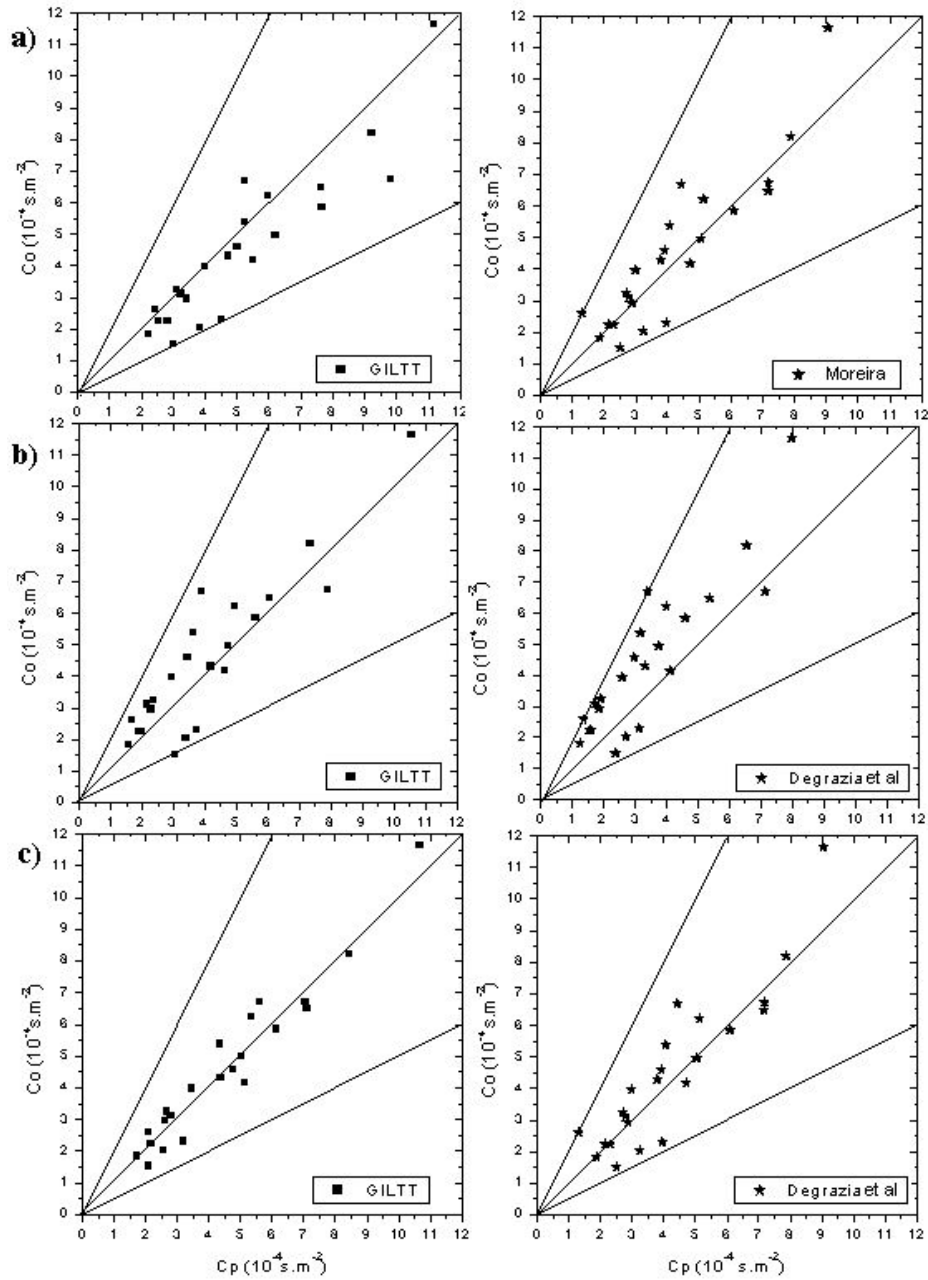


Figura 6.3 – Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observados experimentalmente de concentração (Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo (Cp) utilizando: **a)** equação (5.1), **b)** equação (5.4) e **c)** equação (5.2).

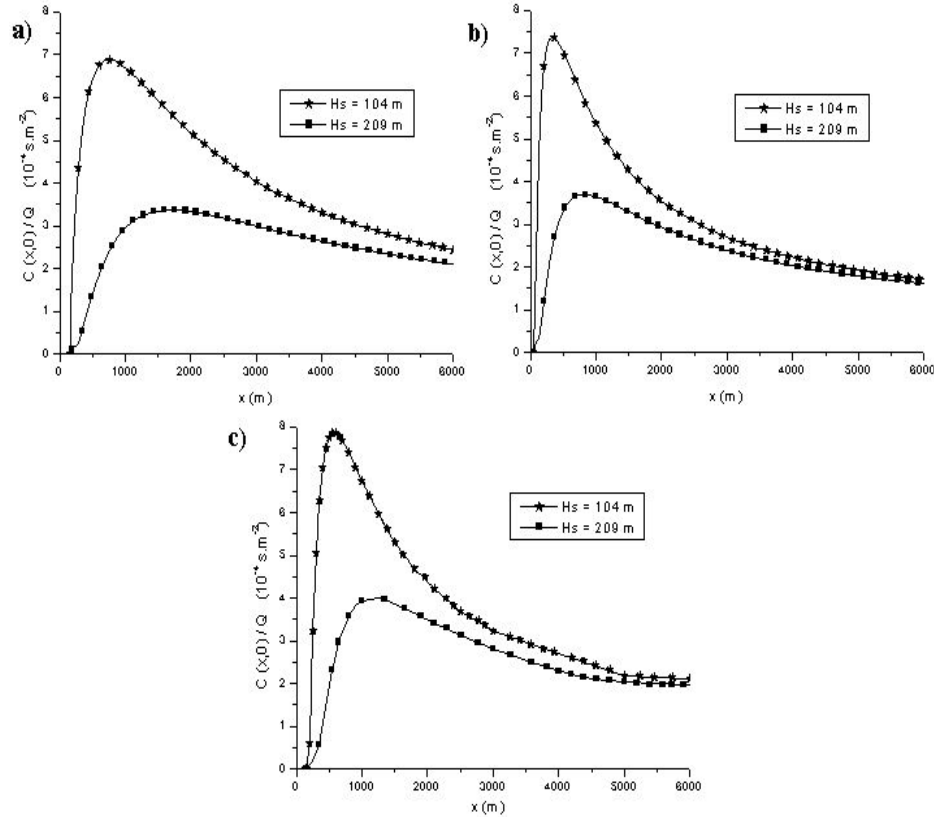


Figura 6.4 – Gráfico da concentração superficial em função da posição para o experimento de Copenhagen utilizando: **a)** equação (5.1), **b)** equação (5.4) e **c)** equação (5.2).

nível do solo ($z/z_i = 0$) em função da posição para duas diferentes alturas de fonte ($H_s=104\text{m}$ e $H_s=209\text{m}$). Os resultados foram obtidos para 30 autovalores e utilizou-se o experimento nove de Copenhagen.

Na figura (6.4 a)), encontra-se o gráfico da concentração de poluentes em função da distância, empregando-se no modelo a equação (5.1). Para a altura $H_s=104\text{m}$, é verificado um pico acentuado na área próxima à fonte. Com o crescimento da altura da fonte, observam-se um decaimento do pico e uma diferente localização do mesmo. Nas figuras (6.4 b)) e (6.4 c)), percebe-se um comportamento análogo ao da figura (6.4a)).

A seguir, nas figuras (6.5 a)), (6.5 b)) e (6.5 c)), apresentam-se os perfis verticais de concentração (normalizados pela taxa de emissão de poluentes Q) para as distâncias ($x = 2000\text{m}$, $x = 4000\text{m}$ e $x = 6000\text{m}$), considerando o experimento nove de Copenhagen.

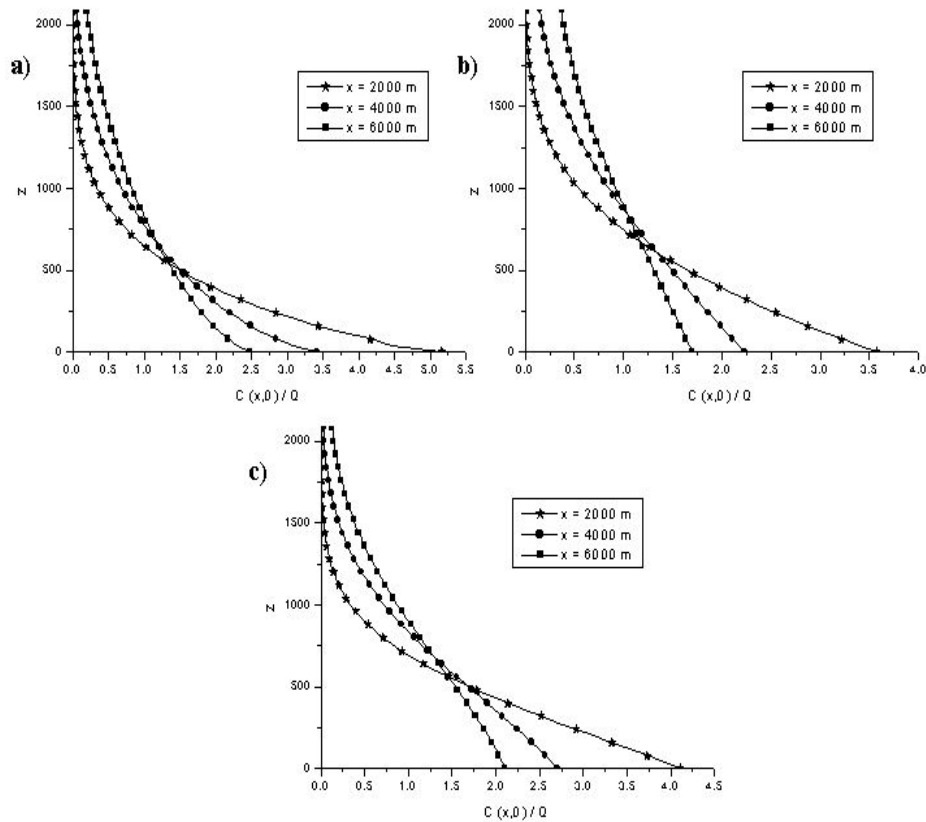


Figura 6.5 – Gráfico da altura em função da concentração superficial para o experimento de Copenhagen utilizando: **a)** equação (5.1), **b)** equação (5.4) e **c)** equação (5.2).

Os poluentes foram emitidos por uma fonte aérea de altura $H_s=150$ m. Fez-se uso de 150 autovalores para a obtenção da concentração.

Estes gráficos apresentam valores maiores de concentração para distâncias menores, e menores com o crescimento da distância. Além disso, com o crescimento da distância, há uma tendência à obtenção de um perfil homogêneo de concentração.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Para compreender melhor a importância de pesquisar a solução analítica da equação de advecção-difusão, a fim de simular a dispersão de poluentes na CLP, deve-se procurar as possíveis fontes de erro tanto no modelo quanto na simulação numérica da concentração do poluente. É necessário recordar que a equação de advecção-difusão discutida é uma descrição matemática dos fenômenos físicos da dispersão de contaminantes na CLP, supondo o modelo da teoria-K (primeira ordem de fechamento) para a turbulência, velocidade do vento e coeficientes de difusão turbulenta vertical propostos por [Degrazia et al., 1997] e [Degrazia et al., 2001]. Além destas incertezas e também da compreensão incompleta dos fenômenos da turbulência, tem-se que fazer um exame do erro inerente ao método matemático adotado para resolver a equação da advecção-difusão. Aparece aqui a relevância da solução analítica. Certamente, tendo em mente a exatidão da solução analítica, pode-se dizer que o cálculo da concentração do poluente por este tipo de solução está livre do erro à exceção do erro de truncamento. Conseqüentemente, o erro neste trabalho fica restrito às incertezas impostas ao modelo.

Agora se está em posição de comentar algumas vantagens adicionais da solução analítica. Primeiramente, é possível controlar, pela metodologia proposta, a exatidão dos resultados, controlando o número de termos do somatório na equação (4.8) (fórmula da inversa da GITT). Esta afirmativa é confirmada pelos resultados descritos na tabela (6.1). Aumentando o número de termos do somatório na solução da série, observa-se um aumento da coincidência do número de dígitos significativos entre as soluções com o número dos termos do somatório diferindo pela unidade. Além disso, analisando os resultados da tabela (6.5), verifica-se, como esperado, que uma boa concordância, sob o ponto de vista estatístico,

é conseguida entre os resultados semi-analíticos (técnica da transformada de Laplace) e analíticos (da aproximação via GILTT) quando comparados com os dados experimentais.

Finalmente, focaliza-se a atenção futura para as melhorias do modelo. Inicialmente, deve-se procurar outras condições de estabilidade e parametrizações da turbulência. A equação tridimensional de advecção-difusão também será resolvida por esta metodologia.

Concluindo, por estes procedimentos, esperando de algum modo ter aliviado as incertezas discutidas anteriormente, pretendeu-se mostrar a aptidão do método analítico proposto para resolver problemas físicos realísticos da dispersão de poluentes na CLP.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

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

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

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

Caughey, S. J. and Palmer, S. G., 1979. "Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer", **Quart. J. Roy. Meteor. Soc.**, vol. 105, pp. 811–827.

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

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

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

Deardorff, J. M., 1972. "Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers", **J. Atmos. Sci.**, vol. 29, pp. 91–115.

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

Degrazia, G. A., Moraes, O., and Oliveira, A. P., 1995. "An analytical formulation for mixing length scales in a convective PBL", 21th **Int. Technical Meeting on Air Pollution and its Application, 6-10 Nov. , Baltimore.**

Degrazia, G. A., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2001. "Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer", **Journal of Applied Meteorology**, pages 1233–1240.

Degrazia, G. A., Velho, H. F. C., and Carvalho, J. C., 1997. "Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties", **Contributions to Atmosph. Phys.**, pages 57–64.

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

Driedonks, A. G. and Tennekes, H., 1984. "Entrainment effects in the well-mixed atmospheric boundary layer", **Boundary Layer Meteorology**, vol. 30, pp. 75–105.

Gryning, S., Holtslag, A., Irwing, J., and Silversten, B., 1987. "Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters", **Atmospheric Environment**, vol. 21(1), pp. 79–89.

Gryning, S. E. and Lyck, E., 1984. "Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations", **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 23(4), pp. 651–660.

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

Kaimal, J. C. and Wyngaard, J. C., 1976. "Turbulence structure in the convective boundary layer", **J. Atmos. Sci.**, vol. 33, pp. 2152–2169.

Koch, W., 1989. "A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption", **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1729–1732.

Lamb, R. G., 1978. "A numerical study of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 1297–1304.

Lamb, R. G., 1982. "**Diffusion in the convective boundary layer**". Atmospheric Turbulence and air Pollution Modelling, F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, Eds., Reidel.

Lin, J. S. and Hildeman, L. M. A., 1997. "A generalized mathematical scheme to analitically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition", **Atmospheric Environment**, vol. 31, pp. 59–71.

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

Moreira, D., 1996. "**Comparação entre um modelo gaussiano atualizado e a equação de difusão no cálculo da concentração superficial de poluentes na camada limite convectiva: o caso de fontes pontuais contínuas elevadas**", Dissertação de mestrado, Mestrado em Física, UFSM.

Moreira, D., 1999. "**Modelo Euleriano semi-analítico de dispersão turbulenta de contaminantes**", Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Moreira, D., Degrazia, G., and Vilhena, M., 1999. "Dispersion from low sources in a convective boundary layer: An analytical model", **Nuovo Cimento**, vol. 22C, pp. 685–691.

Moura, A., 1999. "**Modelos Multidimensionais Analíticos de Dispersão de Contaminantes na Atmosfera: Coeficientes de Difusão Dependentes da Distância da Fonte**", Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Moura, A., Vilhena, M., and Degrazia, G., 1995. "Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável", **Proceedings of COBEM**.

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

Nieuwstadt, F. T. M. and Haan, B. J., 1981. "An analytical solution of the one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation", **Atmospheric Environment**, vol. 15, pp. 845–851.

Nieuwstadt, F. T. M. and Van Ulden, A. P., 1978. "A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 2119–2124.

Özisik, M., 1974. "**Heat Conduction**". John Wiley & Sons, New York, 2 edition.

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

Pasquill, F., 1974. "**Atmospheric Diffusion**". John Wiley & Sons, New York, 2 edition.

Pires, C., 1996. "**Um estudo analítico de dispersão de contaminantes abandonados por fontes aéreas em uma camada limite convectiva**", Dissertação de mestrado, Curso de Pós Graduação em Sensoriamento Remoto.

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

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

Roberts, O. F. T., 1923. "The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere", **Proc. Roy. Soc.**, vol. 104, pp. 640–648.

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

Scriven, R. A. and Fisher, B. A., 1975. "The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II - The effect of turbulent diffusion", **Atmospheric Environment**, vol. 9, pp. 59–65.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T., 1999. "The state of art of the LTS_N method", **Proceedings of Mathematics and Computational Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications**, pages 1618–1631.

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

Storch, R. and Pimentel, L., 2003. "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.

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

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

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

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

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

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

Velloso, M., Barbarioli, A., Guerrero, J., and Pimentel, L., 2003. "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.

Vilhena, M., Rizza, U., Degrazia, G., Mangia, C., Moreira, D., and Tirabassi, T., 1998. "An analytical air pollution model: Development and evaluation", **Contrib. Atmos. Phys.**, vol. 71, pp. 315–320.

Weil, J. C. and Brower, R. P., 1984. "An update gaussian plume model for tall stacks", **JAPCA**, vol. 34, pp. 818–827.

Willis, G. E. and Deardorff, J. W., 1976. "A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer", **Quart. J. R. Met. Society**, vol. 102, pp. 427–445.

Wortmann, S., 2003. "**Formulação Semi-analítica para a Equação Transformada Resultante da Aplicação da GITT em Problemas Difusivos-Advectivos**", Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

Wortmann, S., Moura, A., and Vilhena, M. T., 2000. "Solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável", **Anais ENCIT**.

Wortmann, S., Vilhena, M. T., Moreira, D., and Buske, D., 2004. "A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL", **Aceito para publicação na revista Atmospheric Environment**.

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

APÊNDICE I

A New Analytical Approach to Simulate the Pollutant Dispersion in the PBL

Artigo aceito para publicação na revista Atmospheric Environment.

Authors: *Wortmann¹, S., Vilhena¹, M.T., Moreira², D.M. and Buske¹, D.*

1 Universidade Federal do Rio Grande do Sul, PROMEC, Porto Alegre, RS, Brasil.

2 Universidade Luterana do Brasil, Engenharia Ambiental, Canoas, RS, Brasil.

Abstract: In this work we present a new analytical approach for the solution of the advection-diffusion equation to simulate the pollutant dispersion in the Planetary Boundary Layer. In this method the advection-diffusion equation after transformation by a generalized integral transform is solved by the Laplace Transform technique with analytical inversion and is seen to be non-Gaussian. No approximation is made in this so that an exact solution is obtained except for the round-off error. The present model has been evaluated in moderately unstable conditions using the Copenhagen experiment. The performance of the model is discussed qualitatively as well as quantitatively. The proposed model has performed very well with the data from the diffusion experiment considered.

Keywords: GITT; Laplace Transform; Atmospheric Dispersion; Analytical Solution; Advection-Diffusion Equation; Planetary Boundary Layer.

I.1 Introduction

In the last years, special attention has been devoted to the task of searching analytical solution for the advection-diffusion equation in order to simulate the pollutant dispersion

in the Planetary Boundary Layer (PBL). Presently, analytical solutions of the advection-diffusion equation are usually obtained just for stationary conditions and by making strong assumptions about the eddy diffusivity coefficients (K) and wind speed profiles (U). They are assumed as constant along the whole PBL or following a power law (*van Ulden, 1978; Pasquill and Smith, 1983; Seinfeld, 1986; Tirabassi et al., 1986; Sharan et al., 1996*). Despite the U and K profiles are not physically realistic, these solutions are widely used for regulatory applications, because they can give in general, a qualitative description of diffusion processes within the PBL and the computer codes do not need prohibitive computational resources. Furthermore, these classes of solutions, being the influencing parameters explicitly expressed in a mathematical closed form, allow in general a deep sensitivity analysis over model parameters.

In the framework of a semi-analytical solution, for sake of illustration, we mention the work of *Moreira et al. (1999)* which solves the advection-diffusion equation by the Laplace Transform technique with numerical inversion. For more details see the works of *Vilhena et al. (1998)* and *Degrazia et al. (2001)*. Focusing our attention in this direction, in this work we take a step forward, reporting an analytical solution for the advection-diffusion equation applying the Generalized Integral Transform Technique (GITTT approach) (*Cotta and Mikhaylov, 1997*). In addition, we solve the resulting transformed ordinary differential equation, also analytically, by the Laplace Transform technique. At this point, it is relevant to underline the meaning of analyticity, that is to say that no approximation is made in deriving the solution. Therefore, we have a certain confidence that the analytical solution is an exact solution except for round-off error. The main feature of the GITTT method (*Cotta and Mikhaylov, 1997*) involves the steps: solution of an associated Sturm-Liouville problem, expansion of the pollutant concentration in a series in terms of the given eigenfunction, replacement of this expansion in the advection-diffusion equation and, finally, taking moments. This procedure leads to a set of differential ordinary equations, named the transformed equations. These equations are then solved, following the idea of *Wortmann (2003)*, by the application the Laplace Transform technique. In our knowledge the novelty of this approach consists in the use, for the first time, of the Laplace Transform technique to solve analytically the GITTT transformed advection-diffusion equation. Therefore we call this technique the GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique). Indeed, we

may affirm that with this procedure, the GILTT method becomes an analytical approach in the sense that it solves analytically the advection-diffusion equation. We outline the results as follows: in section 2, we describe in detail the derivation of the GILTT solution for the two-dimensional advection-diffusion equation; in section 3, the turbulent parameterisation assumed in this work is presented; in section 4, the numerical results given by the new analytical method are announced as well as the comparison with experimental data; finally, in section 5, the principal aspects

I.2 The model and the GILTT solution

Considering a Cartesian coordinate system in which the x axis coincides with the direction of the average wind and z is the vertical axis, the time dependent advection-diffusion equation can be written as (*Blackadar, 1997*):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right), \quad (\text{I.1})$$

where C denotes the average concentration, U is the mean wind speed in x direction and K_x , K_y and K_z are the eddy diffusivities. The crosswind integration of the equation (I.1) (in stationary conditions and neglecting the longitudinal diffusion) leads to:

$$U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right), \quad (\text{I.2})$$

subject to the boundary conditions of zero flux at the ground and PBL top, and a source with emission rate Q at height H_s :

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{at} \quad z = 0, \quad z_i \quad (\text{I.3})$$

$$U \bar{c}(0, z) = Q \delta(z - H_s) \quad \text{at} \quad x = 0 \quad (\text{I.4})$$

where now \bar{c} represents the average crosswind integrated concentration and z_i is the unstable boundary layer height.

The diffusive term in the equation (I.2) is rewrite using the chain rule. This procedure was used by *Wortmann (2003)* and allow the simplification of the auxiliary problem, whose choice is made as custom procedure in the use of GITT according to *Cotta and*

Mikhaylov (1997). Then, we can be write:

$$U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}. \quad (\text{I.5})$$

The formal application of GITT begins with the choice of the problem of associated eigenvalue (also known in the literature as auxiliary problem) and their respective boundary conditions:

$$\zeta_i''(z) + \lambda_i^2 \zeta_i(z) = 0 \quad \text{at} \quad 0 < z < z_i, \quad (\text{I.6})$$

$$\zeta_i'(z) = 0 \quad \text{at} \quad z = 0, z_i. \quad (\text{I.7})$$

The solution is $\zeta_i(z) = \cos(\lambda_i z)$, where λ_i are the positive roots of the expression $\sin(\lambda_i z) = 0$. Then, $\lambda_0 = 0$ and $\lambda_i = i\pi/z_i$. It is observed that the functions $\zeta_i(z)$ and λ_i , known respectively, as the eigenfunctions and eigenvalues associated to the problem of Sturm-Liouville, satisfy the following orthonormality condition:

$$\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}} N_n^{\frac{1}{2}}} \int_v \zeta_m(z) \zeta_n(z) dv = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}$$

where N_m is given by:

$$N_m = \int_v \zeta_m^2(z) dv. \quad (\text{I.8})$$

Following the formalism of GITT, the first step is to expand the variable $\bar{c}(x, z)$ in the following form:

$$\bar{c}(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)} \zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}}. \quad (\text{I.9})$$

Substituting the Eq. (I.9) in Eq. (I.5) it is obtained:

$$U \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i'(x)} \zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}} = K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)} \zeta_i''(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}} + K_z' \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)} \zeta_i'(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}}, \quad (\text{I.10})$$

where ' and '' are used to indicate derived of first and second order, respectively.

The next step is to apply the operator $\int_0^{z_i} \frac{\zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}} dz$ in the Eq. (I.10) and to use the

Eq. (I.6) to end that $\zeta_i''(z) = -\lambda_i^2 \zeta_i(z)$. Recall that $\zeta = \zeta_i(z)$ and $K_z = K_z(z)$. Then:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \left[-\frac{\overline{c_j'(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^{z_i} U \zeta_i \zeta_j dz - \frac{\overline{c_j(x)} \lambda_j^2}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^{z_i} K_z \zeta_i \zeta_j dz + \right. \\ \left. + \frac{\overline{c_j(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^{z_i} K'_z \zeta_i \zeta_j' dz \right] = 0. \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

now, taking: $Y(x) = \{\overline{c_j(x)}\}$; $F = B^{-1}E$; $B = \{b_{i,j}\}$; $E = \{e_{i,j}\}$

where $b_{i,j} = -\frac{\int_0^{z_i} U \zeta_i \zeta_j dz}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}}$, $e_{i,j} = \frac{\int_0^{z_i} K'_z \zeta_i \zeta_j' dz}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} - \frac{\lambda_j^2 \int_0^{z_i} K_z \zeta_i(z) \zeta_j(z) dz}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}}$.

The Eq. (I.11) in notation matricial it is:

$$Y'(x) + F.Y(x) = 0. \quad (\text{I.12})$$

For the boundary condition of Eq. (I.4):

$$U\overline{c}(0, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{U \overline{c_i(0)} \zeta_i}{N_i^{\frac{1}{2}}},$$

and applying the operator: $\int_0^{z_i} \frac{\zeta_i}{N_i^{\frac{1}{2}}} dz$ results:

$$\int_0^{z_i} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{U \overline{c_i(0)} \zeta_i \zeta_j}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} dz = \int_0^{z_i} \frac{Q \delta(z - H_s) \zeta_i dz}{N_i^{\frac{1}{2}}}.$$

Then, using the Eq. (I.6) and executing the due substitutions and integrations the boundary condition is:

$$\begin{aligned} c_0(0) &= \frac{Q\zeta_0(H_s)}{U\sqrt{z_i}} \text{ for } i = 0 \text{ e} \\ c_i(0) &= \frac{Q\zeta_i(H_s)}{U\sqrt{\frac{z_i}{2}}} \text{ for } i \neq 0. \end{aligned}$$

The transformed problem represented by the Eq. (I.12) will be solved for Laplace Transform technique and diagonalization (Segatto et al., 1999; Wortmann, 2003). Firstly, transforming x in s and Y em the equation becomes:

$$s\overline{Y}(s) - Y(0) + F.\overline{Y}(s) = 0 \quad (\text{I.13})$$

where the overbar represents the transformed potential. The matrix F is decomposed in eigenvectors and eigenvalues as:

$$F = X.D.X^{-1}, \quad (\text{I.14})$$

where X is the matrix of the eigenvectors and D is the diagonal matrix of the eigenvalues of F . This procedure is valid when the eigenvalues of the matrix F are different and no null.

Then, the Eq. (I.13) becomes:

$$s\bar{Y}(s) - Y(0) + X.D.X^{-1}.\bar{Y}(s) = 0$$

or

$$(sI + X.D.X^{-1}).\bar{Y}(s) = Y(0), \quad (\text{I.15})$$

where I is the matrix identity. Being known that $X = I$, we can write:

$$X.(sI + D).X^{-1}.\bar{Y}(s) = Y(0). \quad (\text{I.16})$$

Multiplying both sides of the equation (I.16) for X^{-1} and $(sI + D)^{-1}$, finally for X results:

$$\bar{Y}(s) = X.(sI + D)^{-1}.X^{-1}.Y(0). \quad (\text{I.17})$$

An alternative procedure to the inversion of the matrix X is suggested by *Segatto et al. (1999)*. Firstly, is determined the vector ξ ($\xi = X^{-1}.Y(0)$). Substituting in the Eq. (I.17) the result is:

$$\bar{Y}(s) = X.(sI + D)^{-1}.\xi. \quad (\text{I.18})$$

where ξ is found being solved the equation $X.\xi = Y(0)$, and their values are calculated by decomposition LU, whose cost computational is smaller than an inversion of matrix. The elements of the matrix $(sI + D)$ has the form $\{s + d_i\}$ where d_i are the eigenvalues of the matrix F given in Eq. (I.12). It is known that, the inverse of a diagonal matrix is the inverse of their elements, in other words, the elements of $(sI + D)^{-1}$ are $\frac{1}{s+d_i}$ whose transformed

inverse of Laplace is $e^{-d_i x}$. Being $G(x)$ the diagonal matrix whose elements are $e^{-d_i x}$ the final solution is given by:

$$Y(x) = X.G(x).\xi. \quad (I.19)$$

Then, using the formula of the inverse given for:

$$\bar{c}(x, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{c_i(x)} \zeta_i(z)}{N_i^{\frac{1}{2}}}. \quad (I.20)$$

is obtained the final solution of the proposed problem. Where $\zeta_i(z)$ is obtained of the problem of Sturm-Liouville given by Eq. (I.6) and comes from the solution of the transformed problem given by Eq. (I.12). Notice that the crosswind integrated concentration represented by (I.20) is not Gaussian.

I.3 Turbulent parameterisation

In the atmospheric diffusion problems the choice of a turbulent parameterisation represents a fundamental decision for the pollutants dispersion modelling. From a physical point of view the turbulence parameterisation is an approximation to the nature in the sense that we are putting in mathematical models an approximated relation that in principle can be used as a surrogate for the natural true unknown term. The reliability of each model strongly depends on the way as turbulent parameters are calculated and related to the current understanding of the PBL (*Mangia et al., 2002*).

The eddy diffusivity was obtained from the time-dependent equation derived by *Batchelor (1949)* and written here as:

$$K_{\alpha} = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^{\infty} F_i^E(n) \frac{\sin(2\pi n t / \beta_i)}{n} dn \quad (I.21)$$

with $\alpha = x, y, z$ and $i = u, v, w$, where $F_i^E(n)$ is the Eulerian spectrum of energy normalized by the Eulerian velocity variance σ_i^2 , β_i is defined as the ratio of the Lagrangian to the Eulerian integral time scales, n is the frequency and t is the travel time.

The asymptotic behavior of Eq. (I.21), for large diffusion travel times is:

$$K_{\alpha} = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(0)}{4} \quad (I.22)$$

In terms of the convective scaling parameters the vertical eddy diffusivity derived from Eq. (I.22) can be formulated as (*Degrazia et al., 1997*):

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(\frac{-4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]. \quad (\text{I.23})$$

Thus, in this study we introduce the vertical eddy diffusivity (Eq. (I.23)) in the model (Eq. (I.20)) to calculate the ground-level crosswind integrated concentration.

I.4 Experimental data and evaluation of the model

The performance of the present model have been evaluated against experimental crosswind ground-level concentration using tracer SF6 data from dispersion experiments carried out in the northern part of Copenhagen, described in *Gryning et al. (1987)*. The tracer was released without buoyancy from a tower at a height of 115 m, and collected at the ground-level positions at a maximum of three crosswind arcs of tracer sampling units. The sampling units were positioned 2-6 km from the point of release. Tracer releases typically started 1 h before the start of tracer sampling and stopped at the end of the sampling period; the average sampling time was 1 h. The site was mainly residential with a roughness length of the 0.6 m. The wind speed profile used in the Eqs. (I.20) has been parameterized following the similarity theory of Monin-Obukhov and OML model (*Berkowicz et al., 1986*):

$$U = \frac{u_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0} - \psi_m\left(\frac{z}{L}\right) + \psi_m\left(\frac{z_0}{L}\right)\right) \right] \quad \text{if } z \leq z_b \quad (\text{I.24})$$

$$U = U(z_b) \quad \text{if } z > z_b \quad (\text{I.25})$$

where $z_b = \min[|L|, 0.1H]$ and ψ_m is a stability function given by (Paulson, 1970).

Figure 1 shows the observed and predicted scatter diagram of ground-level crosswind concentrations using the approach (I.20) with vertical eddy diffusivity given by Eq. (I.23). In this respect, it is important to note that the model reproduce fairly well the observed concentration. Figure 2 shows the vertical profile of concentration ($C^* = \bar{c}/Q$) at various downstream distances ($x = 1000$ m, $x = 2000$ m, $x = 4000$ m and 6000 m) considering the experiment nine of Copenhagen. The traditional behavior is verified presenting larger values of concentration for short distances and smaller with the increase of the downstream

distance. Furthermore, with the increase of the distance happens the tendency of obtaining of a homogeneous profile of concentration. Figure 3 shows the ground-level crosswind integrated concentration function of source distance for two different nondimensional source height ($H_s/z_i = 0.05$ and $H_s/z_i = 0.1$). For the nondimensional height $H_s/z_i = 0.05$ a peak accentuated is verified in the close area to the source. With the increase of the nondimensional source height it is observed a decrease of the peak and a different location of the same. We can observe from these figures that the Eq. (I.20) represents a formula appropriate to describe dispersion in the near and intermediate fields of an elevated source. Figure 4 shows the convergence test for the ground-level concentration considering the experiment nine of Copenhagen. We observed promptly the convergence of the results of ground-level concentration of the new model with the increase of the eigenvalues N .

The datasets were applied subsequently to the following statistical indices (*Hanna, 1989*):

$$\text{Nmse (normalized mean square error)} = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p},$$

$$\text{Fa2} = \text{fraction of data (\%)} \text{ for } 0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$$

$$\text{Cor (correlation coefficient)} = \frac{\overline{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p},$$

$$\text{Fb (fractional bias)} = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0,5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)},$$

$$\text{Fs (fractional standard deviations)} = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}$$

where subscripts o and p refer to observed and predicted quantities, respectively, and an overbar indicates an average. The statistical index FB indicates whether the predicted quantities underestimates or overestimates the observed ones. The statistical index $NMSE$ represents the quadratic error of the predicted quantities in relation to the observed ones. Best results are indicated by values nearest zero in $NMSE$, FB and FS , and nearest 1 in R and $FA2$.

Table 1 shows the behavior of the results as a function of the amount of eigenvalues m of the pollutant concentration normalized by the emission rate (\bar{c}/Q) for different distances of the source. It is verified that the solution converges presenting a good agreement with the experimental results.

Table 2 shows the statistical analysis of the new model compared with other models

considering the moderately unstable experiments of Copenhagen. The ADMM model of *Vilhena et al. (1998)* was obtained by Laplace Transform technique with numerical inversion considering the PBL as a multilayer system where in each layer the eddy diffusivity and wind are constants. The second one, is the KAPPA-G model (*Tirabassi et al., 1986*) in which both wind and eddy diffusivity follow a power law profile. The KAPPA-G model is based on *Demuth (1978)* solution of the advection-diffusion equation that use Bessel function and modified Bessel function of first kind and order. The statistical indices point out that a good agreement is obtained between experimental data and the new model. Analysing the statistical indices in Table 2 it is possible to notice that the new model simulate satisfactorily the observed concentrations, with $NMSE$, FB and FS values relatively near to zero, R relatively near to 1 and $FA2$ equal to 1. The ADMM model present similar results. Both models present better performance that the KAPPA-G model.

In the previous paragraph, an attempt has been made to validate the new model with the available data in the Copenhagen experiment for ground-level crosswind integrated concentrations. It has been found that the present model simulated well the observations. However, the data sets used are primarily from tall stack in moderately unstable conditions. Thus, the model needs to be further validated with the availability of diffusion data of others experiments considering all stability conditions.

I.5 Conclusions

To better understand the importance of researching analytical solution of the advection-diffusion equation, in order to simulate the pollutant dispersion in the PBL, we must look for the possible sources of error either in the modelling and in the numerical simulation of the pollutant concentration. Regarding the first item, we need to recall that the discussed advection-diffusion equation is a mathematical description of the physical phenomena of pollutant dispersion in the PBL, assuming the K-theory model (first order closure) for the turbulence, wind velocity as well considering the eddy diffusivity proposed by *Degrazia (1998)* depending on height z . Besides these uncertainties and also the incomplete understanding of the turbulence phenomena, we have also to take into account the error inherent to the mathematical method adopted to solve the advection-diffusion equation. Here appears the relevance of the analytical solution. Indeed, bearing in mind the exactness of the analytical

solution, we may state that the pollutant concentration calculation by this kind of solution is free of error except for the round-off error. Therefore the error in this work is restricted to the uncertainties posed in the model. Now we are in position to comment some additional advantages of the analytical solution. First of all, it is now possible to control, by the methodology proposed, the results accuracy by regulating the number terms in the serie solution summation. This affirmative is bolstered by the results depicted in Table 1. Indeed, increasing the number of the summation terms in the serie solution, we observe an increasing of coincidence of the number of significant digits between the solutions with number of terms summation differing by unity. Furthermore, given a closer look to the results reported in Table 2 we promptly realize, as expected, that a very good agreement, under statistical point of view, is achieved between the semi-analytical (Laplace Transform technique) and analytical (GILTT approach) results when compared with experimental data. Finally, from the above discussion, we focus our future attention to the issue of modelling improvement. To this end, initially we look for others stabilities and turbulence parameterisations, as well, we take into consideration the ground level geometry using conformal transformation. We also solve the three-dimensional advection-diffusion equation by this methodology. Concluding, by these procedures, expecting somehow have mitigated the previous uncertainties discussed, we intend to show the aptness of the proposed analytical method to solve more realistic physic problems of pollutant dispersion in the PBL.

Acknowledgments: : The authors thank CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) and FAPERGS (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul) for the partial financial support of this work. We thank Prof. M. Thompson for reading the paper and his comments.

References:

Berkowicz, R.R., Olesen, H.R. and Torp U., 1986. **The Danish Gaussian air pollution model (OML). Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications.** *Air Pollution modeling and its application.* Edited by C. De Wispeleare, F.A. Schiermeirier and N.V. Gillani, Plenum Publishing Corporation, 453-480.

- Batchelor, G.K., 1949. **Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis.** Aust. J. Sci. Res. 2, 437-450.
- Blackadar, A.K., 1997. **Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences.** Springer-Verlag. 185 pp.
- Cotta, R. and Mikhaylov, M., 1997. **Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation,** John Wiley Sons, Baffins Lane, Chinchester, England.
- Degrazia, G.A., Campos Velho, H.F. and Carvalho, J.C., 1997. *Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties.* **Contr. Atmos. Phys.**, 57-64.
- Degrazia, G.A., Moreira, D.M. and Vilhena, M.T., 2001. *Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer.* **Journal of Applied Meteorology** 40, 1233-1240.
- Demuth, C.A., 1978. *Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources.* **Atmos. Environ.** 12, 1255-1258.
- Gryning, S., Holtslag, A., Irwing, J. and Silversten, B., 1987. *Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parametres.* **Atmospheric Environment** 21, 79-89.
- Hanna, S.R., 1989. *Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods.* **Atmos. Environ.** 23, 1385-1395.
- Moreira, D.M., Degrazia, G.A. and Vilhena, M.T., 1999. *Dispersion from low sources in a convective boundary layer: An analytical model.* **Nuovo Cimento** 22C, 685-691.
- Mangia, C., Moreira, D.M., Schipa, I., Degrazia, G.A., Tirabassi, T. and Rizza, U., 2002. *Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions.* **Atmos. Environ.** 36, 67-76.
- Pasquill, F. and Smith, F.B., 1983. **Atmospheric Diffusion,** John Wiley & Sons, New York.
- Paulson, C.A., 1970. *The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in unstable atmospheric surface layer.* **J. Appl. Meteor.** 9, 857-861.
- Seinfeld, J.H., 1986. **Atmospheric Chemistry and Physics of air pollution,** New York: John Wiley & Sons.
- Sharan, M., Singh, M.P. and Yadav, A.K., 1996. *Mathematical model for atmospheric disper-*

sion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmos. Environ.** 30, 1137-1145.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T., 1999. *The state of art of the LTSN method.* **Proceedings of Mathematics and Computational Reactor Physics and Enviromental Analysis in Nuclear Applications**, 1618-1631, Madrid.

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

van Ulden, A.P., 1978. *Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground.* **Atmos. Environ.** 12, 2125-2129.

Vilhena, M.T., Rizza, U., Degrazia, G.A., Mangia, C., Moreira, D.M. and Tirabassi, T., 1998. *An analytical air pollution model: Development and evaluation.* **Contrib. Atmos. Phys.** 71, 315-320.

Wortmann, S., 2003. **Formulação Semi-analítica para a Equação Transformada Resultante da Aplicação da GITT em Problemas Difusivos-Advectivos.** *Ph.D. thesis.* Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brazil, 94 pp.

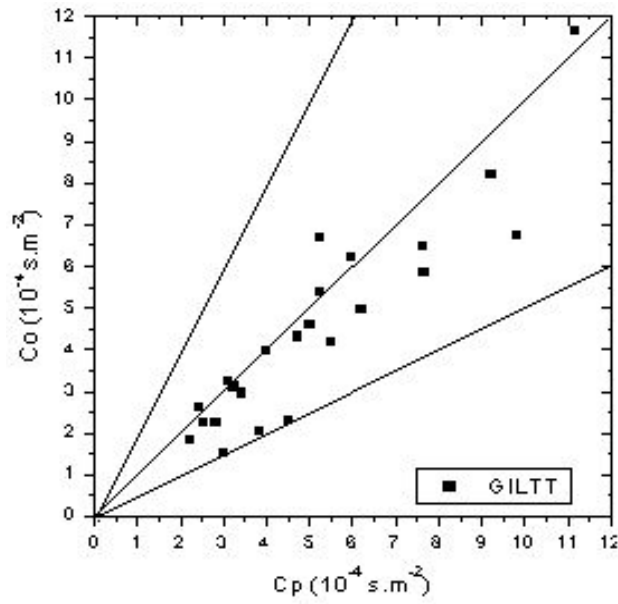


Figura I.1 – Observed (C_o) and predicted (C_p) crosswind ground-level integrated concentration, normalised with emission (\bar{c}/Q), scatter diagram for the new model. Lines indicate a factor of two.

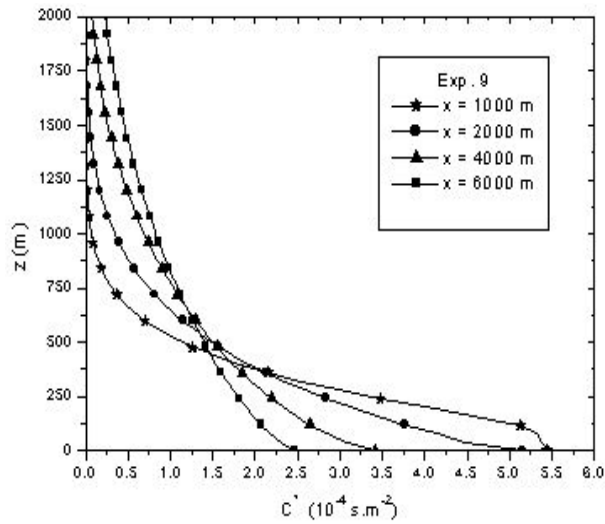


Figura I.2 – Vertical profile of concentration ($C^* = \bar{c}/Q$) for various downstream distances considering the experiment nine of Copenhagen: $x = 1000, 2000, 4000$ and 6000 m.

Tabela I.1 – Observed and modelled ground-level crosswind integrated concentration \bar{c}/Q at different distances from the source with the convergence test (function of the amount of eigenvalues N) of the new model.

N	x=2100m	x=2400m	x=6000m
5	0,000377650	0,000253846	0,000202018
10	0,000452964	0,000287986	0,000222102
15	0,000477731	0,000300683	0,000229864
20	0,000481429	0,000305062	0,000232740
25	0,000479521	0,000307094	0,000234311
30	0,000479312	0,000309077	0,000235691
35	0,000482469	0,000311634	0,000237293
40	0,000487491	0,000314332	0,000238848
45	0,000492085	0,000316687	0,000240212
50	0,000494799	0,000318343	0,000241179
55	0,000495580	0,000319385	0,000241844
60	0,000495386	0,000320071	0,000242307
65	0,000495366	0,000320732	0,000242750
70	0,000496159	0,000321516	0,000243227
75	0,000497672	0,000322422	0,000243755
80	0,000499324	0,000323299	0,000244250
85	0,000500527	0,000324028	0,000244674
90	0,000501049	0,000324550	0,000244989
95	0,000501096	0,000324932	0,000245238
100	0,000501102	0,000325273	0,000245458
105	0,000501420	0,000325667	0,000245701
110	0,000502116	0,000326125	0,000245966
115	0,000502983	0,000326607	0,000246240
120	0,000503711	0,000327034	0,000246483
125	0,000504110	0,000327370	0,000246684
130	0,000504212	0,000327619	0,000246839
135	0,000504224	0,000327837	0,000246979
140	0,000504373	0,000328074	0,000247124
145	0,000504455	0,000328357	0,000247291
150	0,000504479	0,000328666	0,000247466

Tabela I.2 – Statistical evaluation of models results for ground-level concentration.

Models	NMSE	COR	FA2	FB	FS
New model	0,06	0,92	1,00	-0,14	-0,02
ADMM	0,07	0,90	1,00	0,06	0,23
KAPPA-G	0,21	0,84	0,96	0,29	0,48

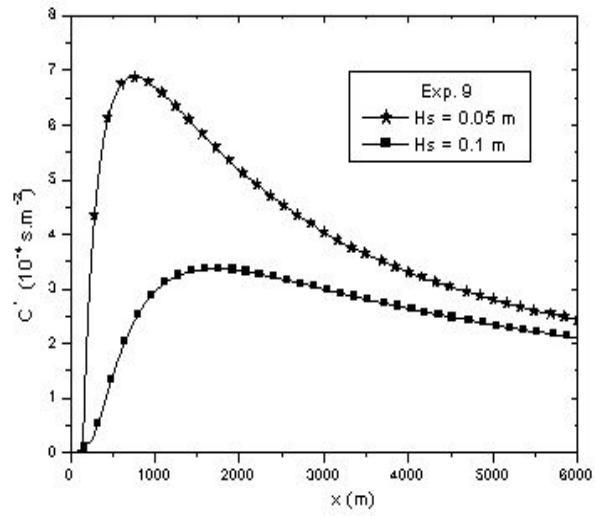


Figura I.3 – Crosswind integrated concentration function of source distance for two different nondimensional source height ($H_s/z_i = 0.05$ and $H_s/z_i = 0.1$).

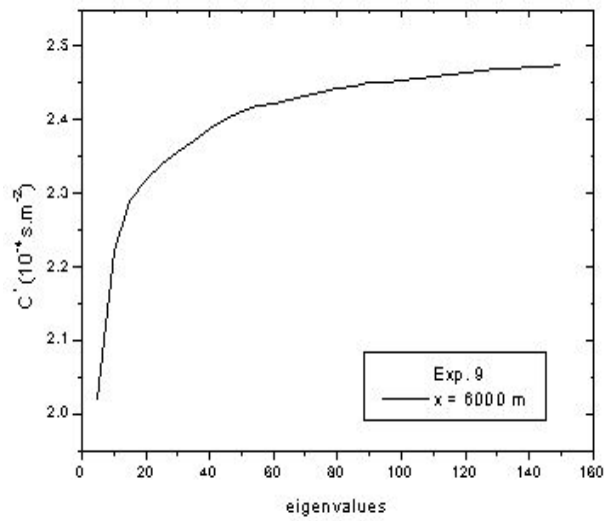


Figura I.4 – Convergence of the new model for the experiment nine of Copenhagen.