

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

MARIA DE FÁTIMA SILVA LEITE

**ESTUDO COMPARATIVO ENTRE COEFICIENTES DE DIFUSÃO VERTICAIS NA
SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM UMA CAMADA LIMITE
CONVECTIVA**

VITÓRIA

2014

MARIA DE FÁTIMA SILVA LEITE

**ESTUDO COMPARATIVO ENTRE COEFICIENTES DE DIFUSÃO VERTICAIS NA
SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM UMA CAMADA LIMITE
CONVECTIVA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração Poluição do Ar.

Orientador: Profº Drº Davidson Martins Moreira

VITÓRIA

2014

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial Tecnológica,
Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

L533e Leite, Maria de Fátima Silva, 1977-
Estudo comparativo entre coeficientes de difusão verticais na
simulação da dispersão de poluentes em uma camada limite convectiva
/ Maria de Fátima Silva Leite. – 2014.
93 f. : il.

Orientador: Davidson Martins Moreira.
Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Universidade
Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Camada Limite. 2. Modelagem. 3. Ar – Poluição. 4. Coeficiente
de difusão. I. Moreira, Davidson Martins. II. Universidade Federal do
Espírito Santo. Centro Tecnológico. III. Título.

CDU: 628

MARIA DE FÁTIMA SILVA LEITE

**ESTUDO COMPARATIVO ENTRE COEFICIENTES DE DIFUSÃO VERTICAIS NA
SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM UMA CAMADA LIMITE
CONVECTIVA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Ambiental na área de concentração Poluição do Ar.

Aprovada em 21 de março de 2014.

COMISSÃO EXAMINADORA

Profº Drº Davidson Martins Moreira
Universidade Federal do Espírito Santo
Orientador

Profª Drª Taciana Toledo de A. Albuquerque
Universidade Federal do Espírito Santo
Examinadora Interna

Profº Drº Marcelo Albano Moret Simões Gonçalves
Universidade Estadual de Feira de Santana
Examinador Externo

A Deus, sobretudo. Verdadeiro Mestre.

AGRADECIMENTOS

- A Deus por ter me dado forças nessa caminhada. Só Ele sabe como foi difícil.
- A minha família, que é tudo para mim.
- Com carinho, ao Professor Drº Davidson Martins Moreira. Não tenho palavras para medir e agradecer a amizade, conhecimentos compartilhados, paciência e generosidade na supervisão deste trabalho. Deixo então minha admiração e todo o meu respeito.
- Ao colega de curso Pedro Henrique Pantoja, pela parceria nos momentos difíceis para ambos.
- Um agradecimento especial ao Professor Edilson Luiz do Nascimento.
- A Elson Galvão e Alexandre Santiago, pela valiosa ajuda. Desejo muito sucesso e conquistas na vida de cada um de vocês.
- À FAPES pelo suporte financeiro.
- Ao PPGEA.

“Cada um é livre para criticar ou concordar com o que quiser. Mas é possível discordar com educação. Ao agir com ignorância e desrespeito com o outro, os argumentos perdem a valor, independentemente da razão” (Tarcísio Oliveira)

“Isto é uma ordem: sê firme e corajoso. Não te atemorizes, não tenhas medo, porque o Senhor está contigo em qualquer parte, para onde fores” (Js 1, 9)

RESUMO

ESTUDO COMPARATIVO ENTRE COEFICIENTES DE DIFUSÃO VERTICAIS NA SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM UMA CAMADA LIMITE CONVECTIVA

O presente trabalho apresentou simulações para a dispersão de poluentes na Camada Limite Convectiva (CLC) com uma solução semi-analítica tridimensional estacionária, obtida através da resolução da equação de difusão-advecção. A equação foi resolvida combinando as técnicas ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*), baseada na discretização da CLC em subcamadas, onde em cada subcamada a equação de difusão-advecção é resolvida pela técnica da Transformada de Laplace e, GITT (*Generalized Integral Transform Technique*), um método híbrido que resolve uma ampla classe de problemas diretos e inversos. A nova técnica é então denominada GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*). O objetivo foi comparar e analisar alguns coeficientes de difusão vertical, e verificar sua aplicabilidade na equação de concentração tridimensional obtida pelo método GIADMT. Foi apresentada a comparação entre coeficientes de difusão vertical (K_z) adequados à atmosfera em condições instáveis. Os resultados obtidos foram confrontados com os dados experimentais de Copenhague (Gryning e Lick, 1984; Gryning *et al.*, 1987; Gryning e Lick, 2002), a fim de verificar o desempenho do modelo perante as diferentes parametrizações da turbulência atmosférica. As comparações apontaram melhores resultados ao empregar a parametrização sugerida por Degrazia *et al.* (2001) [A].

Palavras-chave: Camada Limite Convectiva, Modelagem, Coeficientes de difusão.

ABSTRACT

COMPARATIVE STUDY OF VERTICAL DIFFUSION COEFFICIENTS IN THE SIMULATION OF POLLUTANT DISPERSION IN A CONVECTIVE BOUNDARY LAYER

This work presents simulations for the pollutant dispersion in the Convective Boundary Layer (CBL) with a stationary three-dimensional semi-analytical solution, obtained by solving the advection-diffusion equation. The equation was solved by combining the techniques ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*), based on the discretization of CLC in sublayers, each sublayer where the advection-diffusion equation is solved by the Laplace transform technique and GITT (*Generalized Integral Transform Technique*), a hybrid method that solves a broad class of direct and inverse problems. The new technique is then called GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*). The objective was to compare and analyze some of vertical diffusion coefficients, and their applicability in the three-dimensional concentration equation obtained by GIADMT method. Comparison enters appropriate to the atmosphere in unstable conditions vertical diffusion coefficients (K_z) was presented. The results were compared with experimental data of Copenhagen (Gryning and Lick, 1984; Gryning et al, 1987; Gryning and Lick, 2002) in order to verify the performance of the model under the various parameterizations of atmospheric turbulence. The comparisons showed better results when employing the parameterization suggested by Degrazia *et al.* (2001) [A].

Keywords: Convective Boundary Layer, Modeling, Diffusion coefficients.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1:	Estrutura da Troposfera em função da influência da superfície Terrestre.....	33
Figura 2:	Evolução Temporal da CLA.....	35
Figura 3:	Pluma dispersada em uma CLE.....	36
Figura 4:	Percurso da pluma acima da Camada Limite Estável.....	37
Figura 5:	Dispersão de uma pluma emitida em uma CLA noturna e interceptada pela evolução de uma Camada de Mistura.....	37
Figura 6:	Forma do Espectro de Energia Tridimensional $E(k, t; z)$ em função do número de onda k para uma turbulência bem desenvolvida.....	40
Figura 7:	Esquema da CLA dividida em um sistema de multicamadas.....	43
Figura 8:	Representação esquemática do Experimento de Copenhagen.....	61
Figura 9:	Gráfico de espalhamento dos dados de concentrações máximas observadas (C_o) no experimento em comparação com os dados de concentrações máximas preditas (C_p) pela solução 5.78, normalizadas pela taxa de emissão (Q).....	74
Figura 10:	Convergência numérica da solução proposta pela equação 5.78, considerando o Experimento 8 de Copenhagen, discretização vertical de $\Delta z=5m$; $\Delta z=30m$; $\Delta z=50m$ e, distância da fonte de $x=500m$, $x=3000m$ e $x=8000m$ de acordo com a parametrização proposta por Degrazia <i>et al.</i> (1997), representada pela equação 6.2 para o coeficiente de difusão vertical (K_z).....	78
Figura 11:	Perfil dos coeficientes de difusão vertical sob condições instáveis, considerando o Experimento 1 de Copenhagen.....	79

Figura 12: Concentração superficial em função da posição, considerando o Experimento 1 de Copenhagen, altura da fonte: $H_s=100m$, $H_s=250m$ e $H_s=500m$, de acordo com a parametrização proposta por Degrazia <i>et al.</i> (1997), representada pela equação 6.2.....	80
---	----

LISTA DE TABELAS

Tabela 1:	Parâmetros micrometeorológicos dos Experimentos de Copenhagen.....	62
Tabela 2:	Concentrações máximas observadas para o Experimento de Copenhagen em diferentes distâncias da fonte.....	63
Tabela 3:	Concentrações máximas previstas (C_p) pela Equação 5.78, de acordo com as diferentes parametrizações: (a) Ulke (2000), (b) Hanna (1982), (c) <i>Similaridade</i> (Panofsky e Dutton, 1988), (d) Degrazia <i>et al.</i> (1997), (e) Degrazia <i>et al.</i> (2000), (f) <i>Troen e Mahrt</i> (Pleim e Chang, 1992), (g) <i>Lamb e Durran</i> (Seinfeld e Pandis, 1997), (h) Degrazia <i>et al.</i> (2001) [A], (i) Degrazia <i>et al.</i> (2001) [B], (j) Pleim (2007).....	72
Tabela 4:	Indicadores estatísticos de desempenho da solução tridimensional considerando as diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical (K_z).....	75
Tabela 5:	Tempo de processamento da solução tridimensional em função da altura da discretização da CLC, considerando os dados do Experimento 1 de Copenhagen.....	77
Tabela 6:	Convergência numérica da solução proposta pela equação 5.78, de acordo com a parametrização de Degrazia <i>et al.</i> (1997) para o coeficiente de difusão vertical (K_z).....	93

LISTA DE SIGLAS

1. Caracteres Arábicos

SO ₂	Dióxido de Enxofre
NO _x	Óxidos de Nitrogênio
PM	Material Particulado
COV	Compostos Orgânicos Voláteis
ADMM	Advection Diffusion Multilayer Model
GITT	Generalized Integral Transform Technique
CLA	Camada Limite Atmosférica
GIADMT	Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique
3 D	Tridimensional
U	Velocidade do vento (m)
CLE	Camada Limite Estável
CLC	Camada Limite Convectiva
L	Comprimento de Monin-Obukhov (m)
K	Constante de von Kármán
u_{*o}	Velocidade de fricção (m/s)
Z	Altura acima da superfície do solo (m)
H	Altura da CLA (m)
F	Parâmetro de Coriolis
w_*	Escala de velocidade convectiva (m/s)
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique
q_v	Função estabilidade
$(f_m)_v$	Pico de onda lateral

CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional
CITT	Classic Integral Transform Technique
CLS	Camada Limite Superficial
CLN	Camada Limite Noturna
CLR	Camada Limite Residual
G	Aceleração da gravidade (m/s^2)
$(\overline{w\theta})_o$	Fluxo de energia na forma de calor na superfície
z_i	Altura da Camada Limite Convectiva (m)
K_n	Coeficiente de difusão na região n (m^2/s)
u_n	Velocidade média do vento na região n (m/s)
A^*	Operador diferencial parcial
L^*	Operador associado ao problema de Sturm-Liouville
B^*	Operador associado a outros termos da equação
u	Componente de velocidade do vento na direção x (m/s)
v	Componente de velocidade do vento na direção y (m/s)
w	Componente de velocidade do vento na direção z (m/s)
S	Termo fonte
C	Concentração média dos poluentes ($\mu g/m^3$)
$\overline{u'c'}$	Fluxos turbulentos de poluentes na direção longitudinal $g/(sm^2)$
$\overline{v'c'}$	Fluxos turbulentos de poluentes na direção lateral $g/(sm^2)$
$\overline{w'c'}$	Fluxos turbulentos de poluentes na direção vertical $g/(sm^2)$
K_x	Coeficiente de difusão turbulenta na direção x (m^2/s)
K_y	Coeficiente de difusão turbulenta na direção y (m^2/s)
K_z	Coeficiente de difusão turbulenta na direção z (m^2/s)

Q	Taxa de emissão constante (g/s)
H_s	Altura da fonte (m)
n^*	Camada onde ocorre a emissão do poluente
N	Número total de subcamadas
C_n	Concentração na n -ésima subcamada
h	Altura da CLA (m)
SF_6	Hexafluoreto de Enxofre
<i>USEPA</i>	Agência de Proteção Ambiental
<i>US Air Force</i>	Força Aérea Americana
<i>API</i>	Instituto Americano de Petróleo
$Nmse$	Erro quadrático Médio Normalizado
$Fa2$	Fator de dois
Cor	Coeficiente de Correlação
Fb	Erro Fracional
Fs	Desvio Padrão Fracional
C_o	Concentrações observadas pelo modelo ($10^{-7} sm^{-3}$)
C_p	Concentrações preditas pelo modelo ($10^{-7} sm^{-3}$)
N_p	Número de pontos da <i>Quadratura de Gauss</i>
N_A	Número de Autovalores
X	Distância longitudinal da fonte (m)

2. Caracteres Gregos

$\psi^{\frac{1}{3}}$ ou ψ	Taxa de dissipação
σ_v	Desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal
ψ_ϵ	Função taxa de dissipação molecular
A	Lei de potência que depende da estabilidade atmosférica
β	Lei de potência
θ	Temperatura potencial média
δ	Função Delta de Dirac
$\psi_i(y)$	Autofunções associadas ao problema de Sturm-Liouville
λ_i	Autovalores associados ao problema de Sturm-Liouville
σ_w	Desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical
Ψ_m	Função estabilidade
σ_o	Desvio padrão das concentrações observadas no experimento
σ_p	Desvio padrão das concentrações preditas pelo modelo
ξ	Dissipação média de energia por unidade de massa do fluido
Δz	Tamanho das subcamadas (m)

SUMÁRIO

1 Introdução.....	17
2 Revisão Bibliográfica.....	20
2.1 Soluções da equação de difusão-advecção e parametrização.....	20
3 Objetivos.....	32
3.1 Objetivo Geral.....	32
3.2 Objetivos Específicos.....	32
4 Fundamentação Teórica.....	33
4.1 Camada Limite Atmosférica.....	33
4.2 Dispersão de Poluentes na Atmosfera.....	36
4.2.1 Turbulência.....	38
4.2.1.1 O Espectro de Energia.....	39
5 Modelo Matemático.....	42
5.1 Técnica ADMM.....	42
5.2 Técnica GITT.....	43
5.3 Modelagem turbulenta e o problema de fechamento.....	45
5.4 Formulação da Solução Semi-analítica Tridimensional Estacionária da Equação de difusão-advecção através do método GIADMT.....	48
5.4.1 Solução Homogênea.....	53
5.4.2 Solução Particular.....	54
5.4.3 Solução Geral.....	55
5.4.4 Transformada Inversa de Laplace.....	58
5.4.5 Inversão da solução pelo Esquema de Quadratura de Gauss.....	58
6 Metodologia.....	60
6.1 Validação da Solução Semi-analítica Tridimensional.....	60

6.2 Parametrização da Turbulência Atmosférica.....	64
6.2.1 Coeficientes de Difusão.....	64
6.2.1.1 Coeficientes de Difusão Verticais.....	64
6.2.1.2 Coeficiente de Difusão Lateral.....	68
6.2.1.3 Perfil do Vento.....	68
6.2.1.4 Indicadores Estatísticos.....	69
7 Resultados e Análises.....	71
8 Conclusões.....	82
9 Referências.....	84
Apêndice A.....	93

CAPÍTULO 1

1 Introdução

Com os processos de industrialização e urbanização crescentes e constantes, os grandes centros urbanos principalmente, vivenciam os impactos que a degradação da qualidade do ar acarreta na qualidade de vida populacional e ambiental de modo geral. Muitos países necessitam urgentemente reduzir as emissões para a atmosfera, de poluentes como: Dióxido de Enxofre (SO_2), Óxidos de Nitrogênio (NO_x), Material Particulado (PM) e Compostos Orgânicos Voláteis (COV) devido à elevada concentração no ambiente. No âmbito de crescimento desses processos, o desafio tem sido desenvolver ferramentas que possibilitem estimar o nível de concentração de poluentes atmosféricos provenientes das diversas fontes de emissão (antropogênicas e naturais).

As concentrações dos poluentes dependem de alguns fatores como: a distribuição geográfica das fontes poluidoras, quantidade de poluentes liberados e de como se dá o processo de dispersão e transformação dos poluentes, característicos da atmosfera. Sendo assim, as estratégias que visam reduzir as emissões precisam levar em consideração todos esses fatores.

“Medições nos permite avaliar como são (ou foram) as concentrações em um determinado local, mas não podem nos dizer como essa vai ser no futuro, ou como está sendo hoje, onde há medições. Os modelos matemáticos nos ajudam a entender a forma como os poluentes se comportam no ambiente.” (Tiwary e Colls, 2010, p.225, tradução nossa).

A dispersão de poluentes na atmosfera pode ser estudada de duas maneiras: a partir de experimentos de campo ou laboratório e simulações computacionais. Apesar de serem bons instrumentos de controle, a investigação por meios experimentais muitas vezes é dificultada por problemas operacionais e ao elevado custo financeiro. Assim, a simulação computacional surge como alternativa mais utilizada para o estudo da dispersão de poluentes atmosféricos.

Daly e Zannetti (2007) reforçam que, a modelagem matemática pode dar uma descrição mais completa do problema da qualidade do ar, incluindo uma análise de fatores e causas (fontes de emissão, processos meteorológicos e mudanças físicas e químicas), e algumas orientações sobre a implementação de medidas de mitigação. Nas últimas décadas, problemas físico-

matemáticos, acerca do enquadramento e dispersão da Camada Limite Planetária, foram resolvidos por métodos variados, podendo ser métodos numéricos, analíticos e por métodos híbridos (analítico-numéricos).

Há um grande avanço científico em relação à obtenção de soluções analíticas/semi-analíticas da equação de difusão-advecção. Uma vez que, a difusão turbulenta na atmosfera não possui formulação única, através das soluções analíticas é possível um melhor entendimento do fenômeno físico e uma análise mais real dos erros consequentes da modelagem matemática. Destaca-se um avanço significativo com a utilização das técnicas ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Model*) [Vilhena *et al.*, 1998] em que o domínio é subdividido em várias subcamadas e em cada uma delas são tomados valores médios para os coeficientes de difusão e velocidade do vento, e GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) [Cotta, 1993] que tem como uma de suas principais características o controle de erro dos resultados.

Diferentemente da maioria dos modelos, as técnicas ADMM e GITT podem ser utilizadas em turbulência não-homogênea e estacionária. É importante mencionar que as soluções analíticas são de fundamental importância para a compreensão e descrição dos fenômenos físicos, pois elas são capazes de levar em conta todos os parâmetros de um problema e investigar as suas influências de forma explícita. Além disso, é necessário lembrar que os modelos que descrevem os processos de poluição do ar possuem dois tipos de erros: o primeiro é devido à modelagem física e o outro é relativo à solução numérica do equacionamento associado ao modelo. Desta forma, pode-se afirmar que a solução analítica, em certo sentido, ameniza o erro relacionado à modelagem matemática, logo, os erros do modelo restringem-se de alguma forma, ao erro da modelagem física, ou seja, da parametrização dos coeficientes de difusão.

A eficiência de um modelo é relacionada diretamente a uma parametrização adequada para os coeficientes de difusão. Desta forma, a simulação correta da dispersão de poluentes na atmosfera exige o uso de adequados coeficientes de difusão turbulentos (K) para as diferentes condições de estabilidade atmosférica (convectiva, estável e neutra). Vários pesquisadores vêm contribuindo, de forma notória, com estudos voltados para modelagem da Camada Limite Atmosférica (CLA), desenvolvendo novas parametrizações para o coeficiente de difusão. Diante da vasta literatura, citam-se os trabalhos: Hanna (1982); Panofsky e Dutton (1988); Pleim e Chang (1992); Degrazia *et al.* (1997); Seinfeld e Pandis (1997); Degrazia *et al.* (2000); Ulke (2000); Pleim (2007) e Degrazia *et al.* (2001).

As técnicas ADMM, GITT e transformada de Laplace vêm sendo aplicadas com grande êxito aos problemas de poluição do ar mas, até o momento, não há nenhum trabalho completo que faça uma análise comparativa de diferentes coeficientes de difusão existentes usando a combinação GITT/ADMM, denominada *Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique* (GIADMT) em problemas Tridimensionais (3D). Nesse sentido, o objetivo deste trabalho é realizar uma análise comparativa de diferentes coeficientes de difusão usando uma solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção, obtida através de uma combinação dos métodos ADMM e GITT para simular a dispersão de poluentes na atmosfera.

Essa pesquisa pretende contribuir para o avanço científico em problemas que envolvem a qualidade do ar, com particular atenção à física do problema embutida na parametrização da turbulência. As parametrizações serão validadas a partir dos dados obtidos pelos Experimentos de Copenhague, descritos nos trabalhos de Gryning e Lick (1984), Gryning *et al.* (1987) e Gryning e Lick (2002).

Estruturou-se este trabalho em 9 capítulos, organizados da seguinte forma: no Capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica abordando alguns dos principais trabalhos relacionados à modelagem matemática de dispersão de poluentes na atmosfera, sobre alguns métodos de solução da equação de difusão-advecção e sobre as parametrizações para o coeficiente de difusão. O Capítulo 3 traz os objetivos que regem este trabalho. No Capítulo 4 é introduzida uma breve descrição da estrutura da Camada Limite Atmosférica. No capítulo 5 é apresentado o método de solução da equação matemática tridimensional, bem como as duas técnicas envolvidas nesta (ADMM e GITT). No Capítulo 6 são expostos dados experimentais e indicadores estatísticos a fim de verificar o desempenho do modelo frente às parametrizações propostas para o coeficiente de difusão vertical. Os resultados e uma breve discussão são apresentados no Capítulo 7.

As conclusões e as perspectivas a serem seguidas a partir dos resultados obtidos podem ser certificadas no Capítulo 8. O Capítulo 9 é destinado às referências que nortearam este trabalho.

CAPÍTULO 2

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Soluções da equação de difusão-advecção e parametrização da turbulência

A equação de difusão-advecção é amplamente utilizada para descrever o processo de dispersão na baixa atmosfera. A primeira solução da equação de difusão-advecção foi desenvolvida por Fick no século XIX usando o método Gaussiano. Na solução, o coeficiente de difusão e a velocidade do vento eram constantes com a altura, e as condições de contorno consideradas foram: fluxo nulo de poluentes no limite inferior e superior da CLA. Tais condições de contorno são usualmente utilizadas nas soluções analíticas da equação de difusão-advecção.

Neste contexto, além de soluções utilizando a equação de difusão-advecção, enfatizam-se também trabalhos que buscaram soluções utilizando os métodos ADMM e GITT, com aplicações da Transformada de Laplace e diferentes parametrizações da turbulência. Dentre diversos trabalhos destinados ao tema, cita-se:

Tirabassi *et al.* (1987) desenvolveram uma solução analítica tridimensional da equação de difusão-advecção para a previsão de níveis de poluição para escoamento atmosférico. A dispersão vertical e o perfil do vento são descritos por uma lei de potência, e o perfil lateral foi descrito a partir da fórmula de Gauss, sendo considerado assim como uma abordagem intermediária entre o modelo Gaussiano e os modelos K. O modelo foi implementado em um pacote KAPPA-G escrito em linguagem Fortran e avaliados por fontes ao nível do solo, uma pilha alta e para multifontes em uma área industrial.

Chrysikopoulos *et al.* (1992) apresentaram a primeira solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo, de uma fonte área contínua ao nível do solo, para os perfis

$$U = U_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m ; K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (1.4)$$

Neste mesmo ano Van Ulden (1992) considerou emissão instantânea, desenvolvendo uma solução aproximada, onde descreveu o campo de concentração como soma de “*puffs*”.

Degrazia e Moraes (1992) desenvolveram expressões para o coeficiente de difusão lateral e vertical para analisar o processo de dispersão de poluentes atmosféricos numa Camada Limite Estável. Tais coeficientes são válidos para os campos próximo, intermediário e distante de uma fonte pontual contínua. As expressões foram derivadas da Teoria da *Similaridade* e da Teoria da Difusão Estatística, e são descritas como:

$$\frac{K_{yy}}{u_* h} = \frac{0,357 \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{z}{h} \right)}{1+3,7 \left(\frac{z}{h} \right) \left(\frac{h}{\lambda} \right)} \int_0^\infty \frac{\sin \left\{ 4,236 q \left(\frac{h}{z} \right) \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^{1/2} X' n' \right\}}{[1+(n')^{5/3}] n'} dn \quad (1.5)$$

$$\frac{K_{zz}}{u_* h} = \frac{0,207 \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{z}{h} \right)}{1+3,7 \left(\frac{z}{h} \right) \left(\frac{h}{\lambda} \right)} \int_0^\infty \frac{\sin \left\{ 5,564 q \left(\frac{h}{z} \right) \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^{1/2} X' n' \right\}}{[1+(n')^{5/3}] n'} dn \quad (1.6)$$

$$\frac{K_{zz}}{u_* h} = \frac{0,33 (1-z/h)^{\frac{\alpha_1}{2}} \left(\frac{z}{h} \right)}{1+3,7 \left(\frac{z}{h} \right) \left(\frac{h}{\lambda} \right)} \quad (1.7)$$

$$\frac{K_{yy}}{u_* h} = \frac{0,56 \left(1-\frac{z}{h} \right)^{\frac{\alpha_1}{2}} \left(\frac{z}{h} \right)}{1+3,7 \left(\frac{z}{h} \right) \left(\frac{h}{\lambda} \right)} \quad (1.8)$$

Os resultados foram comparados com os obtidos pelo coeficiente de difusão de momentum e calor, sugeridos por Sorbjan (1986) e Nieuwstadt (1984). Desse trabalho pôde-se concluir que a turbulência é igualmente eficiente numa Camada Limite Estável (CLE), para os coeficientes analisados.

Lin e Hildemann (1996) sugeriram soluções analíticas tridimensionais para a equação de dispersão atmosférica, obtidas aplicando-se o método de Funções de Green na equação, sob as condições de contorno de Neumann e Dirichlet e da combinação destas, para fontes pontuais, lineares e área. As simulações desse trabalho foram conduzidas primeiramente com uma fonte, e posteriormente, de duas fontes. Com a inclusão da segunda fonte verificou-se a influência na concentração da direção a jusante das fontes. Concluíram também que, a condição de contorno de Neumann utilizada junto ao solo causava superestimação da concentração, enquanto que a aplicação da condição de contorno de Dirichlet ocasionava uma subestimação da mesma.

Moreira (1996) propôs a solução para o caso bidimensional estacionário, baseando-se em trabalhos anteriores. Moreira utilizou a técnica ADMM, baseada na discretização da CLA em N subcamadas, e em cada subcamada a equação de difusão-advecção é resolvida através da

Transformada de Laplace, tomando-se valores médios para os coeficientes de difusão e velocidade do vento. Dessa forma, o problema com o coeficiente variável foi substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes (e/ou coeficientes médios) ligados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminantes nas interfaces. A solução semi-analítica é dada em forma integral. A partir deste estudo o método ADMM foi utilizado em diversas pesquisas.

Massman (1997) propôs um modelo unidimensional de transferência de quantidade de movimento sobre cobertura vegetal. O modelo tomou como base a modelagem da altura da vegetação e da densidade foliar da cobertura, obtendo parametrizações para a rugosidade relativa. O estudo considerou modelo analítico para o perfil de velocidade e cisalhamento e parametrização exponencial para a velocidade de atrito. A pesquisa apontou incertezas nas estimativas (obtidas através da análise da sensibilidade das parametrizações), atribuídas às incertezas contidas nos valores da velocidade de atrito normalizada pela velocidade no topo da vegetação.

Degrazia *et al.* (1997) descreveram um método semi-empírico baseado na teoria da difusão estatística de Taylor e no modelo espectral da energia cinética, para avaliar os coeficientes da troca de turbulência não-local para a Camada Limite Convectiva. A parametrização proposta é expressa como:

$$K_z = 0,22 w_* h \left(\frac{z}{h}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1/3} \left[1 - \exp\left(-4\frac{z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(8\frac{z}{h}\right)\right] \quad (1.9)$$

A nova parametrização foi validada por experimentos de campo com o modelo sugerido por Wyngaard e Brost (1984). A análise estatística mostrou que a parametrização proposta reproduziu adequadamente os dados experimentais apresentando melhores resultados.

Degrazia *et al.* (2001) apresentaram formulações para o coeficiente de difusão vertical como função da distância (tempo de viagem) considerando turbulência não-homogênea. Os parâmetros foram estimados a partir da Teoria Estatística de Difusão Clássica e das propriedades espectrais e, inserido num modelo em que a CLA foi considerada como um sistema de multicamadas para simular as concentrações ao nível do solo de contaminantes liberados a partir de uma fonte contínua elevada, em condições instáveis. O trabalho considerou os seguintes coeficientes de difusão vertical:

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0,12 \psi^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]^{\frac{4}{3}}$$

$$\times \int_0^\infty \frac{\sin \left\{ 3,17 \left[1 - \exp \left(-\frac{4z}{z_i} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{z_i} \right) \right]^{-2/3} \psi^{1/3} X n' \right\}}{(1+n')^{5/3}} \frac{dn'}{n'} \quad (1.10)$$

onde z é a altura da CLA; z_i é a altura da fonte e X é a distância da fonte.

Para longas distâncias:

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0,19 \psi^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp \left(-\frac{4z}{z_i} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{z_i} \right) \right]^{\frac{4}{3}} \quad (1.11)$$

onde

$$\psi^{\frac{1}{3}} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \left(\frac{z}{-L} \right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2}$$

é a taxa de dissipação (função adimensionalizada) e L é o comprimento de Monin-Obukhov.

Ulke (2000) apresentou uma nova parametrização para o coeficiente de difusão turbulenta. O método consiste na derivação e aplicação de perfis de velocidade do vento e coeficiente de difusão para os vários regimes da CLA sendo que, as trocas verticais turbulentas são representadas por um perfil que inclui cisalhamento não-local. Como as parametrizações do modelo são baseadas na teoria de transporte por gradiente, e essa abordagem não é válida durante forte convecção, limitou-se a aplicabilidade dos parâmetros de dispersão à variação da estabilidade atmosférica entre estável a ligeiramente instável. Tais coeficientes de difusão são expressos como:

- Condições Estáveis ($h/L > 0$)

$$K_m(z) = k u_{*o} h \left(\frac{z}{h} \right) \left(1 - \frac{z}{h} \right) \left(1 + 6,9 \frac{h}{L} \frac{z}{h} \right)^{-1} \quad (1.12)$$

- Condições Instáveis ($h/L < 0$)

$$K_m(z) = k u_{*o} h \left(\frac{z}{h} \right) \left(1 - \frac{z}{h} \right) \left(1 - 22 \frac{h}{L} \frac{z}{h} \right)^{1/4} \quad (1.13)$$

- Condições Neutras

$$K_z(z) = k u_{*o} h \left(\frac{z}{h} \right) \left(1 - \frac{z}{h} \right) \quad (1.14)$$

onde u_{*o} é a velocidade de atrito e k é a constante de von Kármán.

Ulke e Andrade (2001) aplicaram um modelo numérico tridimensional Euleriano baseado na equação de difusão-advecção, a fim de verificar a produção e o transporte de poluentes no ar na cidade de São Paulo. O coeficiente de difusão vertical foi estimado de acordo com as seguintes expressões:

- Condições Estáveis ($L > 0$)

$$K(z) = k u_{*o} z \left(0,74 + 4,7 \frac{z}{L} \right)^{-1}, \quad z < L \quad (1.15)$$

$$K(z) = K(L), \quad L \leq z < h \quad (1.16)$$

$$K(z) = 0,05 K(L), \quad z \geq h \quad (1.17)$$

- Condições Neutras ($L \rightarrow \infty$)

$$K(z) = k u_{*o} z \cdot \exp\left(-\frac{8zf}{u_{*o}}\right) \quad (1.18)$$

- Condições Instáveis ($L < 0$)

$$K(z) = 2,5 w_* h \left(K \frac{z}{h} \right)^{\frac{4}{3}} \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{1/4}, \quad 0 \leq \frac{z}{h} < 0,05 \quad (1.19)$$

$$K(z) = w_* h \left(0,021 + 0,408 \left(\frac{z}{h} \right) + 1,351 \left(\frac{z}{h} \right)^2 - 4,096 \left(\frac{z}{h} \right)^3 + 2,56 \left(\frac{z}{h} \right)^4 \right), \quad 0,05 \leq \frac{z}{h} \leq 0,6 \quad (1.20)$$

$$K(z) = 0,2 w_* h \cdot \exp\left(6 - 10 \frac{z}{h}\right), \quad 0,6 < \frac{z}{h} < 1,1 \quad (1.21)$$

$$K(z) = 0,0013 w_* h, \quad \frac{z}{h} \geq 1,1 \quad (1.22)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov; k é a constante de von Kármán; u_{*o} é a velocidade de fricção; z é a altura acima da superfície do solo; h é a altura da CLA; f é o parâmetro de Coriolis e w_* é a escala de velocidade convectiva $\left(w_* = u_{*o} \left(-\frac{h}{kL} \right)^{1/3} \right)$.

Sharan e Gupta (2002) desenvolveram uma solução analítica bidimensional permanente utilizando uma expansão em autofunções do problema original. Neste trabalho, o coeficiente de difusão vertical foi considerado variável com a distância horizontal em relação à posição da fonte. Considerou-se uma fonte ao nível do solo e difusão constante e variável com a

distância longitudinal da fonte. Os resultados obtidos foram comparados com os dados experimentais de Copenhagen e Kincaid.

Mangia *et al.* (2002) avaliaram uma nova parametrização para o coeficiente de difusão turbulenta sob diferentes condições de estabilidade inseridos em um modelo avançado de análise, e os resultados foram comparados com alguns parâmetros de dispersão vertical existentes na literatura. O coeficiente de difusão proposto é dado pela expressão:

$$K_z = \frac{0,3(1-z/h)u_*z}{(1+3,7z/\Lambda)} \quad (L > 0) \quad (1.23)$$

$\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{(1,5\alpha_1 - \alpha_2)}$ com $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 3$ (valores Minnesota). Para análise comparativa do modelo proposto foram utilizados os experimentos de Copenhagen (Gryning e Lyck, 1984), Prairie Grass (Barad, 1958), Lillestrom (Siversten e Bohler, 1985) e Hanford (Doran e Horst, 1985). O modelo proposto reproduziu bem os resultados concordando com a concentração ao nível do solo.

Storch e Pimentel (2003) desenvolveram uma solução bidimensional permanente para a equação de difusão-advecção. O propósito da pesquisa foi realizar uma comparação entre as parametrizações do coeficiente de difusão turbulenta propostas por Ulke (2000), Seinfeld (1986) e Degrazia *et al.* (2000). Os diferentes coeficientes de difusão associados à solução apresentaram perfis diferentes de concentração porém, as parametrizações tiveram comportamento físico dentro do esperado.

Wortmann *et al.* (2005) apresentaram uma abordagem analítica para a solução da equação de difusão-advecção para simular a dispersão de poluentes na camada limite planetária, em que a transformada integral generalizada é resolvida pela técnica de transformada de Laplace, com inversão analítica. A solução é vista como sendo não-Gaussiana e nenhuma aproximação é feita, obtendo-se assim uma solução exata. Tal procedimento elimina os erros ocasionados pelos métodos numéricos, sendo limitados somente aos erros relacionados ao truncamento da solução em série. A pesquisa tomou como base os dados experimentais de Copenhagen (Gryning *et al.*, 1987) e coeficiente de difusão turbulenta proposto por Degrazia *et al.* (1997) para validar a solução. Os resultados obtidos apresentaram boa concordância com os dados experimentais.

No mesmo ano, Wortmann *et al.* (2005) propuseram uma solução bidimensional para a equação de difusão-advecção em regime permanente aplicando o método *Generalized Integral Laplace Transform Technique* (GILTT). As parametrizações para o coeficiente de difusão turbulenta foram as propostas por Degrazia *et al.* (1997) e para validar a solução foram utilizados os dados experimentais de Copenhagen (Gryning *et al.*, 1987). Os resultados obtidos pela solução foram comparados aos resultados obtidos pelo modelo fornecido por Vilhena *et al.* (1998) e Tirabassi *et al.* (1986), demonstrando boa concordância entre os resultados e vantagem significativa da nova solução sobre os métodos numéricos e híbridos, por permitir o controle dos erros.

Moreira *et al.* (2005) propuseram uma solução semi-analítica bidimensional da equação de difusão-advecção. O problema formulado considerou a equação dependente da difusão turbulenta, assimetria do escoamento, velocidade turbulenta vertical e escala de tempo Lagrangeana. A solução é resolvida analiticamente usando a técnica da Transformada de Laplace e, considerou também a influência de um termo contra-gradiente na difusão da pluma. A solução avaliou a influência do termo contra-gradiente sobre uma CLC e foram utilizados os dados do experimento 8 de Copenhagen (Gryning *et al.*, 1987), por ser um experimento altamente convectivo. Os resultados demonstraram que a inclusão do termo contra-gradiente modifica a concentração máxima, principalmente para fontes baixas, além de pouco esforço computacional.

Costa *et al.* (2006) apresentaram uma solução analítica tridimensional considerando estado estacionário. Posteriormente, Costa *et al.* (2007) utilizaram a solução tridimensional considerando estado estacionário para simulação de poluentes radioativos em turbulência não-homogênea. As soluções foram baseadas na combinação dos métodos ADMM e GITT denominado GIADMT. Pôde-se concluir que o método GIADMT é bastante eficiente, pois mostrou-se aplicável tanto para o caso de fechamento fickiano da turbulência quanto para o caso de fechamento não-fickiano. Além disso, a solução proposta pelo método GIADMT pode ser considerada como uma solução geral uma vez que é possível através desta solução retornar a casos particulares, ou seja, a solução tridimensional transiente recai na solução tridimensional estacionária quando $t \rightarrow \infty$, assim como quando a solução tridimensional estacionária é integrada lateralmente, se tem a solução para o caso bidimensional estacionário. Foram utilizados dois métodos de inversão na formulação da solução 3D: o Esquema Numérico de *Quadratura Gaussiana* e o algoritmo de *Talbot*. Os resultados obtidos

mostraram-se bastante precisos, sendo que o método GIADMT com o algoritmo de *Talbot* mostrou-se mais robusto e eficiente para simulação da dispersão de poluentes na atmosfera.

Carvalho *et al.* (2007) realizaram um estudo de comparação numérica, sob ponto de vista estatístico e computacional, entre uma técnica semi-analítica Euleriana baseada na solução da equação de difusão-advecção através da técnica de Transformada de Laplace e, uma abordagem Lagrangiana baseada na solução da equação de Langevin pelo método iterativo de Picard. O estudo considerou valores de um poluente passivo de concentração ao nível do solo, lançado a partir de uma fonte baixa. Os parâmetros turbulentos foram calculados de acordo com uma parametrização capaz de gerar valores contínuos em todas as condições de estabilidade e em todas as alturas na CLA. As comparações entre as duas técnicas revelaram maior precisão para o modelo Lagrangeano, porém, o modelo Euleriano exigiu menor tempo computacional. Segundo os autores, tais métodos são equivalentes, uma vez que as vantagens e desvantagens entre eles não são muito significativas.

Rizza *et al.* (2007) realizaram um estudo comparativo entre um modelo lagrangeano baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para a velocidade aleatória; um modelo euleriano analítico baseado na discretização da CLA em N subcamadas, onde em cada uma das subcamadas a solução é obtida pela técnica de Transformada de Laplace e, um modelo euleriano numérico composto por um conjunto de equações unidimensionais dependentes do tempo, onde os termos advectivos foram resolvidos usando um método baseado em uma interpolação cúbica. A parametrização da turbulência utilizada nos modelos considera um modelo do espectro de turbulência, considerado como uma superposição dos efeitos térmico e mecânico do campo turbulento. As simulações foram avaliadas através dos experimentos de Copenhagen. Os resultados comparativos mostraram excelente acordo entre os modelos, resultando em boas estimativas de modelagem para qualidade do ar.

Vilhena *et al.* (2008) apresentaram uma solução semi-analítica tridimensional para a equação de difusão-advecção em estado estacionário, considerando o fechamento de turbulência não-local. A técnica GIADMT foi utilizada para resolver a equação de difusão-advecção e os resultados obtidos a partir desta solução foram bem satisfatórios, podendo também ser aplicada em outras situações como, por exemplo, para descrever a dispersão turbulenta de materiais radioativos e calor. A parametrização utilizada para o coeficiente de difusão vertical foi a expressão proposta por Pleim e Chang (1992), para condições convectivas. A difusão lateral foi proposta por Degrazia *et al.* (1997), da forma:

$$K_y = \frac{\sqrt{\pi}\sigma_v z}{16(f_m)_v q_v} \quad (1.24)$$

onde

$$(f_m)_v = 0,16; \quad (1.25)$$

$$q_v = 4,16 \frac{z}{h}; \quad (1.26)$$

$$\sigma_v^2 = \frac{0,98c_v}{(f_m)_v^{2/3}} \left(\frac{\psi_\epsilon}{q_v}\right)^{2/3} \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2 \quad (1.27)$$

$$\psi_\epsilon^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \left(-\frac{z}{L}\right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2} \quad (1.28)$$

Na solução, σ_v é o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal; q_v é a função estabilidade; $(f_m)_v$ é o pico de onda lateral e ψ_ϵ é a função taxa de dissipação molecular (adimensional). Os resultados obtidos através da solução apresentaram boa concordância com os dados experimentais de Copenhagen e Kinkaid.

Baetens *et al.* (2009) apresentaram um modelo de previsão a partir da equação de difusão-advecção para avaliar os riscos ambientais provenientes de aplicações de pulverização. O estudo considerou perfil logarítmico para as condições de vento e foi avaliado de acordo com o modelo de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD). O modelo demonstrou-se como uma boa ferramenta, proporcionando relações significativas para explicar os efeitos observados.

Tirabassi *et al.* (2009) apresentaram uma solução bidimensional estacionária para a equação de difusão-advecção utilizando a técnica GILTT. A solução encontrada não faz nenhuma hipótese restritiva sobre os coeficientes de difusão turbulenta e perfis de velocidade do vento. As formulações apresentadas mostraram-se bastante úteis no processo de avaliação da dispersão atmosférica por permitirem melhor compreensão dos fenômenos de advecção-difusão.

Sharam e Kumar (2009) propuseram uma solução analítica de forma fechada da equação difusão-advecção a partir do problema associado de Sturm-Liouville. A pesquisa considerou fonte contínua e, o seguinte perfil de velocidade do vento:

$$u(z) = az^\alpha \quad \text{com} \quad a = u(z_r)z_r^{-\alpha} \quad (1.29)$$

onde $u(z_r)$ é a velocidade do vento na altura de referência z_r ; α é uma lei de potência que depende da estabilidade atmosférica, parametrizada a partir da Teoria de *Similaridade* de Monin-Obukhov. Para o coeficiente de difusão vertical, foi utilizada uma forma modificada proposta por Mooney e Wilson (1993), onde:

$$K_z(x, z) = K'_z(z)f(x) \quad \text{com} \quad K'_z(z) = bz^\beta \quad \text{onde} \quad b = K'_z(z_r)z_r^{-\beta} \quad (1.30)$$

$K'_z(z_r)$ é o coeficiente de difusão na altura z_r ; $f(x)$ é uma correção para a dispersão próxima à fonte (é uma função adimensional), e β é uma lei de potência. Os resultados obtidos com tal solução apresentaram boa concordância com os dados experimentais (Prairie Grass e Hanford) utilizados na pesquisa.

Moreira *et al.* (2010) propuseram uma solução semi-analítica para a equação de difusão-advectação em estado estável, usando o método ADMM. A solução encontrada permite simular a dispersão vertical de poluição do ar com deposição no solo. O estudo considerou atmosfera sob condições moderadamente estável a condições quase neutras e, diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical. A performance da solução foi avaliada de acordo com os experimentos de Hanford. O método proposto mostrou-se robusto e bastante promissor no processo de simulação de dispersão de poluentes na atmosfera.

Buske *et al.* (2012) apresentaram uma solução tridimensional obtida a partir do método GILTT, considerando uma camada limite atmosférica não-homogênea e sem qualquer restrição para os perfis de vento e coeficiente de difusão. Para validar a solução foram utilizados os dados experimentais de Copenhagen e Kinkaid. Os resultados produzidos mostraram boa concordância com os valores observados nos experimentos, além de permitir simular a dispersão de substâncias poluentes de uma forma computacionalmente eficiente.

Ainda no ano de 2012, Guerrero *et al.* (2012) desenvolveram uma solução para o problema de difusão atmosférica considerando estado estacionário, domínio finito e semi-infinito de um modelo de pluma Gaussiana e, diversas classes de estabilidade. A equação tridimensional foi resolvida analiticamente usando a Técnica de Transformada Integral Clássica (*Classic Integral Transform Technique* - CITT). A solução admitiu as parametrizações da velocidade de vento que pode ser média arbitrária dependendo da coordenada vertical z e, difusão turbulenta em termos da dimensão longitudinal x e a coordenada vertical z , como descritos a seguir:

$$u(z) = u_r z^\alpha \quad (1.31)$$

$$K(z) = K_r z^\beta \quad (1.32)$$

$$K_{zz}(x, z) = b(x) K_r z^\beta \quad (1.33)$$

onde u_r e K_r são constantes. O método proposto demonstrou-se ser uma valiosa ferramenta para simular processos de dispersão na atmosfera e útil para avaliar o desempenho de diferentes parametrizações da turbulência de maneira mais fácil, além de pouco custo computacional.

Guerrero *et al.* (2013) desenvolveram uma solução analítica unidimensional transiente de forma fechada para a equação de difusão-advecção, considerando a CLA como um sistema de multicamadas através da Técnica de Transformada Integral Clássica. Foi utilizado na solução o problema de autovalores associados à equação de difusão-advecção, com a mesma forma matemática e coeficientes que a equação de transporte governamental.

Gonçalves *et al.* (2013) apresentaram uma solução da equação de difusão-advecção bidimensional pelo método GILTT. O trabalho considerou uma abordagem diferenciada na expansão da série da equação de difusão-advecção. O problema de Sturm-Liouville foi dado por funções de Bessel, denominada GILTTB. A pesquisa realizou uma análise comparativa dos resultados obtidos através da nova técnica GILTTB e o método GILTT denominado GILTTC, em que na expansão da série, as autofunções são dadas em termos de funções de cosseno. Pôde-se perceber bons resultados sob o ponto de vista estatístico, com diferença significativa para a fonte baixa, onde a técnica GILTTB numericamente converge mais rápido do que GILTTC.

Moreira *et al.* (2014) apresentaram uma solução da equação de difusão atmosférica, considerando a velocidade do vento como uma função da altura vertical e coeficiente de difusão como uma função da distância a favor do vento, a partir da fonte. No estudo o problema de dispersão é investigado comparando-se o coeficiente de difusão vertical em função da distância da fonte sugerido por Degrazia *et al.* (2001) e Goulart *et al.* (2004), contra seu limite assintótico (Degrazia *et al.*, 1997). Os resultados obtidos com coeficiente de difusão em função da distância da fonte apresentaram melhores resultados do que os alcançados com coeficiente de difusão assintótico.

Baseando-se nas informações expostas, muitos são os esforços no propósito de encontrar soluções mais abrangentes sobre a equação de difusão-advecção, mas principalmente soluções analíticas associadas à parametrizações que permitam análises mais sensíveis em âmbitos de solução, o que facilita as investigações das possíveis influências nesse contexto.

CAPÍTULO 3

3 Objetivos

3.1 Objetivo Geral

Este trabalho tem como objetivo compreender o processo de dispersão de poluentes atmosféricos a partir de uma solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção, usando diferentes coeficientes de difusão existentes na literatura.

3.2 Objetivos Específicos

- Avaliar a performance da solução a partir de dados experimentais e de alguns indicadores estatísticos;
- Identificar diferenças significativas nos resultados de concentração após o uso de diferentes coeficientes de difusão;
- Realizar uma análise da convergência da solução;
- Identificar o tempo computacional associado à simulação de dispersão de poluentes via solução semi-analítica tridimensional.

CAPÍTULO 4

4 Fundamentação Teórica

Descrevem-se, neste capítulo, os fundamentos teóricos que abordam as principais características que regem a atmosfera e a relação dessas com a dispersão de poluentes.

4.1 Camada Limite Atmosférica

Conhecer o comportamento da Camada Limite Atmosférica (ou Camada Limite Planetária) é imprescindível para o entendimento dos processos que ocorrem na baixa troposfera, uma vez que é nesta região que se localiza a maior parte das fontes emissoras, sejam elas naturais ou antropogênicas.

A Troposfera é a camada inferior da atmosfera que se estende desde o solo até aproximadamente 11km de altura. A Figura 1 representa a estrutura da Troposfera e suas divisões, como:

- Camada Limite Atmosférica ou Camada Limite Planetária que é a região que vai desde a superfície até aproximadamente 3km de altura, com características turbulentas;
- Atmosfera Livre que é a parte restante da Troposfera, dominada por processos associados a sistemas de larga escala.

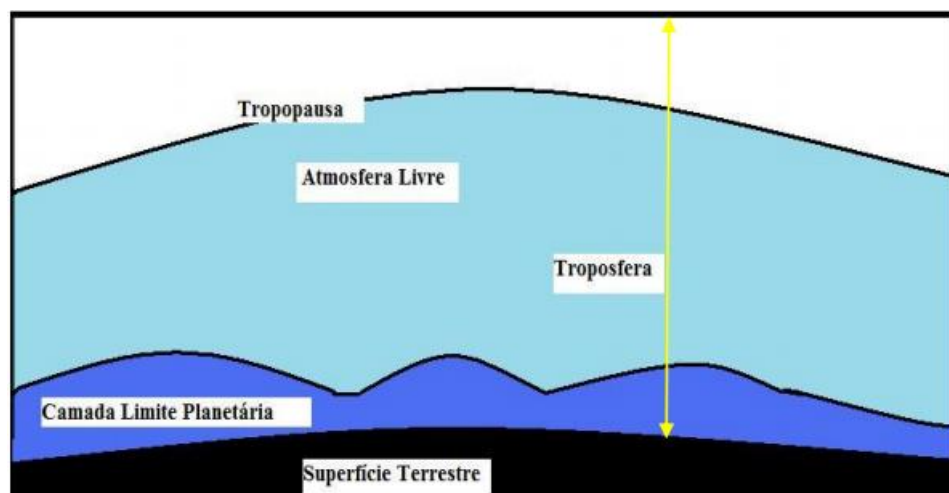


Figura 1: Estrutura da Troposfera em função da influência da superfície Terrestre.

Fonte: Adaptada de Stull (1988).

A CLA é definida como a parte da Troposfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da Terra e representa a região onde os gases emitidos, transportados pelo vento e pela turbulência, sofrem as primeiras reações químicas e/ou fotoquímicas.

Arya (2001) define uma camada limite como uma camada de um fluido nas proximidades de uma superfície material em que a troca de momentum, calor ou massa ocorrem entre a superfície e o fluido. Nítidas variações nas propriedades do escoamento, tais como velocidade, temperatura e concentração de massa, também podem ocorrer na camada limite.

Nessa camada, o transporte é dominado na horizontal pelo vento médio (transporte advectivo) e na vertical pela turbulência (responsável pela difusão). A rugosidade da superfície da Terra influencia na velocidade do vento, fazendo com que, junto à superfície, os valores sejam menores (devido ao mecanismo de fricção). Na direção vertical, a intensidade dos ventos médios é menor quando comparada aos ventos na direção horizontal. A CLA é fortemente afetada pelos fluxos turbulentos, sendo que grande parte desses fluxos são gerados por forçantes da superfície, por exemplo, na transferência de calor da superfície para o ar adjacente o que implica no desenvolvimento das termas (Stull, 1988).

Ao longo de sua extensão a CLA apresenta diferentes características, comumente classificadas em:

1. Camada Limite Superficial:

Parte mais baixa da CLA, varia em torno de 10 a 200m. Nessa camada a interação entre a atmosfera e a superfície terrestre é fortemente sentida, pois as variações verticais dos fluxos turbulentos são negligenciadas e a tensão de cisalhamento e fluxo de calor são considerados constantes.

2. Camada Limite Convectiva:

É a camada que começa a se formar depois do nascer do sol. É provocada pelo aquecimento diurno da superfície e, devido à circulação convectiva, alcança uma espessura de 1000 a 3000m. Nesse caso, a taxa de variação de temperatura potencial é negativa (temperatura diminui com a altura), indicando uma atmosfera instável, com intensa turbulência.

3. Camada Limite Estável ou Noturna:

Comum à noite, pois é determinada pelo resfriamento da superfície da Terra e alcança uma altura de 100 a 300m. Nessa condição, a taxa de temperatura potencial é positiva (temperatura

aumenta com a altura), implicando em uma atmosfera estável, com intensidade da turbulência reduzida.

4. Camada Limite Residual:

Região acima da CLE que surge quando as circulações convectivas (termas) cessam, provocando o decaimento da turbulência, porém suas características permanecem as mesmas da camada convectiva existente durante o dia.

A Figura 2 apresenta a evolução temporal da CLA durante um período de 24 horas.

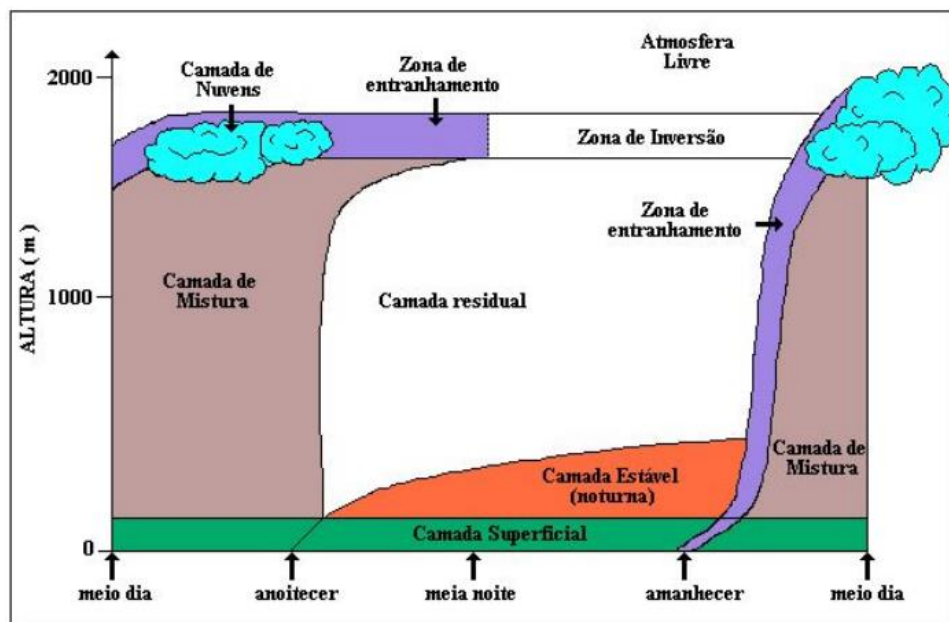


Figura 2: Evolução Temporal da CLA.

Fonte: Adaptada de Stull (1988).

5. O Comprimento de Monin-Obukhov

Monin e Obukhov (1954) propuseram a Teoria de Similaridade como um caminho para prever informações micrometeorológicas onde medidas diretas não estão disponíveis. Nela, introduziram dois parâmetros de escala que independem da altura da camada. O primeiro é denominado de velocidade de fricção (u_*) e o segundo é denominado comprimento característico ou Comprimento de Monin-Obukhov (L), definido como:

$$L = -\frac{u_*^3}{k\left(\frac{g}{\theta}\right)(w\theta)_o} \quad (3.1)$$

onde:

k é a constante de Von Karmán;

g é a aceleração da gravidade ;

θ é a temperatura potencial média;

u_* é a velocidade de fricção na superfície;

$(w\theta)_o$ é o fluxo de energia na forma de calor na superfície.

O Comprimento de Monin-Obukhov é um parâmetro de escala usado na Camada Limite Superficial, esse representa a altura acima da superfície na qual há equilíbrio entre a turbulência mecânica e a turbulência térmica. De acordo com Panofsky e Dutton (1984), quando $|L|$ apresentar valores entre 10 e 100m, de maneira que $z_i/|L| \geq 10$ (onde z_i é a altura da Camada Limite Convectiva), tem-se uma CLC bem desenvolvida.

4.2 Dispersão de Poluentes na Atmosfera

Em geral, o processo de dispersão de gases poluentes lançados na atmosfera é influenciado por diversos fatores como: a altura e a velocidade da emissão, os efeitos do terreno, as condições meteorológicas e a natureza do poluente.

Quando emitidos em uma Camada Limite Estável, o processo de dispersão se dá pela ação do vento horizontal, podendo ser transportados por centenas de quilômetros antes de alcançar a superfície. Isso ocorre devido a menor intensidade da turbulência na CLE.

A Figura 3 demonstra a situação de dispersão de uma pluma numa CLE, destacando o grau de diminuição da estabilidade com a altura, isto é, fortemente estável junto à superfície e aproximadamente neutro na camada residual.

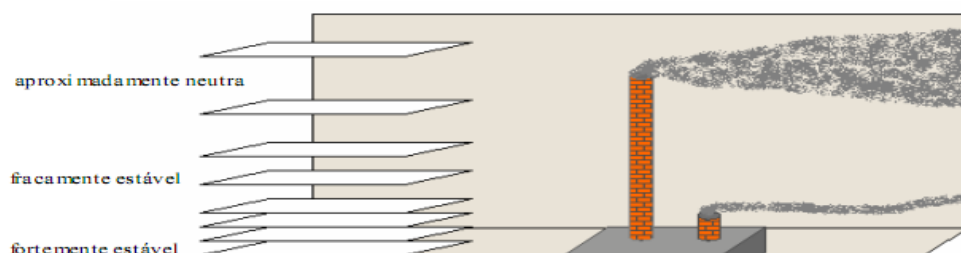


Figura 3: Pluma dispersada em uma CLE.

Fonte: Adaptada de Stull (1988).

A Figura 4 mostra um estado de dispersão de uma pluma emitida durante a noite, onde há a formação de uma camada residual sobreposta a uma CLE.

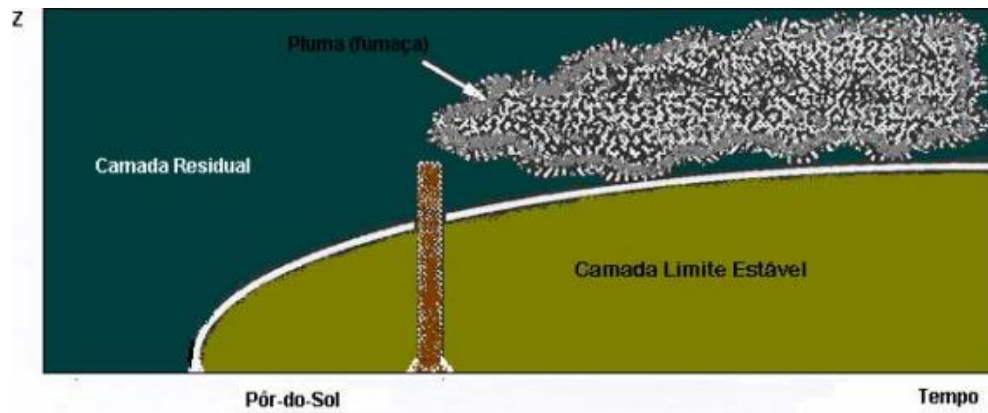


Figura 4: Percurso da pluma acima da Camada Limite Estável.

Fonte: Adaptada de Stull (1988).

Ao amanhecer, há evolução de uma nova camada de mistura, alcançando pouco a pouco a altura dos poluentes emitidos durante a noite. Os poluentes se misturam rapidamente e alcançam a superfície por efeito da intensificação da turbulência. Esse processo pode ser observado na Figura 5. Nessa figura, F1 e F2 representam o tempo de viagem da pluma até a sua deposição no nível do solo.

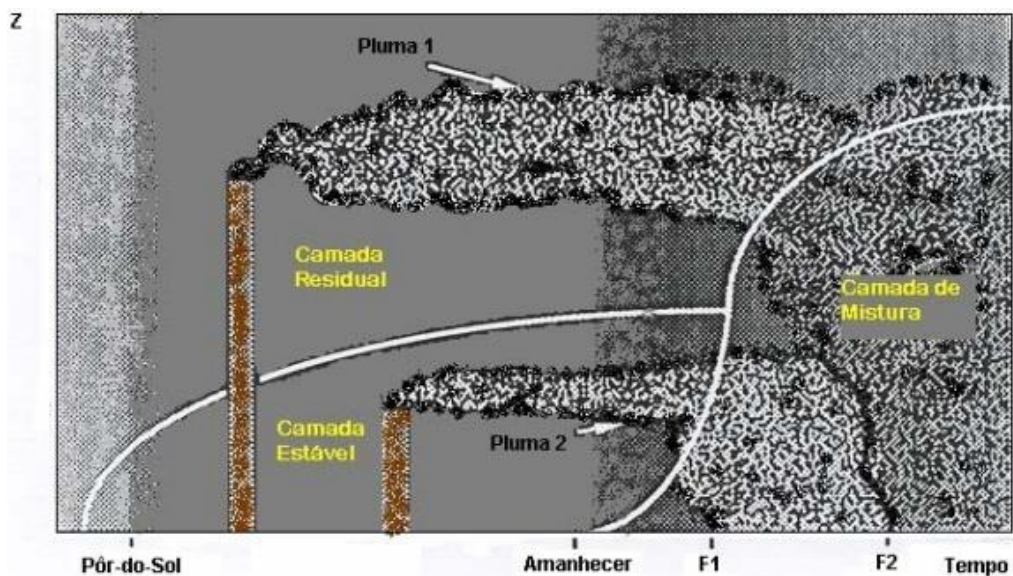


Figura 5: Dispersão de uma pluma emitida em uma CLA noturna e interceptada pela evolução de uma Camada de Mistura.

Fonte: Adaptada de Stull (1988).

Formada a camada de mistura, o processo de dispersão na CLA¹ ocorre sobretudo devido às circulações convectivas (termas) que formam regiões de fluxos de ar ascendentes (áreas de *updrafts*) e regiões de fluxos de ar descendentes (áreas de *downdrafts*). As áreas de *updrafts* apresentam menor extensão espacial (~40%) e fluxo de ar mais intenso, enquanto as áreas de *downdrafts* apresentam maior extensão espacial (~60%) e fluxo de ar menos intenso. De acordo com a lei de conservação de massa, o ar quente que sobe tem uma velocidade maior do que o ar frio que desce. Assim, o processo dá forma a uma distribuição assimétrica positiva para a flutuação da velocidade vertical, o que determina uma condição de turbulência não-Gaussiana. Como há forte mistura na CLC, o resultado final consiste em uma distribuição uniforme dos poluentes, que independem da altura de emissão.

4.2.1 Turbulência

Ainda hoje, definir turbulência é uma tarefa difícil. Segundo Arya (2001), a turbulência se refere aos fluxos de natureza caótica, os quais são manifestados de forma irregular, influenciando flutuações de velocidade, temperatura e concentrações de escalares por seus valores médios de espaço e tempo. É constituída por vários turbilhões que se sobrepõem, cujos tamanhos são variáveis (da ordem de $1mm$ a $3000m$ de diâmetro) e que somados constituem o espectro de energia turbulenta. O entendimento do comportamento turbulento em escoamento de fluidos é um dos mais intrigantes, frustrantes e importantes problemas em toda a física clássica. O estudo da turbulência é motivado tanto pelo seu desafio intelectual quanto pela atividade prática de uma profunda compreensão de sua natureza. Dentre suas características físicas, podem-se citar:

- Desorganizada, comportamento caótico;
- Não repetitiva (tem sensibilidade às condições iniciais);
- Ampla gama de escalas de comprimento e tempo;
- Reforça a difusão (mistura) e dissipação;
- Tridimensionalidade, dependência do tempo e rotacionalidade;
- Intermitência no espaço e no tempo.

¹ Descrições mais detalhadas, sobre a física da Camada Limite Atmosférica, podem ser encontradas em Stull (1988).

No estudo de um campo turbulento geofísico, como por exemplo, o que ocorre em uma CLA, onde os números de Reynolds são grandes (aproximadamente 10^7) e as simetrias permitidas pelas equações, são recuperadas em um senso estatístico e a turbulência pode - então - ser considerada bem desenvolvida.

4.2.1.1 O Espectro de Energia

Em razão da complexidade do campo turbulento, que pelo efeito de não-linearidade do fenômeno possui um intervalo de escalas entre si, torna-se necessário o desenvolvimento de uma parametrização que permita modelar o estado caracterizado por um número gigantesco de graus de liberdade. Dessa forma, uma parametrização significa uma representação idealizada (baseada em argumentos heurísticos) do fenômeno de transporte turbulento.

Nesse contexto, quando se parametrizam os processos de troca turbulenta, incorporam-se às equações a descrição das leis de conservação, as relações matemáticas aproximadas e que são usadas para substituir os termos desconhecidos presentes no fenômeno natural. A escolha de escalas típicas de velocidade e comprimento é fundamental para a obtenção dos parâmetros turbulentos, formulada a partir de sua fenomenologia que se aplica em uma turbulência bem desenvolvida.

Nesse aspecto, o comportamento observado do espectro de energia turbulento pode auxiliar decisivamente na determinação das escalas típicas. A Figura 6 representa a forma geral do espectro de energia tridimensional de uma turbulência bem desenvolvida:

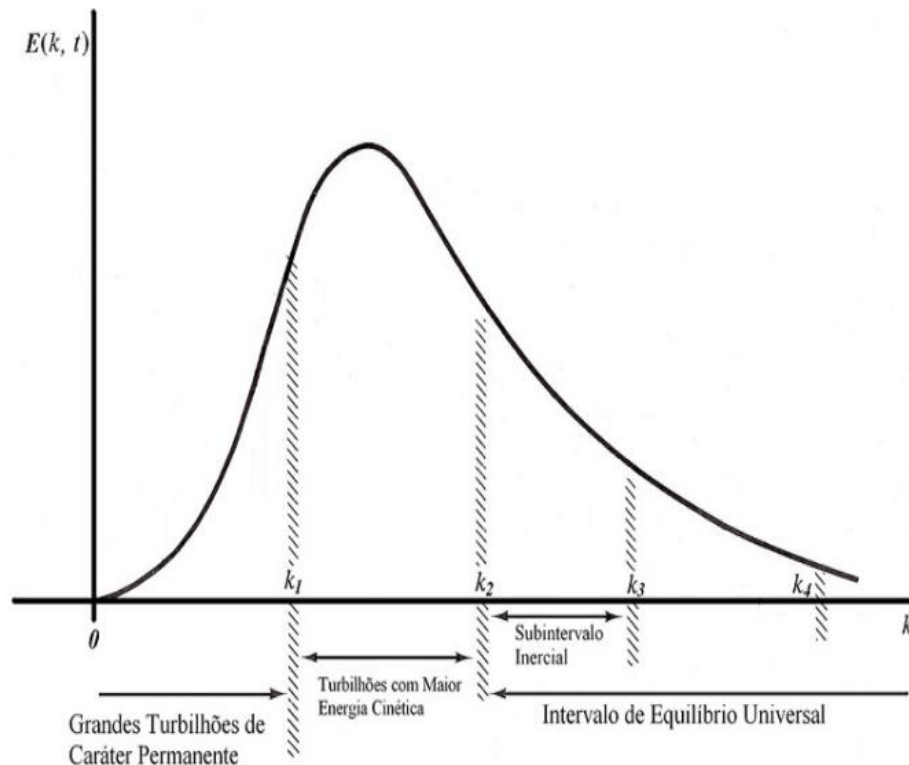


Figura 6: Forma do Espectro de Energia Tridimensional $E(k, t; z)$ em função do número de onda k para uma turbulência bem desenvolvida.

Fonte: Hinze (1975)

De acordo com a figura:

- **Grandes turbilhões de caráter permanente:** o intervalo de 0 a k_1 representa os maiores turbilhões de caráter permanente que não possuem a maior parcela de energia turbulenta total.
- **Turbilhões com maior energia cinética:** o intervalo de k_1 a k_2 corresponde aos turbilhões que possuem a maior parcela da energia turbulenta total, com grande influência no processo dispersivo e, como consequência, na parametrização dos fluxos turbulentos que será importante para obter uma escala de comprimento, em função dos termos e das características desses turbilhões com mais energia.
- **Subintervalo inercial:** o intervalo entre k_2 e k_3 corresponde aos turbilhões que não mudam a sua energia, embora seja grande a quantidade de energia transferida através dos

turbilhões. A dissipação é desprezível em comparação com o fluxo de energia transferida por efeitos inerciais.

- **Intervalo de equilíbrio universal:** corresponde ao intervalo entre k_2 e k_4 . O caráter da turbulência, nos números de onda, é inteiramente determinado pelo fluxo de energia, pela razão de dissipação “ ξ ”, onde ξ é a dissipação média de energia por unidade de massa do fluido. A soma do fluxo com a dissipação total é igual à energia total fornecida para esse intervalo.

Pode-se observar, na forma do espectro que, essa energia é proveniente dos turbilhões que possuem a maior quantidade de energia. Dessa forma, a ordem de magnitude de “ ξ ” pode ser determinada pelas quantidades que caracterizam os turbilhões mais energéticos.

CAPÍTULO 5

5 Modelo Matemático

O capítulo 5 apresenta a formulação do problema de fechamento da turbulência, bem como as técnicas utilizadas para se obter a solução semi-analítica tridimensional estacionária a partir da equação de difusão-advecção. A solução é obtida considerando uma fonte pontual, utilizando a junção das técnicas ADMM e GITT. Além disso, são aplicadas outras técnicas como: a Transformada de Laplace e o Esquema Numérico de Quadratura Gaussiana.

5.1 Técnica ADMM

Inicialmente, para a solução da equação de difusão advecção, assumem-se condições de contorno de fluxo de poluentes nulo na superfície e no topo da CLA:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0, h \quad (5.1)$$

Tendo em mente a dependência do coeficiente K_z e da velocidade do vento u da variável z , a altura h da CLA é discretizada em N camadas de modo que em cada intervalo, $K_z(z)$ e $u(z)$, assumem um valor médio constante:

$$K_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(z) dz \quad (5.2)$$

$$u_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} u(z) dz \quad (5.3)$$

Salienta-se que K_n assume um valor constante em $z_n \leq z \leq z_{n+1}$. As condições de continuidade de concentração e fluxo nas interfaces são consideradas:

$$C_n = C_{n+1} \quad n = 1, 2, \dots (N-1) \quad (4.4)$$

$$K_n \frac{\partial C_n}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots (N-1) \quad (5.5)$$

A equação de difusão-advecção é, então, resolvida pela técnica da Transformada de Laplace em cada subcamada. Na Figura 7, observa-se o esquema da discretização da Camada Limite Atmosférica.

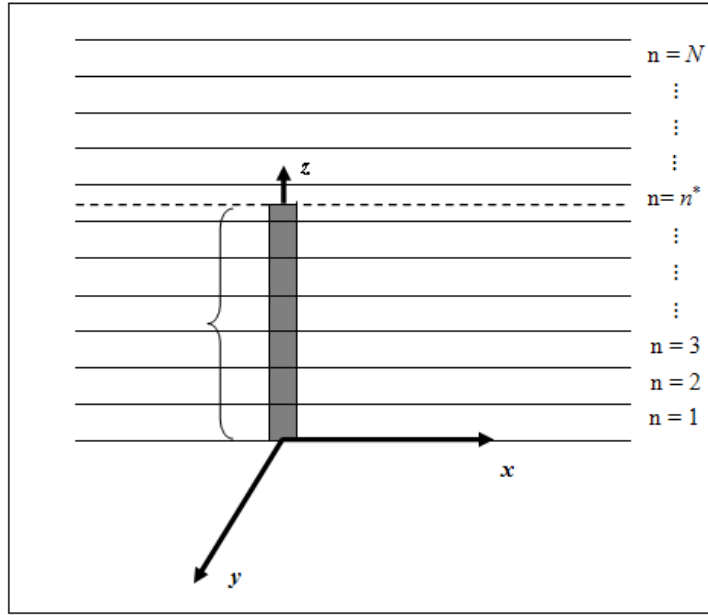


Figura 7: Esquema da CLA dividida em um sistema de multicamadas.

Fonte: Adaptada de Moreira e Vilhena (2005)

5.2 Técnica GITT

Seja a equação

$$A^* \vartheta(x, z) = F^* \quad \text{em } a < x < b \text{ e } z > 0 \quad (5.6)$$

sujeitas às condições de contorno homogêneas,

$$\left. \alpha_1 \frac{\partial \vartheta(x, z)}{\partial x} \right|_{x=a} + \alpha_2 \vartheta(a, z) = 0 \quad (5.7)$$

$$\left. \beta_1 \frac{\partial \vartheta(x, z)}{\partial x} \right|_{x=b} + \beta_2 \vartheta(b, z) = 0 \quad (5.8)$$

onde A^* é o operador diferencial parcial associado ao problema unidimensional, F^* é o termo fonte e $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ e β_2 são constantes dependentes das propriedades físicas do problema.

O primeiro passo é expandir $\vartheta(x, z)$ em uma base adequada. Para isso, reescreve-se o operador A^* da seguinte forma:

$$A^*\vartheta(x, z) = B^*\vartheta(x, z) + L^*\vartheta(x, z) \quad (5.9)$$

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

$$L^*\psi(\lambda, x) = \nabla \cdot [p(x)\nabla\psi(\lambda, x) + q(x)\psi(\lambda, x)] \quad (5.10)$$

As funções $p(x)$ e $q(x)$ devem ser reais e contínuas. Além disso, $p(x) > 0$ em todo o intervalo (a, b) .

Uma vez determinado o operador L^* , o problema auxiliar (problema de Sturm-Liouville) é definido pelas seguintes equações:

$$L^*\psi(\lambda, x) + \lambda^2\psi(\lambda, x) = 0 \quad \text{em } a < x < b, \quad (5.11)$$

$$\left. \alpha_1 \frac{\partial \psi(\lambda, x)}{\partial x} \right|_{x=a} + \alpha_2 \psi(\lambda, a) = 0 \quad (5.12)$$

$$\left. \beta_1 \frac{\partial \psi(\lambda, x)}{\partial x} \right|_{x=b} + \beta_2 \psi(\lambda, b) = 0 \quad (5.13)$$

onde $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ e β_2 são as mesmas constantes das equações (5.7) e (5.8). A equação 5.11 pode ser reescrita para um λ_i qualquer, uma vez que o parâmetro λ_i é independente das constantes $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1$ e β_2 . Assim,

$$L^*\psi(x) + \lambda^2\psi(x) = 0 \quad (5.14)$$

onde $\psi_i(x) \equiv \psi(\lambda_i, x)$. As funções λ_i e $\psi_i(x)$ são conhecidas respectivamente, como autovalores e autovetores do operador L^* , que formam uma base para o espaço onde o operador L^* , está contido, cuja ortogonalidade é dada por:

$$\frac{1}{\sqrt{N_i}} \frac{1}{\sqrt{N_j}} \int_v \psi_i(x) \psi_j(x) dx = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (5.15)$$

onde N_i é definida como

$$N_i = \int_v \psi_i^2(x) dx \quad (5.16)$$

A base de autofunções é usada para expandir a variável $\vartheta(x, y)$ da equação 5.6 na seguinte forma:

$$\vartheta(x, z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\bar{\vartheta}_i(z) \psi_i(x)}{\sqrt{N_i}} \quad (5.17)$$

A expansão acima (equação 5.17) é também conhecida na literatura como *Fórmula da Inversa da GITT*.

Após determinado o problema de autovalores e autovetores associados ao problema original e expandida a sua variável dependente, deve-se aplicar na equação 5.6 o seguinte operador, que é a transformada integral propriamente dita:

$$\frac{1}{\sqrt{N_j}} = \int_v \psi_j(x) dx \quad (5.18)$$

Assim, fazendo todas as integrações, o resultado é um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), cuja variável dependente é $\bar{\vartheta}_i(z)$. A obtenção desta variável é feita solucionando este sistema de equações, e a partir disso, o somatório da equação 5.17 pode ser truncado em um número de termos suficientemente grande para se determinar aproximadamente o potencial original $\vartheta(x, z)$.

5.3 Modelagem turbulenta e o problema de fechamento

Conhecer os processos que regem a dispersão de espécies no meio ambiente é de suma importância para as ciências ambientais, uma vez que associadas a métodos matemáticos (numéricos, analíticos ou híbridos) possibilitam a análise mais realista da influência de tais espécies no meio ambiente. Nos escoamentos, os processos de advecção e difusão de uma espécie representam o que acontece com um poluente ao ser liberado num meio fluido (atmosfera). Tradicionalmente, a abordagem desses escoamentos é realizada pelo princípio da

conservação de massa do poluente transportado, sendo que na maioria das vezes estes escoamentos apresentam caráter turbulento.

Uma vez que a circulação na atmosfera é turbulenta, é preciso compreender melhor o fenômeno de difusão a fim de se obter uma equação que governe o processo de mistura do poluente com o meio. Num escoamento turbulento as velocidades e concentrações são irregulares e tendem a oscilar em torno de seus valores médios de forma randômica, e isso dificulta uma descrição mais detalhada das concentrações e velocidade do escoamento. A solução para tal escoamento sem um tratamento matemático das equações que representam este, resultam em um aumento significativo do custo computacional, atentando assim para a necessidade de se aplicar uma modelagem aos termos turbulentos a fim de reduzir o custo computacional da solução do escoamento, sem perda significativa de informação sobre a turbulência.

Geralmente, o processo de transporte e dispersão de poluentes no meio é descrito pela equação de difusão-advecção. Considerando uma espécie genérica C que se conserve na atmosfera:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + S = 0 \quad (5.19)$$

onde u, v e w representam as componentes de velocidade do vento nas direções x, y e z respectivamente e S é o termo fonte.

Para contornar o problema descrito anteriormente, *Reynolds* propôs um modelo conceitual em que todas as variáveis de interesse são decompostas de uma parte média (definida pela barra superior) e uma flutuação em torno do valor médio (parte turbulenta, definida pelo apóstrofo), ou seja:

$$\begin{aligned} C &= \bar{C} + c' \\ u &= \bar{u} + u' \\ v &= \bar{v} + v' \\ w &= \bar{w} + w' \end{aligned} \quad (5.20)$$

As componentes médias são definidas através de médias temporais:

$$\begin{aligned}
\bar{C} &= \frac{1}{t} \int_0^t C \, dt \\
\bar{u} &= \frac{1}{t} \int_0^t u \, dt \\
\bar{v} &= \frac{1}{t} \int_0^t v \, dt \\
\bar{w} &= \frac{1}{t} \int_0^t w \, dt
\end{aligned} \tag{5.21}$$

O valor de t deve ser suficientemente grande quando comparado com tempo característico das flutuações turbulentas, mas deve ser pequeno quando comparado com as escalas temporais típicas das variações do escoamento médio, caso este não seja permanente (Tennekes, 1972). Este procedimento é conhecido como método de decomposição de *Reynolds*, cujo objetivo é definir equações para a evolução média das variáveis.

Ao aplicar a equação 5.20 na equação 5.19, a equação de difusão-advecção que descreve concentrações a partir de uma fonte contínua é reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = - \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S \tag{5.22}$$

onde C representa a concentração média dos poluentes ($\mu g/m^3$); u , v e w que são as componentes do vento médio na direção x , y e z respectivamente (m/s), e S é o termo fonte/sumidouro (por exemplo, reações químicas ou decaimento radioativo). Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam, respectivamente, os fluxos turbulentos de poluentes nas direções longitudinal, lateral e vertical.

Os fluxos turbulentos existentes na equação 5.22 são modelados utilizando a Teoria K, sendo aproximados pelo produto de um gradiente (representado neste trabalho como, a concentração por um coeficiente de difusão turbulento). Desta forma, há um problema de fechamento, visto que o termo representativo da difusão turbulenta não é reproduzido utilizando grandezas médias do escoamento. Esse problema é contornado com a aplicação da Teoria² K, um fechamento de primeira ordem comumente utilizado. Na Teoria K os fluxos turbulentos do escoamento devem ser diretamente proporcionais aos gradientes médios, com sinais inversos. Logo:

² Como o modelo se torna muito dependente dos coeficientes de difusão K, também são chamados de Modelos K. Assumindo que os coeficientes de difusão K sejam conhecidos, a única incógnita da equação passa a ser o valor médio de C . Por isso, este método é considerado de primeira ordem.

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial C}{\partial x}, \quad \overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (5.23)$$

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta na direção x , y e z respectivamente, responsáveis pela complexidade do fenômeno turbulento. Estes coeficientes de difusão turbulentos são então modeladas com parametrizações, sendo o objetivo principal deste trabalho.

5.4 Formulação da Solução Semi-Analítica Tridimensional Estacionária da equação de difusão-advecção através do método GIADMT

Fisicamente, os fluxos turbulentos nada mais são que advecções da componente turbulenta de C pela velocidade turbulenta, caracterizando o processo físico de transporte de quantidade devido à mistura entre camadas de ar, imposto pela variabilidade do escoamento turbulento (Costa, 2007).

Nesse sentido, considerando-se um sistema Cartesiano de coordenadas em que a direção x coincide com a do vento médio, a equação de difusão-advecção transiente 5.22 pode ser escrita como (Blackadar, 1997):

$$\underbrace{\frac{\partial C}{\partial t}}_{\text{Variação Local}} + \underbrace{u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z}}_{\text{Termos de Transporte (Advecção)}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{Termos Difusivos}} + S \quad (5.24)$$

Sabendo que a componente vertical do vento w é muito menor que as demais componentes, esta pode ser desprezada, ou seja ($w = 0$). Valendo-se das seguintes hipóteses simplificativas: estado estacionário ($\frac{\partial C}{\partial t} = 0$); perfil de velocidade do vento somente na direção do eixo x , isto é ($v = 0$) e termo fonte nulo/sem sumidouro ($S=0$), a equação 5.24 é reescrita da seguinte forma:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (5.25)$$

Frequentemente, os coeficientes de difusão são considerados constantes para resolver a equação de difusão-advecção, dessa forma, a solução encontrada se restringe somente aos casos de turbulência homogênea. Sendo assim, a equação 5.25 pode ser reescrita como:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (5.26)$$

Supondo que não há passagem de qualquer poluente, ou seja, o fluxo é zero no solo e no topo da CLA, a equação 5.26 está sujeita às seguintes condições de contorno:

Na direção z :

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0, h \quad (5.27a)$$

Na direção y :

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y \quad (5.27b)$$

Tem-se uma fonte pontual contínua, com taxa de emissão constante Q (g/s) na altura H_s (m), descrita como:

$$uc(0, y, z) = Q\delta(z - H_s)\delta(y - y_0) \quad \text{em } x = 0 \quad (5.28)$$

onde δ é a função Delta de Dirac, H_s indica a altura da fonte (m) e y_0 indica a posição da fonte na direção transversal (m).

Em casos de uma turbulência não-homogênea, considera-se que a velocidade do vento e os coeficientes de difusão turbulenta variam com a altura acima do solo, de acordo com uma parametrização especificada.

Para resolver a equação 5.26 aplica-se o método ADMM (Seção 5.1). A idéia desse método consiste em dividir a CLA em subcamadas, ou seja, o domínio da variável z é dividido em vários subdomínios, como demonstrado na Figura 7, sendo n^* a camada onde ocorre a emissão do poluente. Os parâmetros que dependem da altura z , tais como: os coeficientes de difusão K_z e o perfil da velocidade do vento u , assumem valor médio constante em cada camada (aproximação *stepwise*):

$$K_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(z) dz \quad (5.29)$$

$$u_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} u(z) dz \quad (5.30)$$

Salienta-se que K_n assume um valor constante em $z_n \leq z \leq z_{n+1}$.

Dessa forma, têm-se N problemas do mesmo tipo, acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo nas interfaces, como na Figura 7, descrita anteriormente.

Assim, considerando turbulência não-homogênea, a equação 5.26 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$u_n \frac{\partial C_n}{\partial x} = K_{xn} \frac{\partial^2 C_n}{\partial x^2} + K_{yn} \frac{\partial^2 C_n}{\partial y^2} + K_{zn} \frac{\partial^2 C_n}{\partial z^2} \quad (5.31)$$

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

Supondo contato perfeito entre as subcamadas nas quais a CLA foi dividida, consideram-se as condições de continuidade e fluxo na interface, respectivamente:

$$C_n = C_{n+1} \quad n = 1, 2, \dots (N-1) \quad (5.32)$$

$$K_{zn} \frac{\partial C_n}{\partial z} = K_{zn+1} \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots (N-1) \quad (5.33)$$

O formalismo da GITT (Cotta, 1993) postula que $C_n(x, y, z)$ pode ser expresso como uma expansão em série de autofunções ortogonais $\psi_i(y)$ para a direção y , onde i é a ordem dos correspondentes autovalores λ_i ,

$$C_n(x, y, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{C_n(x, z) \psi_i(y)}{N_i^{1/2}} \quad (5.34)$$

onde $N_i = \int_v \psi_i^2(y) dy$.

As autofunções e autovalores são determinados resolvendo um problema auxiliar que seja similar ao problema original. Nesse trabalho, determina-se o problema auxiliar de Sturm-Liouville da seguinte forma:

$$\psi_i''(y) + \lambda_i^2 \psi_i(y) = 0 \quad \text{em } 0 < y < L_y \quad (5.35)$$

com condições de contorno:

$$\psi_i'(y) = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y. \quad (5.36)$$

A solução do problema auxiliar da equação 5.34 é :

$$\psi_i(y) = \cos(\lambda_i y)$$

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

As funções $\psi_i(y)$ e λ_i são as autofunções e autovalores, respectivamente, associados ao problema de Sturm-Liouville.

Conhecidas as autofunções, é preciso determinar o potencial desconhecido. Para isso, substitui-se a equação 5.34 na equação 5.31, obtendo-se:

$$\begin{aligned} u_n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} &= K_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} + K_y \sum_{i=0}^{\infty} C_{ni}(x,z) \frac{\psi_i''(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} + \\ &+ K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} \end{aligned} \quad (5.37)$$

com (") indicando derivada de segunda ordem. A partir da equação 5.35 pode-se concluir que $\psi_i''(y) = -\lambda_i^2 \psi_i(y)$, assim a equação 5.37 pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} u_n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} &= K_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} - K_y \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 C_{ni}(x,z) \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} + \\ &+ K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} \end{aligned} \quad (5.38)$$

O próximo passo é aplicar o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}} dy$ na equação 5.38. Assim,

$$\begin{aligned} u_n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} dy &= K_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} dy - \\ &- K_y \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 C_{ni}(x,z) \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{\frac{1}{2}}} dy + K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} dy \end{aligned} \quad (5.39)$$

As integrais presentes na equação 5.39 se anulam para $i \neq j$ e valem 1 quando $i = j$. Assim,

$$u_n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x} = K_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2} - K_y \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_i^2 C_{ni}(x,z) + K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2} \quad (5.40)$$

Usando a propriedade de ortonormalidade e dividindo por K_z , a equação 5.40 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2} + \frac{K_x}{K_z} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2} - \frac{u_n}{K_z} \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x} - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 C_{ni}(x,z) = 0 \quad (5.41)$$

Para a condição de fonte (equação 5.28), a variável é expandida na equação 5.30, e aplicando o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{\frac{1}{2}}} dy$, obtém-se:

$$\sum_{i=0}^{\infty} u_n C_{ni}(0,z) \int_0^{L_y} \frac{\psi_i \psi_j}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} dy = \int_0^{L_y} \frac{Q \delta(z-H_s) \delta(y-y_0) \psi_j}{N_j^{\frac{1}{2}}} dy \quad (5.42)$$

Após as devidas substituições e integrações:

$$C_n(0,z) = \frac{Q \delta(z-H_s) \psi_i(y_0)}{u_n N_i^{\frac{1}{2}}} \quad \text{em } x=0 \quad (5.43)$$

Para resolver a equação 5.41, aplica-se a Transformada de Laplace, denotando por $\mathcal{L}\{C_n(x,z)\} = \widehat{C}_{ni}(s,z)$, como segue:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2} + \frac{K_x}{K_z} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2} - \frac{u_n}{K_z} \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x} - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 C_{ni}(x,z)\right\} \quad (5.44)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{u_n}{K_z} \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x}\right\} = \mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2}\right\} + \mathcal{L}\left\{\frac{K_x}{K_z} \frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2}\right\} - \mathcal{L}\left\{\frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 C_{ni}(x,z)\right\} \quad (5.45)$$

$$\frac{u_n}{K_z} \mathcal{L}\left\{\frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x}\right\} = \mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2}\right\} + \frac{K_x}{K_z} \mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2}\right\} - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 \mathcal{L}\{C_{ni}(x,z)\} \quad (5.46)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial z^2}\right\} - \frac{u_n}{K_z} \mathcal{L}\left\{\frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x}\right\} + \frac{K_x}{K_z} \mathcal{L}\left\{\frac{\partial^2 C_{ni}(x,z)}{\partial x^2}\right\} - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 \mathcal{L}\{C_{ni}(x,z)\} = 0 \quad (5.47)$$

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \widehat{C}_{ni}(s,z)}{dz^2} - \frac{u_n}{K_z} [s \widehat{C}_{ni}(s,z) - C_{ni}(0,z)] + \frac{K_x}{K_z} [s^2 \widehat{C}_{ni}(s,z) - s C_{ni}(0,z) - \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x}] - \\ & \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 [\widehat{C}_{ni}(s,z)] = 0 \end{aligned} \quad (5.48)$$

Sabendo que $\left. \frac{\partial C_{ni}(x,z)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$ e aplicando a condição de entrada dada (equação 5.43), a

equação 5.48 torna-se:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 \widehat{C}_{ni}(s,z)}{dz^2} - \frac{u_n}{K_z} s \widehat{C}_{ni}(s,z) + \frac{u_n}{K_z} \frac{Q \delta(z-H_s) \psi_i(y_0)}{u_n N_i^{\frac{1}{2}}} + \frac{K_x}{K_z} s^2 \widehat{C}_{ni}(s,z) - \frac{K_x}{K_z} s \frac{Q \delta(z-H_s) \psi_i(y_0)}{u_n N_i^{\frac{1}{2}}} - \\ & - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 \widehat{C}_{ni}(s,z) = 0 \end{aligned} \quad (5.49)$$

Reorganizando a equação 5.49:

$$\frac{d^2 \widehat{C_{ni}}(s,z)}{dz^2} - \widehat{C_{ni}}(s,z) \left[\frac{u_n}{K_z} s - \frac{K_x}{K_z} s^2 - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 \right] - \frac{Q\delta(z-H_s)\psi_i(y_0)}{u_n N_i^{\frac{1}{2}}} \left[\frac{K_x}{K_z} s - \frac{u_n}{K_z} \right] = 0 \quad (5.50)$$

$$\frac{d^2 \widehat{C_{ni}}(s,z)}{dz^2} - \widehat{C_{ni}}(s,z) \left[\frac{u_n}{K_z} s - \frac{K_x}{K_z} s^2 - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 \right] = \frac{Q\delta(z-H_s)\psi_i(y_0)}{u_n N_i^{\frac{1}{2}}} \left[\frac{K_x}{K_z} s - \frac{u_n}{K_z} \right] \quad (5.51)$$

$$\frac{d^2 \widehat{C_{ni}}(s,z)}{dz^2} - \left[\frac{u_n s - K_x s^2 + K_y \lambda_i^2}{K_z} \right] \widehat{C_{ni}}(s,z) = \left[\frac{K_x s - u_n s}{u_n K_z} \right] \frac{\psi_i(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}} Q\delta(z-H_s) \quad (5.52)$$

Para facilitar a notação, define-se:

$$A_n = \frac{(u_n s - K_x s^2 + K_y \lambda_i^2)}{K_z} \quad \text{e} \quad B_n = \frac{K_x s - u_n s}{u_n K_z} \frac{\psi_i(y_0)}{N_i^{\frac{1}{2}}}$$

Assim, a equação 5.52 pode ser reescrita desta forma:

$$\frac{d^2 \widehat{C_{ni}}(s,z)}{dz^2} - A_n \widehat{C_{ni}}(s,z) = B_n Q\delta(z-H_s) \quad (5.53)$$

A solução geral C_g da equação 5.53 pode ser escrita sob a forma:

$$C_g = C_h + C_p \quad (5.54)$$

onde C_h é a solução homogênea e C_p é a solução particular.

5.4.1 Solução Homogênea

A solução homogênea associada à equação 5.53 é dada por:

$$\frac{d^2 \widehat{C_{ni}}(s,z)}{dz^2} - A_n \widehat{C_{ni}}(s,z) = 0 \quad (5.55)$$

Resolvendo, obtém-se:

$$R_n^2 - A_n = 0$$

$$R_n^2 = A_n$$

$$R_n = \sqrt{A_n}$$

Portanto, a solução homogênea é:

$$C_h = C_{1n}e^{R_n z} + C_{2n}e^{-R_n z} \quad (5.56)$$

5.4.2 Solução Particular

Para se chegar à solução particular, relaciona-se a solução particular com a solução homogênea, de forma que possa ser escrita sob a forma integral:

$$C_p = \int_0^z G(z, \xi) h(\xi) d\xi \quad (5.57)$$

onde $h(\xi)$ é uma função impulso, nesse caso $h(\xi) = B_n Q \delta(z - H_s)$ e $G(z, \xi)$ é a *Função de Green* definida por:

$$G(z, \xi) = \frac{y_2(z)y_1(\xi) - y_1(z)y_2(\xi)}{W[y_1(\xi), y_2(\xi)]} \quad (5.58)$$

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

$$W[y_1(\xi), y_2(\xi)] = \begin{vmatrix} y_1(\xi) & y_2(\xi) \\ y_1'(\xi) & y_2'(\xi) \end{vmatrix} \quad (5.59)$$

com

$$y_1(z) = e^{R_n z} \text{ e } y_2(z) = e^{-R_n z}$$

Encontram-se $W[y_1(\xi), y_2(\xi)]$ resolvendo o determinante da matriz $W[y_1(\xi), y_2(\xi)]$.

$$W[y_1(\xi), y_2(\xi)] = \begin{vmatrix} e^{R_n \xi} & e^{-R_n \xi} \\ R_n e^{R_n \xi} & -R_n e^{-R_n \xi} \end{vmatrix}$$

Logo,

$$\det W[y_1(\xi), y_2(\xi)] = -2R_n \quad (5.60)$$

Portanto, a *Função de Green* procurada para este problema é:

$$G(z, \xi) = \frac{e^{-R_n z} e^{R_n \xi} - e^{R_n z} e^{-R_n \xi}}{-2R_n} \quad (5.61)$$

Assim,

$$\begin{aligned}
C_p &= \int_0^z \frac{e^{-R_n z} e^{R_n \xi} - e^{R_n z} e^{-R_n \xi}}{-2R_n} [B_n Q \delta(z - H_s)] d\xi \\
C_p &= \int_0^z \frac{e^{R_n(z-\xi)} - e^{-R_n(z-\xi)}}{2R_n} [-B_n Q \delta(z - H_s)] d\xi \\
C_p &= \frac{-B_n Q}{2R_n} \left[e^{-R_n z} \int_0^z e^{R_n \xi} \delta(\xi - H_s) d\xi - e^{R_n z} \left(\int_0^z e^{-R_n \xi} \delta(\xi - H_s) d\xi \right) \right] \\
C_p &= \frac{-B_n Q}{2R_n} [e^{-R_n z} e^{R_n H} - e^{R_n z} e^{-H}] H(z - H_s) \\
C_p &= \frac{-B_n Q}{2R_n} [e^{-R_n(z-H_s)} - e^{R_n(z-H_s)}] H(z - H_s) \text{ ou ainda,} \\
C_p &= \frac{B_n Q}{2R_n} [e^{R_n(z-H_s)} - e^{-R_n(z-H_s)}] H(z - H_s) \tag{5.62}
\end{aligned}$$

Fazendo $R_a = \frac{N_i^{1/2}}{\psi_i(y_0)} \frac{\sqrt{K_z(u_n s \beta + K_y \lambda_i^2)}}{\beta}$ onde $\beta = \left(1 - \frac{K_x s}{u_n}\right)$.

Obtém-se a solução particular:

$$C_p = \frac{Q}{2R_a} [e^{R_n(z-H_s)} - e^{-R_n(z-H_s)}] H(z - H_s) \tag{5.63}$$

onde H é a *Função Heaviside*.

5.4.3 Solução Geral

Encontrada a solução homogênea e a solução particular, a solução geral é então dada por:

$$C_g = C_h + C_p \text{ ou seja,} \tag{5.64}$$

$$C_g = C_{1n} e^{R_n z} + C_{2n} e^{-R_n z} + \frac{Q}{2R_a} [e^{R_n(z-H_s)} - e^{-R_n(z-H_s)}] H(z - H_s) \tag{5.65}$$

Para se determinar as constantes C_{1n} e C_{2n} , aplicam-se as (2N-2) condições de continuidade de interface (equação 5.32 e 5.33).

Em $z = 0$; $K_z \frac{\partial C}{\partial z} C_{i1}(s, 0) = 0$

$$\begin{aligned}
\text{Em } z = z_1; \quad & \begin{cases} C_{i1}(s, z_1) = C_{i2}(s, z_1) \\ K_{z_1} \frac{\partial C}{\partial z} C_{i1}(s, z_1) = K_{z_2} \frac{\partial C}{\partial z} C_{i2}(s, z_1) \end{cases} \\
\\
\text{Em } z = z_2; \quad & \begin{cases} C_{i2}(s, z_2) = C_{i3}(s, z_2) \\ K_{z_2} \frac{\partial C}{\partial z} C_{i2}(s, z_2) = K_{z_3} \frac{\partial C}{\partial z} C_{i3}(s, z_2) \end{cases} \\
\\
\text{Em } z = z_3; \quad & \begin{cases} C_{i3}(s, z_3) = C_{i4}(s, z_3) \\ K_{z_3} \frac{\partial C}{\partial z} C_{i3}(s, z_3) = K_{z_4} \frac{\partial C}{\partial z} C_{i4}(s, z_3) \end{cases} \\
\\
& \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\
\\
\text{Em } z = z_{(N-1)}; \quad & \begin{cases} C_{i(N-1)}(s, z_{(N-1)}) = C_{iN}(s, z_{(N-1)}) \\ K_{z_{(N-1)}} \frac{\partial C}{\partial z} C_{i(N-1)}(s, z_{(N-1)}) = K_{z_N} \frac{\partial C}{\partial z} C_{iN}(s, z_{(N-1)}) \end{cases} \\
\\
\text{Em } z = z_h; \quad & K_{z_N} \frac{\partial C}{\partial z} C_{iN}(s, h) = 0
\end{aligned} \tag{5.66}$$

Com as expressões obtidas na equação 5.66, chega-se a um sistema linear de dimensão

($d = 2N$), dado por $MX = b$:

$$M = \begin{vmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & M_{46} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{53} & M_{54} & M_{55} & M_{56} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{65} & M_{66} & M_{67} & M_{68} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{75} & M_{76} & M_{77} & M_{78} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d-1, d-3} & M_{d-1, d-2} & M_{d-1, d-1} & M_{d-1, d} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d, d-1} & M_{d, d} \end{vmatrix} \tag{5.67}$$

$$X = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{21} & C_{12} & C_{22} & C_{13} & C_{23} & \dots & \dots & C_{1N} & C_{2N} \end{vmatrix}^T \tag{5.68}$$

$$b = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -Sp_{n^*} & -Sp'_{n^*} & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \quad (5.69)$$

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

$$Sp_{n^*} = \frac{Q}{2R_a} [e^{R_n(z-H_s)} - e^{-R_n(z-H_s)}] \quad (5.70)$$

$$Sp'_{n^*} = \frac{QR_n}{2R_a} [e^{R_n(z-H_s)} - e^{-R_n(z-H_s)}] \quad (5.71)$$

Com a matriz M definida, de forma que:

$$M_{11} = R_{i1}$$

$$M_{12} = -R_{i1}$$

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

$$M_{2n,2n-1} = e^{[R_{in}]z_n}$$

$$M_{2n,2n} = e^{[-R_{in}]z_n}$$

$$M_{2n,2n+1} = -e^{[R_{i n+1}]z_n}$$

$$M_{2n,2n+2} = e^{[-R_{i n+1}]z_n}$$

$$M_{2n+1,2n-1} = K_{z_n} [R_{in}] e^{[R_{in}]z_n}$$

$$M_{2n+1,2n} = K_{z_n} [-R_{in}] e^{[-R_{in}]z_n}$$

$$M_{2n+1,2n+1} = -K_{z_{(n+1)}} [R_{i n+1}] e^{[R_{i n+1}]z_n}$$

$$M_{2n+1,2n+2} = -K_{z_{(n+1)}} [-R_{i n+1}] e^{[-R_{i n+1}]z_n}$$

E, por fim:

$$M_{d,d-1} = [+R_{iN}] e^{[+R_{iN}]z_N}$$

$$M_{d,d} = [-] e^{[-R_{iN}]z_N}$$

onde

$$R_n = \sqrt{\frac{u_n s - K_x s^2 + K_y \lambda_i^2}{K_z}} \quad (5.72)$$

5.4.4 Transformada Inversa de Laplace

Para se obter o valor de $C_{ni}(x, z)$ é necessário aplicar a Transformada Inversa de Laplace na solução 5.65. Assim, obtém-se a seguinte solução integral para o problema proposto:

$$C_{ni}(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{sx} \left[C_{1n} e^{R_n z} + C_{2n} e^{-R_n z} + \frac{Q}{2R_a} [e^{R_n(z-H_s)} - e^{-R_n(z-H_s)}] H(z-H_s) \right] ds \quad (5.73)$$

Desta forma, é possível escrever a expressão de $C_{ni}(x, y, z)$, voltando à equação 5.34:

$$C_{ni}(x, y, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{C_n(x, z) \psi_i(y)}{N_i^{1/2}}$$

Assim,

$$C_{ni}(x, y, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{C_n(x, z) \psi_i(y)}{N_i^{1/2}} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{sx} \left[C_{1n} e^{R_n z} + C_{2n} e^{-R_n z} + \frac{Q}{2R_a} [e^{R_n(z-H_s)} - e^{-R_n(z-H_s)}] H(z-H_s) \right] ds \quad (5.74)$$

O último termo do lado direito é válido somente para a subcamada que contém a fonte.

5.4.5 Inversão da solução pelo Esquema de *Quadratura de Gauss*

Devido à complexidade da integral de linha, presente na solução dada pela equação 5.74, optou-se por resolvê-la numericamente pelo método da *Quadratura de Gauss* face ao caráter exponencial da solução, pois se sabe que este método não funciona bem para funções oscilatórias (Stroud e Secrest, 1966). Desta forma, a solução (equação 5.73) pode ser aproximada na forma:

$$C_n(x, z) = \mathcal{L}^{-1}\{\widehat{C_{ni}}(s, z)\} = \sum_{k=1}^M \frac{p_k}{x} w_k \widehat{C_{ni}}\left(\frac{p_k}{x}; z\right) \quad (5.75)$$

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

Portanto:

$$C_{ni}(x, z) = \sum_{k=1}^M \frac{p_k}{x} w_k (C_{1n} e^{R_n z} + C_{2n} e^{-R_n z}) \quad (5.76)$$

onde não há fonte, e:

$$\widehat{C}_{ni}(x, z) = \sum_{k=1}^M \frac{p_k}{x} a_k \left[C_{1n} e^{G_n z} + C_{2n} e^{-G_n z} + \frac{Q}{2R_a} [e^{-G_n(z-H_s)} - e^{G_n(z-H_s)}] H(z - H_s) \right] \quad (5.77)$$

onde há emissão de fonte, sendo que:

$$G_n = \sqrt{\frac{1}{K_z} \left(\frac{p_k}{x} u_n \beta^* + K_y \lambda_i^2 \right)}; \quad F_a = \frac{\sqrt{N_i}}{\psi_i(y_0)} \frac{\sqrt{K_z [(p_k/x) u_n \beta^* + K_y \lambda_i^2]}}{\beta^*} \quad \text{e} \quad \beta^* = \left(1 - \frac{p_k}{p_e} \right)$$

$H(z - H_s)$ é a *Função Heaviside*; $p_e = u_n x / K_x$ é o *Número de Peclet* e representa a relação entre o transporte difusivo e o transporte advectivo (Moreira *et al.*, 2005c); as constantes a_k e p_k são os pesos e as raízes do esquema de Quadratura Gaussiana, tabulados por Stroud e Secrest (1996); k é o ponto da quadratura.

Então, usando a inversa da equação 5.34, a concentração final em termos da Quadratura Gaussiana pode ser escrita da seguinte forma:

$$C_n(x, y, z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\psi_i(y)}{\sqrt{N_i}} \left\{ \sum_{k=1}^M \frac{p_k}{x} a_k \left[C_{1n} e^{G_n z} + C_{2n} e^{-G_n z} + \frac{Q}{2R_a} [e^{-G_n(z-H_s)} - e^{G_n(z-H_s)}] H(z - H_s) \right] \right\} \quad (5.78)$$

Essa equação é truncada para um número suficientemente grande de termos, com a finalidade de obter a solução final para o problema.

O método GIADMT utilizado neste trabalho, é considerado simples por generalizar a solução bidimensional resolvida pela técnica ADMM, para um problema 3D, assim como a solução tridimensional apresentada também pode ser reduzida à solução bidimensional, resolvida pela técnica ADMM.

CAPÍTULO 6

6 Metodologia

6.1 Validação da Solução Semi-analítica Tridimensional

A fim de verificar a consistência física do modelo, o presente trabalho têm como base os dados experimentais de Copenhagen (Gryning e Lick, 2002) a serem confrontados com os dados obtidos pela solução.

O experimento é considerado ser de fonte alta ou baixa a partir da razão entre a altura em que ocorre a emissão de poluentes (H_s) e a altura da CLC (h). Assim,

$$\begin{aligned} \text{se } \frac{H_s}{h} < 0.1, & \quad \text{considera-se experimento de fonte baixa;} \\ \text{se } \frac{H_s}{h} > 0.1, & \quad \text{considera-se experimento de fonte alta.} \end{aligned}$$

Já a razão entre a altura da CLC (h) e o comprimento de Monin-Obukov (L) determina o tipo de convecção do experimento, sendo (Panofsky e Dutton, 1984; Buske, 2004):

$$\begin{aligned} \frac{h}{|L|} < 5, & \quad \text{convecção fraca;} \\ 5 < \frac{h}{|L|} < 10, & \quad \text{convecção moderada;} \\ \frac{h}{|L|} > 10, & \quad \text{convecção alta.} \end{aligned}$$

Os experimentos foram realizados ao norte da cidade de Copenhagen, onde um gás traçador Hexafluoreto de Enxofre (SF_6) foi liberado sem empuxo de uma torre de 115m de altura e foi coletado ao nível do solo ($z=0$) por três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem (arcos) foram posicionadas em distâncias de 2-6 km do ponto de lançamento. A liberação do traçador teve início 1h antes da amostragem e parou ao final do mesmo período de 1h, com imprecisões de 10%. A região do experimento era plana com um comprimento de rugosidade de 0.6m (altura em que o vento é zero).

A Figura 8 traz a representação esquemática do Experimento de Copenhagen. Na figura, a linha cheia indica o litoral de Øresund. O eixo x está apontando para Leste, o eixo y para norte

e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos nos arcos concêntricos em relação à fonte. Foram instalados e distribuídos aproximadamente 20 sensores ao longo de cada arco.

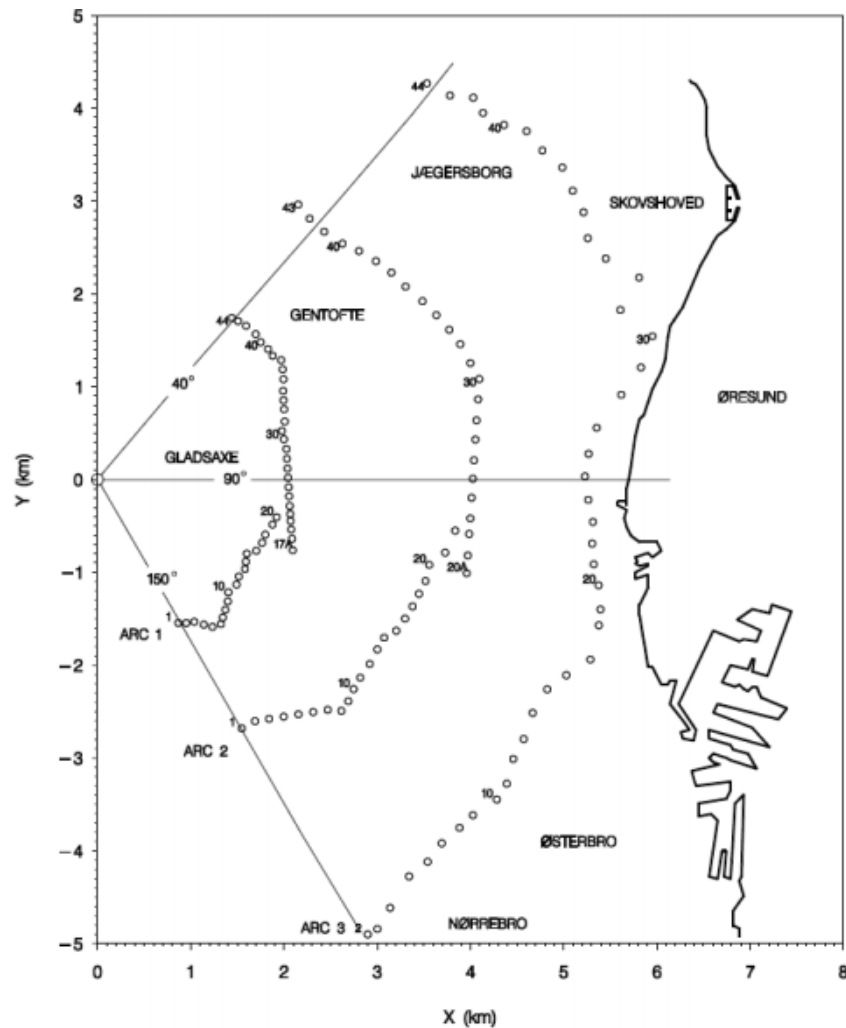


Figura 8: Representação esquemática do Experimento de Copenhague.

Fonte: Gryning e Lyck (2002)

Na Tabela 1 e Tabela 2 são exibidos os dados micrometeorológicos e as concentrações máximas observadas, obtidos a partir de Gryning e Lyck (2002), a serem utilizados para a avaliação da solução tridimensional.

Tabela 1: Parâmetros micrometeorológicos dos Experimentos de Copenhagen.

<i>Exp.</i>	U (m/s)	u_* (m/s)	L (m)	w_* (m/s)	h (m)
1	3,4	0,37	-46	1,8	1980
2	10,6	0,74	-384	1,8	1920
3	5,0	0,39	-108	1,3	1120
4	4,6	0,39	-173	0,7	390
5	6,7	0,46	-577	0,7	820
6	13,2	1,07	-569	2,0	1300
7	7,6	0,65	-136	2,2	1850
8	9,4	0,70	-72	2,2	810
9	10,5	0,77	-382	1,9	2090

Fonte: Gryning e Lyck (2002)

onde U é a velocidade do vento médio (m/s), u_* representa a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Monin-Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s) e h é a altura (m) da CLC.

Tabela 2: Concentrações máximas observadas para o Experimento de Copenhagen em diferentes distâncias da fonte.

Experimento	Distância (m)	$C(x, 0, 0)/Q [10^{-7} sm^{-3}]$
1	1900	10,50
	3700	2,14
2	2100	9,85
	4200	2,83
3	1900	16,33
	3700	7,95
	5400	3,76
4	4000	15,71
5	2100	12,11
	4200	7,24
	6100	4,75
6	2000	7,44
	4200	3,47
	5900	1,74
7	2000	9,48
	4100	2,62
	5300	1,15
8	1900	9,76
	3600	2,64
	5300	0,98
9	2100	8,52
	4200	2,66
	6000	1,98

Fonte: Gryning e Lyck (2002)

6.2 Parametrização da Turbulência Atmosférica

A presença de turbulência é a principal característica da CLA, pois é responsável pela alta capacidade difusiva. Esta característica é representada na equação 5.24 pelos coeficientes de difusão. A escolha adequada de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para complementar a modelagem do transporte de contaminantes na atmosfera, uma vez que, relacionam-se os fenômenos naturais com os modelos matemáticos, na tentativa de descrever a física da turbulência. A confiabilidade do modelo depende da forma como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados à da estrutura da CLA.

As condições atmosféricas são fatores importantes a serem observados ao aplicar uma parametrização para o coeficiente de difusão, por configurarem situações distintas na atmosfera. Desta forma, as expressões utilizadas para representar as parametrizações dos coeficientes de difusão turbulenta são consideradas de acordo com a condição de estabilidade da atmosfera. A próxima seção descreve as parametrizações utilizadas no presente trabalho.

6.2.1 Coeficientes de Difusão

6.2.1.1 Coeficientes de Difusão Verticais

A literatura traz uma grande variedade de expressões para o cálculo do coeficiente de difusão vertical. Para avaliar a importância do coeficiente de difusão turbulento vertical ante a solução semi-analítica tridimensional, testam-se neste trabalho as parametrizações dependentes somente da turbulência, sugeridas por: Ulke (2000); Hanna (1982); *Similaridade* (Panofsky e Dutton, 1988); Degrazia *et al.* (1997); Degrazia *et al.* (2000); Troem e Mahrt (Pleim e Chang, 1992); *Lamb e Durran* (Seinfeld e Pandis, 1997); Degrazia *et al.* (2001) [A]; Degrazia *et al.* (2001) [B] e Pleim (2007).

Ressalta-se que, neste trabalho foram aplicadas apenas as equações para atmosfera instável, devido as condições dos experimentos utilizados para validar a solução.

O primeiro coeficiente de difusão foi desenvolvido por Ulke (2000) e é utilizado em toda a CLA. A expressão para tal parametrização é dada por:

$$K_z = ku_* h \left(\frac{z}{h} \right) \left(1 - \frac{z}{h} \right) \left(1 - 22 \frac{h}{L} \frac{z}{h} \right)^{1/4} \quad (6.1)$$

onde h é a altura (m) da CLA, u_* é a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Monin–Obukhov (m) e $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán.

O coeficiente de difusão deduzido por Degrazia *et al.* (1997) foi desenvolvido a partir da teoria da difusão estatística de Taylor e do espectro de energia turbulenta. É utilizado em toda a CLA e é válido para grandes tempos de difusão, sendo este calculado da forma:

$$K_z = 0,22 w_* h \left(\frac{z}{h} \right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{1/3} \left[1 - \exp \left(-4 \frac{z}{h} \right) - 0,0003 \exp \left(8 \frac{z}{h} \right) \right] \quad (L \leq 0) \quad (6.2)$$

onde h é a altura da camada convectiva (m) e w_* é a velocidade convectiva (m/s).

A formulação de Troen e Mahrt, descrita nos trabalhos de Pleim e Chang (1992) é utilizada em toda a CLA. É definida como:

$$K_z = kw_* z \left(1 - \frac{z}{h} \right) \quad \left(\frac{h}{L} < -10 \right) \quad (6.3)$$

onde h é a altura da CLA (m), w_* é a velocidade convectiva (m/s) e $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán.

A formulação para coeficiente de difusão vertical desenvolvida por Hanna (1982), empregada na CLC para grandes tempos de viagem (ou distância), é expressa como:

$$K_z = w_* h \left[0,114 \left(\frac{z}{h} \right)^{0,175} \left(1 - \exp \left(-\frac{5z}{h} \right) \right) \right] \quad \text{se } 0 \leq \frac{z}{h} \leq 0,4 \quad (6.4)$$

$$K_z = w_* h \left[0,108 \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{0,207} \left(1 - \exp \left(-\frac{5z}{h} \right) \right) \right] \quad \text{se } 0,4 < \frac{z}{h} \leq 1 \quad (6.5)$$

onde h é a altura da CLC (m), w_* é a velocidade convectiva (m/s) e $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán.

A fórmula de *Similaridade* (Panofsky e Dutton, 1988) é utilizada somente na Camada Limite Superficial e é definida como:

$$K_z = \frac{ku_* z}{\left(1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{z}{h} \right)} \quad (z/L < 0) \quad (6.6)$$

onde u_* é a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Monin–Obukhov (m) e $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán.

O coeficiente de difusão desenvolvido por Degrazia *et al.* (2000) se baseia na Teoria Estatística de Taylor e de propriedades espectrais. Tal coeficiente de difusão é calculado da forma:

$$K_z = 0,16w_*h \left(0,01 \frac{h}{-L}\right)^{\frac{1}{2}} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right]^{4/3} \quad (L < 0) \quad (6.7)$$

onde h é a altura da CLC (m), w_* é a velocidade convectiva (m/s) e L é o comprimento de Monin–Obukhov (m).

As expressões empíricas propostas por Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997) consideram as fontes de emissão próximas ou ao nível do solo:

$$K_z = w_*h 2,5 \left(k \frac{z}{h}\right)^{4/3} \left(1 - 15 \frac{z}{L}\right)^{1/4} \quad 0 \leq \frac{z}{h} < 0,05 \quad (6.8)$$

$$K_z = w_*h \left[0,021 + 0,408 \left(\frac{z}{h}\right) + 1,351 \left(\frac{z}{h}\right)^2 - 4,096 \left(\frac{z}{h}\right)^3 + 2,560 \left(\frac{z}{h}\right)^4\right] \quad 0,05 \leq \frac{z}{h} \leq 0,6 \quad (6.9)$$

$$K_z = w_*h 0,2 \exp\left[6 - 10 \left(\frac{z}{h}\right)\right] \quad 0,6 < \frac{z}{h} < 1,1 \quad (6.10)$$

$$K_z = w_*h 0,0013 \quad \frac{z}{h} > 1,1 \quad (6.11)$$

onde h é a altura da CLC (m), w_* é a velocidade convectiva (m/s), L é o comprimento de Monin–Obukhov (m) e $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán.

Outro coeficiente de difusão turbulenta deduzido por Degrazia *et al.* (2001) [A] válido para distâncias longe da fonte utilizado neste trabalho, é dado por:

$$K_z = 0,19w_*h\psi^{1/3} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right]^{4/3} \quad (6.12)$$

onde h é a altura da CLC (m), w_* é a velocidade convectiva (m/s) e ψ é a função taxa de dissipação molecular e, é descrita por:

$$\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-2/3} + 0,75\right]^{1/3} \quad (6.13)$$

L é o comprimento de Monin–Obukhov (m).

O coeficiente de difusão formulado por Degrazia *et al.* (2001) [B] é válido para grandes tempos de difusão e, foi estimado a partir da Teoria Estatística de Taylor e de propriedades espectrais:

$$K_z = \frac{0,55}{4} \frac{\sigma_w z}{(f_m^*)_w} \quad (6.14)$$

O desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical é obtido através de:

$$\sigma_w^2 = 1,06 c_w \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_w^{2/3}} \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2 \quad (6.15)$$

onde

$$\psi = 1,5 - 1,2 \left[\left(\frac{z}{h}\right)^{1/3} \right] \quad (6.16)$$

é a taxa de dissipação molecular da velocidade turbulenta (Druilhet *et al.*, 1983).

A parametrização descrita nos trabalhos de Pleim (2007) foi obtida a partir da combinação de termos que levam em conta o caráter local e não-local no fechamento da turbulência na equação de difusão-advectação. A expressão para tal coeficiente de difusão vertical, considerando atmosfera sob condições instáveis $\left(\frac{z_s}{L} < 0\right)$ é definida como:

$$K_z = K_z(z)(1 - f_{conv}) \quad (6.17)$$

com

$$K_z(z) = k \frac{u_*}{\phi\left(\frac{z_s}{L}\right)} z \left(1 - \frac{z}{h}\right)^2, \quad (6.18)$$

$$f_{conv} = \left[1 + \frac{k^{-2/3}}{0.1a} \left(-\frac{h}{L}\right)^{-1/3} \right]^{-1} \quad (6.19)$$

$$\phi = \left(1 - 16 \frac{z}{L}\right)^{-1/2} \quad (6.20)$$

onde $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán; $a=7,2$; u_* é a velocidade de fricção (m/s), h é a altura da CLC (m); $z_s = \min(z, 0.1h)$; f_{conv} é o parâmetro que controla o grau de comportamento local versus não-local.

6.2.1.2 Coeficiente de Difusão Lateral

Para se obter a concentração tridimensional do poluente $C(x, y, z)$, o coeficiente de difusão lateral foi modelado a partir da expressão proposta por Tangermann (1978), da seguinte forma:

$$K_y = K_z^{Max} \quad (6.21)$$

onde K_z é o coeficiente de dispersão vertical (m^2/s).

O presente trabalho não levou em consideração a difusão na direção horizontal (x), ou seja, desprezou-se as condições de vento fraco. Sendo assim, $K_x = 0$.

6.2.1.3 Perfil do Vento

O perfil da velocidade média do vento é parametrizado de acordo com a Equação de Similaridade (Panofsky e Dutton, 1988), definida como:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_o} \right) - \Psi_m \left(\frac{z_o}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b \quad (6.22)$$

onde k é a constante de von Kármán ($k \cong 0,4$), u_* é a velocidade de fricção, L é o comprimento de Monin-Obukov, z_o é o comprimento de rugosidade do terreno, $z_b = \min[|L|, 0.1h]$ e Ψ_m é a função estabilidade expressa por (Paulsen, 1975):

$$\Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) = -4.7 \frac{z}{L} \quad \text{para } 1/L \geq 0 \quad (6.23)$$

$$\Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) = \ln \left(\frac{1+x^2}{2} \right) + \ln \left(\frac{1+x}{2} \right)^2 - 2 \arctan x + \frac{\pi}{2} \quad \text{para } 1/L < 0 \quad (6.24)$$

com $x = \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{1/4}$.

Alternativamente, a velocidade do perfil de vento pode ser descrita por uma lei de potência expressa pela seguinte equação (Panofsky e Dutton, 1988):

$$\frac{u_2}{u_1} = \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^n \quad (6.25)$$

em que u_2 e u_1 são as velocidades médias horizontais do vento nas altura z_2 e z_1 , e n é um expoente relacionado com a intensidade da turbulência, rugosidade do solo e a diferença entre as alturas escolhidas como pontos de referência (Irwin, 1979).

Tais parametrizações (difusão vertical, lateral e perfil do vento) foram introduzidas na equação 5.78, juntamente com os dados experimentais de Copenhagen (seção 6.1) para se calcular a concentração de poluentes ao nível do solo.

6.2.1.4 Indicadores Estatísticos

Para avaliar a efetividade das parametrizações utilizadas ante a solução tridimensional, foram aplicados alguns indicadores estatísticos sugeridos por Hanna (1989). Tais indicadores são utilizados pela comunidade científica em estudos da dispersão de poluentes atmosféricos e, recomendados pela Agência de Proteção Ambiental (*USEPA*), pela Força Aérea Americana (*US Air Force*) e pelo Instituto Americano de Petróleo (*API*), para comparar e validar modelos de dispersão. Foram aplicados os seguintes indicadores:

- O Erro Quadrático Médio Normalizado (*Nmse*) informa sobre os desvios entre as concentrações preditas pelo modelo e as concentrações observadas no experimento. A normalização indica que este erro independe da grandeza dos dados. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível. É definido como:

$$Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p} \quad (6.26)$$

- O Fator de dois (*Fa2*) representa a fração de dados (%) que estão entre 0.5 e 2. Resultados mais próximos ao valor um aumentam a confiabilidade do modelo:

$$0.5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2 \quad (6.27)$$

- O Coeficiente de Correlação (*Cor*) descreve o grau de associação (ou concordância) entre os comportamentos das concentrações observadas e preditas. Quanto mais próximo do valor 1 estiver o resultado, melhor a performance da solução. É definido como:

$$Cor = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p} \quad (6.28)$$

- Erro Fracional (Fb) informa a tendência do modelo de dispersão e a parametrização superestimar ($Fb < 0$) ou subestimar ($Fb > 0$) as concentrações médias observadas. Quanto mais próximo de zero, melhor é o resultado que é definido como:

$$Fb = \frac{(\bar{C}_o - \bar{C}_p)}{0.5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)} \quad (6.29)$$

- O Desvio Padrão Fracional (Fs) representa o grau de distanciamento das concentrações observadas em relação às concentrações preditas. Se $Fs > 0$ o valor previsto está menos disperso que o observado e se $Fs < 0$ o valor previsto está mais disperso que o observado. O valor ótimo é zero e é definido como:

$$Fs = \frac{(\sigma_o - \sigma_p)}{0.5(\sigma_o + \sigma_p)} \quad (6.30)$$

A notação C_o indica as concentrações observadas nos experimentos, C_p indica as concentrações preditas pelo modelo e σ o desvio padrão.

O tempo de processamento das simulações (em segundos) foi realizado em função da altura da discretização da CLC, considerando $\Delta z = 5m, 10m, 20m, 30m, 40m$ e $50m$.

CAPÍTULO 7

7 Resultados e Análises

Neste capítulo serão apresentados e comentados os resultados obtidos a partir da solução tridimensional estacionária resolvida pelo método GIADMT, de acordo com as diferentes parametrizações da turbulência. O capítulo destina-se a análises gráficas e estatísticas sobre as concentrações máximas obtidas pela solução, estudos sobre a convergência da concentrações, avaliação do tempo de processamento das simulações, análise do perfil dos coeficientes de difusão e análise da sensibilidade do modelo.

Os resultados numéricos foram obtidos a partir de simulações realizadas na linguagem de programação FORTRAN 90. O computador utilizado foi um Pentium T2390, com 2GB de memória RAM, HD de 160 GB e sistema operacional Windows 7.

As concentrações foram obtidas de acordo com a solução proposta pela equação 5.78, cuja inversão é realizada a partir do esquema de *Quadratura de Gauss*, perfil de vento descrito pelas equações 6.22, 6.23 e 6.24, coeficientes de difusão lateral de acordo com a equação 6.21 e, os diferentes coeficientes de difusão verticais (seção 6.2.1).

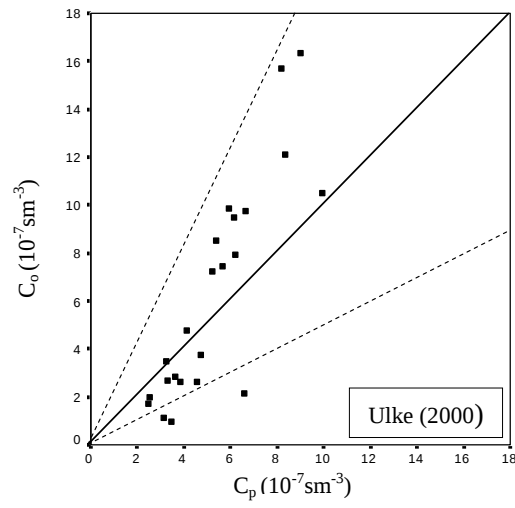
Foram considerados $N_p=8$ pontos para o esquema de Quadratura Gaussiana (Vilhena e Barichello, 1991) e variação do tamanho das subcamadas de $\Delta z=50m$. Os resultados obtidos a partir do modelo GIADMT são comparados com os dados experimentais de Copenhagen, descritos na seção 6.1.

A Tabela 3 apresenta os resultados das concentrações máximas preditas ($10^{-7}sm^{-3}$) pela solução 5.78 de acordo com os diferentes coeficientes de difusão verticais. Nesta etapa, os resultados foram obtidos com $N_A=100$ autovalores.

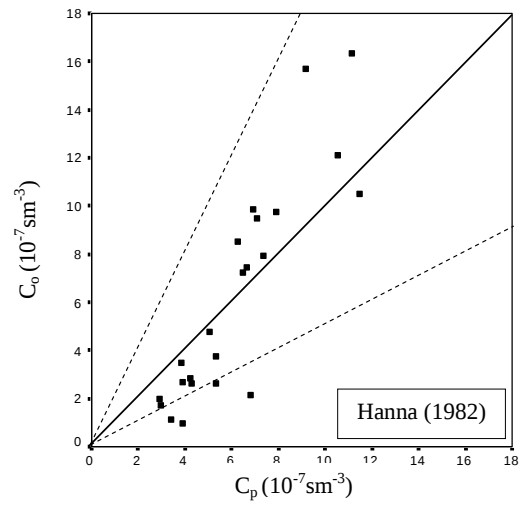
Tabela 3: Concentrações máximas preditas (C_p) (10^{-7}sm^{-3}) pela equação 5.78, de acordo com as diferentes parametrizações: (a) Ulke (2000), (b) Hanna (1982), (c) *Similaridade* (Panofsky e Dutton, 1988), (d) Degrazia *et al.* (1997), (e) Degrazia *et al.* (2000), (f) *Troen e Mahrt* (Pleim e Chang, 1992), (g) *Lamb e Durran* (Seinfeld e Pandis, 1997), (h) Degrazia *et al.* (2001) [A], (i) Degrazia *et al.* (2001) [B] e (j) Pleim (2007).

Exp.	C_o	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	(i)	(j)
1	10,50	9,94	11,49	17,46	9,27	10,54	10,93	6,58	9,05	8,47	18,21
2	2,14	6,59	6,82	10,25	5,83	6,94	5,94	3,26	4,81	4,30	10,54
3	9,85	5,90	6,89	3,74	5,49	19,19	32,17	3,55	5,57	5,11	3,79
4	2,83	3,60	4,23	1,77	3,44	10,37	18,35	2,33	3,04	3,07	1,78
5	16,33	9,02	11,16	7,08	8,99	21,52	15,31	8,07	9,28	9,05	7,24
6	7,95	6,19	7,38	4,18	6,15	12,50	9,29	4,71	5,47	5,44	4,43
7	3,76	4,73	5,35	2,86	4,50	9,46	6,44	3,11	3,63	3,63	3,11
8	15,71	8,18	9,16	5,99	8,04	20,38	14,95	7,49	8,36	8,23	6,60
9	12,11	8,32	10,54	4,47	8,23	25,42	24,48	6,45	8,52	7,48	4,98
10	7,24	5,22	6,46	2,56	5,17	18,52	15,37	4,59	5,24	5,10	2,88
11	4,75	4,12	5,07	1,91	4,10	14,13	11,82	3,50	3,73	3,89	2,15
12	7,44	5,64	6,65	2,46	5,23	17,96	26,21	4,19	4,93	4,64	2,41
13	3,47	3,22	3,86	1,11	3,06	10,81	16,74	2,54	2,70	2,78	1,16
14	1,74	2,47	2,95	0,77	2,36	7,87	12,51	1,86	1,88	2,05	0,83
15	9,48	6,13	7,10	5,11	5,70	10,67	6,88	4,45	5,94	5,59	6,94
16	2,62	3,82	4,29	2,65	3,57	5,95	3,91	2,49	3,09	3,01	3,36
17	1,15	3,11	3,38	1,98	2,85	4,91	2,98	1,86	2,26	2,22	2,49
18	9,76	6,66	7,92	5,43	6,48	11,80	7,53	5,68	6,67	6,50	6,73
19	2,64	4,58	5,30	3,38	4,44	7,18	4,95	3,50	4,11	4,03	4,23
20	0,98	3,48	3,89	2,35	3,29	5,48	3,56	2,39	2,84	2,78	3,02
21	8,52	5,36	6,27	3,54	5,00	16,92	50,65	3,01	5,12	4,68	3,63
22	2,66	3,29	3,89	1,68	3,15	9,07	28,18	2,03	2,80	2,82	1,69
23	1,98	2,50	2,90	1,09	2,38	6,55	19,44	1,51	1,84	1,95	1,11

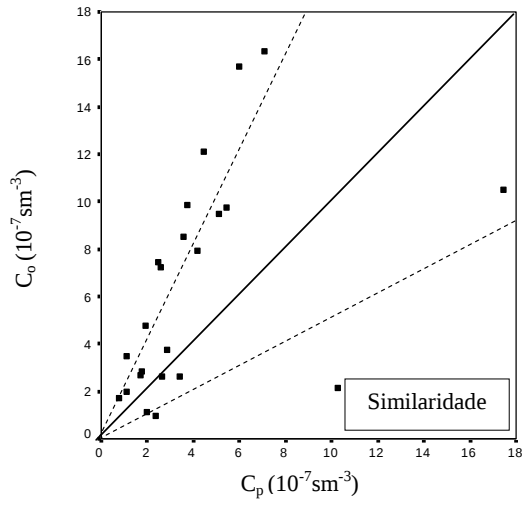
A Figura 9 mostra o comportamento das concentrações máximas preditas (C_p) pela solução 5.78 em relação às concentrações observadas (C_o) no experimento.



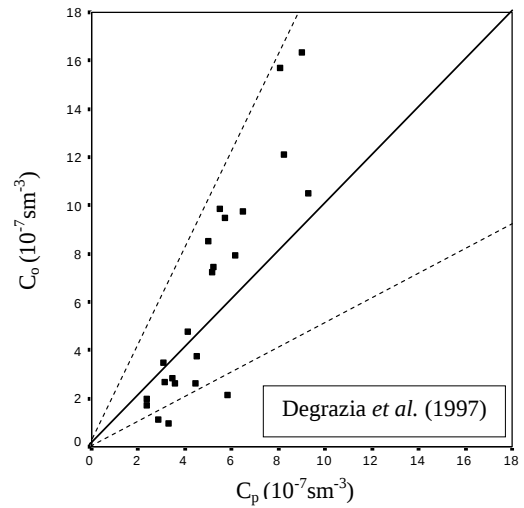
(a)



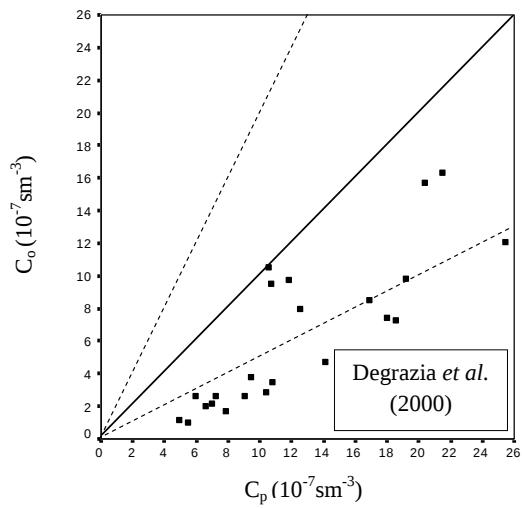
(b)



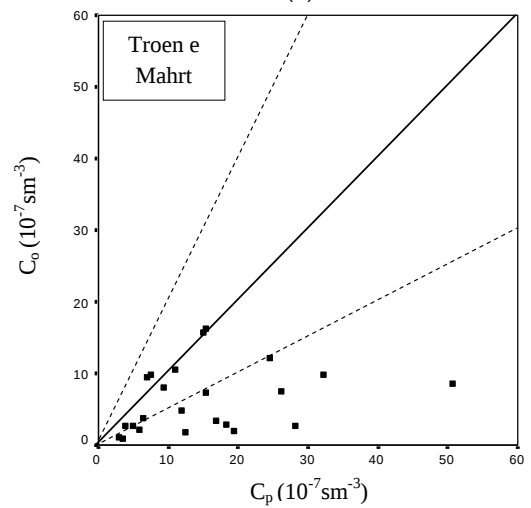
(c)



(d)



(e)



(f)

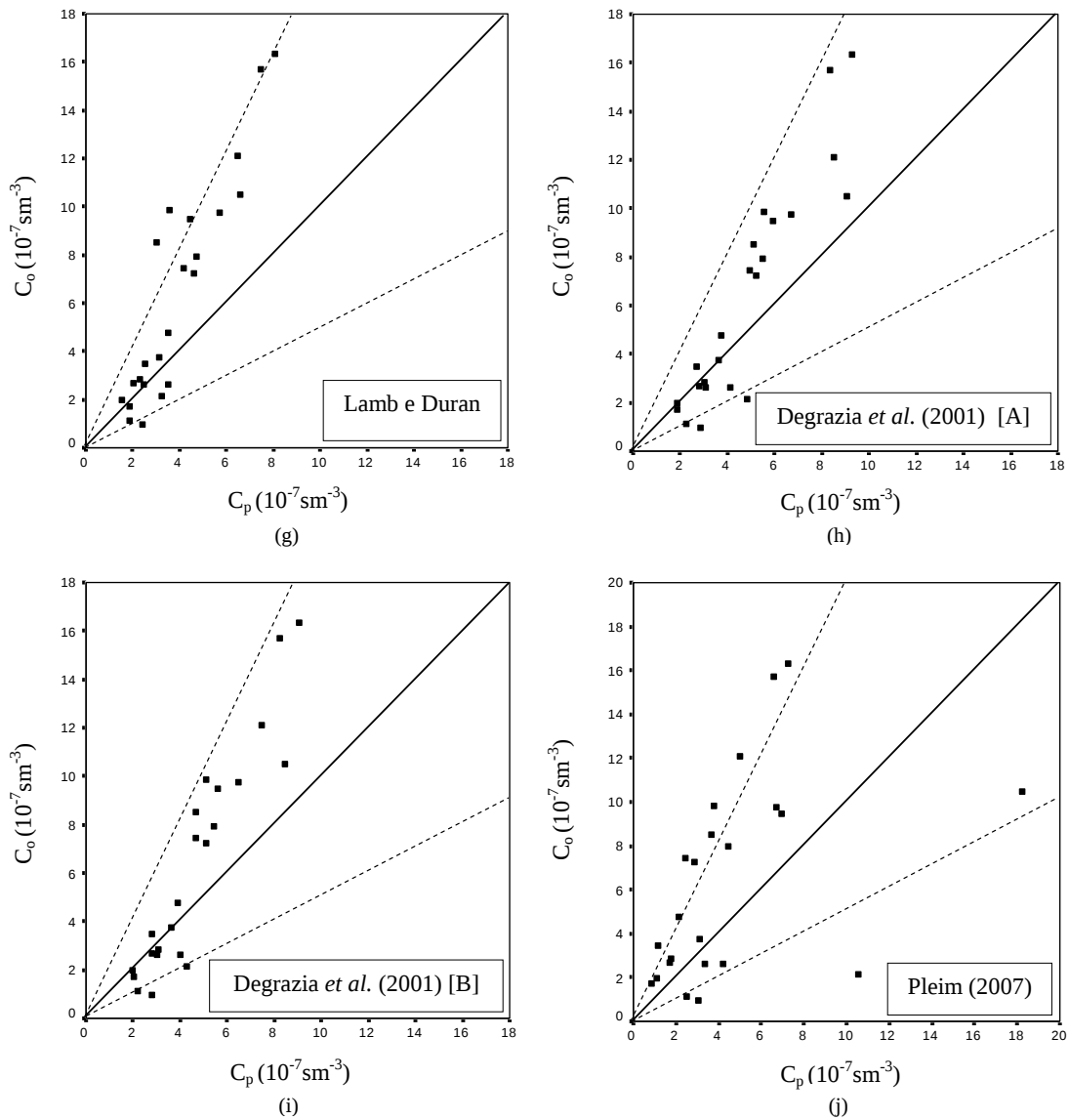


Figura 9: Gráfico de espalhamento³ dos dados de concentrações máximas observadas (C_o) no experimento em comparação com os dados de concentrações máximas preditas (C_p) pela solução 5.78, normalizadas pela taxa de emissão (Q), de acordo com as diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical.

A reta que forma um ângulo de 45° com a linha vertical e horizontal exerce a função de visualização de concordância dos resultados, sendo o comportamento ótimo representado pela linha central. Analisando as concentrações da Tabela 3 e as representações gráficas da Figura

³ A linha pontilhada corresponde a razão $\frac{C_p}{C_o} \in [0.5; 2]$.

9, nota-se boa concordância dos resultados obtidos a partir da solução 5.78 associada aos coeficientes de difusão propostos por Ulke (2000), Hanna (1982), Degrazia *et al.* (1997), Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997), Degrazia *et al.* (2001) [A] e Degrazia *et al.* (2001) [B], quando comparados aos dados de concentração do Experimento de Copenhagen (Tabela 2). Observa-se também que Degrazia *et al.* (2001) [A] e Degrazia *et al.* (2001) [B] apresentaram comportamento muito parecidos.

Resultados de concentração obtidos com as formulações de *Similaridade* (Panofsky e Dutton, 1988), Troen e Mahrt (Pleim e Chang, 1992) e Pleim (2007) não apresentaram comportamento convencional quando comparados aos dados registrados no experimento de Copenhagen. Isto porque a dispersão das concentrações obtidas a partir de tais parametrizações é maior do que as concentrações resultantes da aplicação das demais parametrizações.

Os dados de concentrações máximas apresentados na Tabela 3 foram tratados estatisticamente e os resultados são apresentados na Tabela 4, a seguir:

Tabela 4: Indicadores estatísticos de desempenho da solução tridimensional considerando as diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical (K_z).

Parametrização	$Nmse$	Cor	$Fa2$	Fb	Fs
Ulke (2000)	0,28	0,86	0,87	0,17	0,74
Hanna (1982)	0,17	0,89	0,83	0,02	0,58
<i>Similaridade</i> (Panofsky e Dutton, 1988)	0,90	0,46	0,48	0,43	0,23
Degrazia <i>et al.</i> (1997)	0,31	0,89	0,87	0,22	0,76
Degrazia <i>et al.</i> (2000)	0,59	0,83	0,35	-0,65	-0,23
Troen e Mahrt (Pleim e Chang, 1992)	2,01	0,28	0,39	-0,82	-0,85
Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997)	0,59	0,92	0,74	0,48	0,84
Degrazia <i>et al.</i> (2001) [A]	0,29	0,93	0,91	0,27	0,68
Degrazia <i>et al.</i> (2001) [B]	0,34	0,94	0,91	0,31	0,74
Pleim (2007)	0,77	0,47	0,43	0,34	0,18

Para análise dos indicadores estatísticos, os melhores resultados são indicados por valores próximos de zero nos índices $Nmse$, Fb e Fs e por valores próximos de um nos índices Cor e

Fa2. Através da Tabela 4 é possível observar que os resultados obtidos com a inserção das parametrizações propostas por Degrazia *et al.* (2001) [B], Degrazia *et al.* (2001) [A] e Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997) apresentaram forte correlação com os dados experimentais, pois o índice estatístico *Cor* resultou em valores acima de 0,90 (ou 90%). As parametrizações sugeridas por Ulke (2000), Degrazia *et al.* (1997) e Degrazia *et al.* (2000) apresentaram um valor relativamente menor, mas bem satisfatório. Com base nestes resultados pode-se afirmar que os valores de concentração gerados pelas parametrizações sugeridas por Degrazia *et al.* (2001) [B], Degrazia *et al.* (2001) [A], Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997), Hanna (1982), Ulke (2000) e Degrazia *et al.* (2000) se aproximaram mais das concentrações observadas nos experimentos de Copenhagen.

Analizando ainda o Coeficiente de Correlação (*Cor*), os piores resultados foram obtidos ao empregar as parametrizações de *Similaridade* (Panofsky e Dutton, 1988), *Troen e Mahrt* (Pleim e Chang, 1992) e Pleim (2007), pois os mesmos apresentaram resultados inferiores a 0,5 (ou 50%), indicando fraca associação entre os resultados preditos pela solução 5.78 e os dados experimentais.

O índice estatístico Fator de dois (*Fa2*) apresenta as mesmas características que o Coeficiente de Correlação para as diferentes parametrizações, porém com resultados relativamente melhores obtidos a partir da inserção das parametrizações propostas por Degrazia *et al.* (2001) [A] e Degrazia *et al.* (2001) [B]. Isto pode ser observado nas Figuras 9(h) e 9(i), onde há um número maior de pontos (0,91 ou 91%) dentro do intervalo 0,5 e 2 (retas pontilhadas nas figuras 9).

Nota-se porém que, o Erro Quadrático Médio Normalizado (*Nmse*) e o Erro Fracional (*Fb*) é significativamente menor ao aplicar a parametrização sugerida por Hanna (1982). A equação de *Similaridade* sugerida por Panofsky e Dutton (1988) apresentou alto Erro Quadrático Médio Normalizado (0,90). O Erro Fracional indica ainda, que apenas as parametrizações sugeridas por Degrazia *et al.* (2000) e *Troen e Mahrt* (Pleim e Chang, 1992) superestimaram os resultados observados no experimento, com valores iguais a -0,65 e -0,82, respectivamente. É possível observar ainda que, o valor predito pela solução 5.78, com a utilização dos coeficientes de difusão de Degrazia *et al.* (2000) e *Troen e Mahrt* (Pleim e Chang, 1992) apresentaram maior dispersão em relação aos resultados observados nos experimentos, pois $F_s < 0$.

Aliando-se os resultados dos indicadores estatísticos analisados, ou seja, maior correlação linear entre os dados previstos pela solução e os dados observados nos experimentos de Copenhagen, maior Fator de dois e erros relativamente menores, observa-se que o coeficiente de difusão proposto por Degrazia *et al.* (2001) [A] apresenta os melhores resultados.

A Tabela 5 apresenta o tempo de processamento (em segundos) da solução 5.78 em função da altura da discretização da Camada Limite Convectiva. Nesta etapa foram considerados os dados do Experimento 1 de Copenhagen. Ressalta-se que, o tempo de simulação das concentrações foram iguais para todas as parametrizações.

Tabela 5: Tempo de processamento da solução tridimensional em função da altura da discretização da CLC, considerando os dados do Experimento 1 de Copenhagen.

Δz (m)	Tempo de processamento (s)
5	1920
10	47
20	30
30	26
40	24
50	23

Observa-se nos resultados da Tabela 5 que o maior tempo registrado foi de 1920 segundos para a CLC discretizada de 5 em 5 metros, e o menor tempo de simulação para a CLC discretizada de 50 em 50 metros. Como esperado, o tempo computacional torna-se maior com o aumento da altura da discretização da CLC.

Para análise da convergência foi escolhida a parametrização proposta por Degrazia *et al.* (1997) para o coeficiente de difusão vertical representada pela equação 6.2, e o experimento 8 de Copenhagen (Tabela 1). Para tanto foram considerados $N_A=150$ autovalores e distâncias da fonte de $x=500m$, $x=3000m$ e $x=8000m$. A altura da discretização em z foi de $\Delta z=5m$, $\Delta z=30m$ e $\Delta z=50m$, com a concentração ($10^{-7}sm^{-3}$) avaliada de 5 em 5 autovalores. Os dados de concentração para análise da convergência da solução podem ser conferidos na Tabela 6 (Apêndice A). O comportamento da convergência pode ser observado na Figura 10, de acordo com as diferentes distâncias.

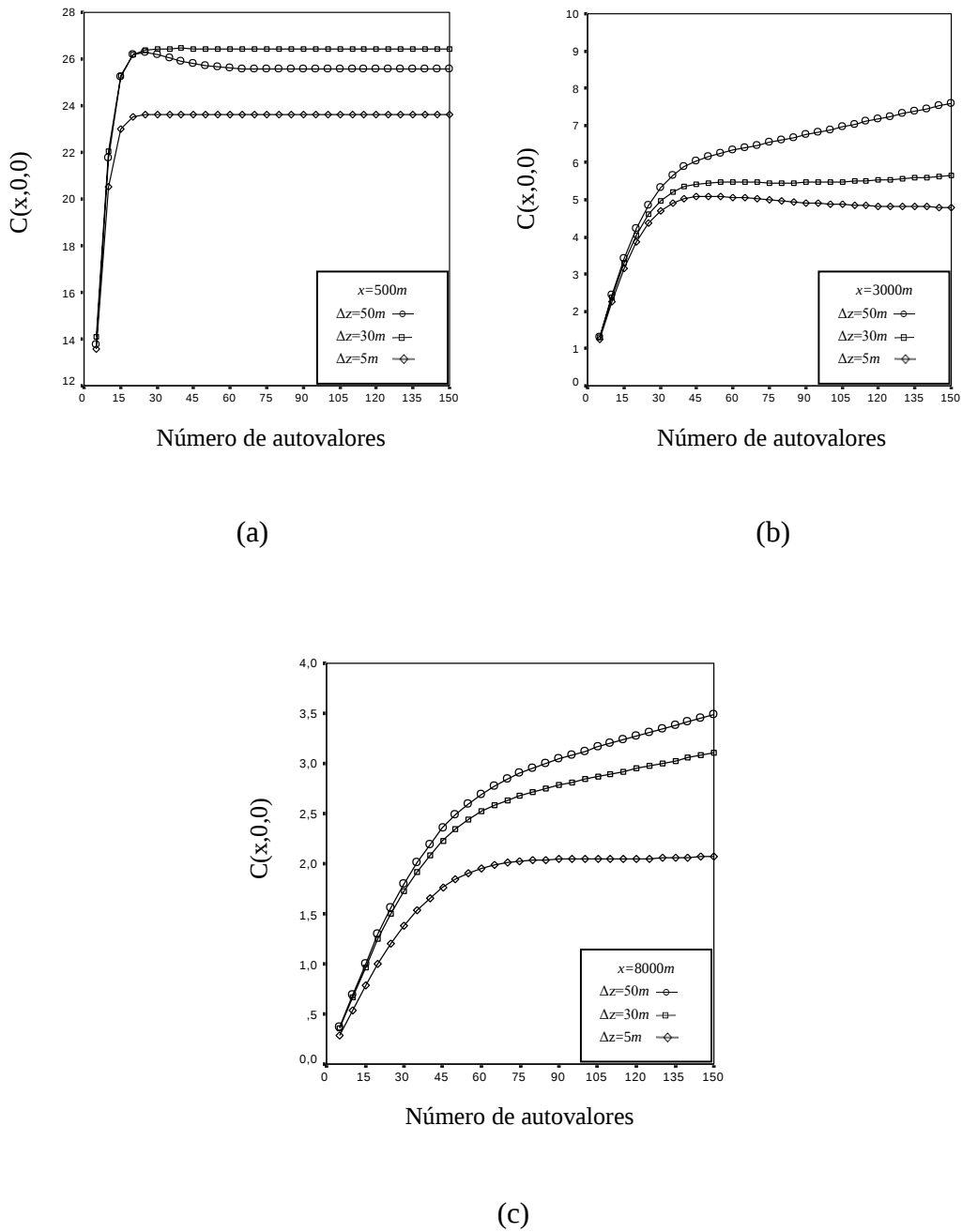


Figura 10: Convergência numérica da solução proposta pela equação 5.78, considerando o Experimento 8 de Copenhagen, discretização vertical de $\Delta z=5m$; $\Delta z=30m$; $\Delta z=50m$ e, distância da fonte de $x=500m$, $x=3000m$ e $x=8000m$ de acordo com a parametrização proposta por Degrazia *et al.* (1997), representada pela equação 6.2 para o coeficiente de difusão vertical (K_z).

A análise geral do processo de convergência da solução, atenta para uma dificuldade de se atingir a convergência para posições localizadas mais distantes da fonte. Pode-se observar na

Figura 10a, que atinge-se a convergência da solução mais rapidamente considerando a distância $x=500m$ da fonte utilizando-se 25 autovalores para $\Delta z=5m$ e $\Delta z=30m$. Para as distâncias $x=3000m$ e $x=8000m$ percebe-se a convergência com comportamento oscilatório e em alguns casos como para $\Delta z=50m$, há uma tendência crescente nos dados de concentração. De um modo geral, a variação do tamanho da altura da discretização afeta a convergência.

A Figura 11 traz uma comparação entre os perfis médios dos coeficientes de difusão turbulenta vertical a partir da equação 5.78. Para esta etapa foram utilizados os dados do Experimento 1 de Copenhagen (Tabela 1). O perfil mais adequado, ou seja, o que mais se aproxima do padrão normal/real eleva-se até uma determinada altura, atinge um valor máximo e depois começa a reduzir-se lentamente.

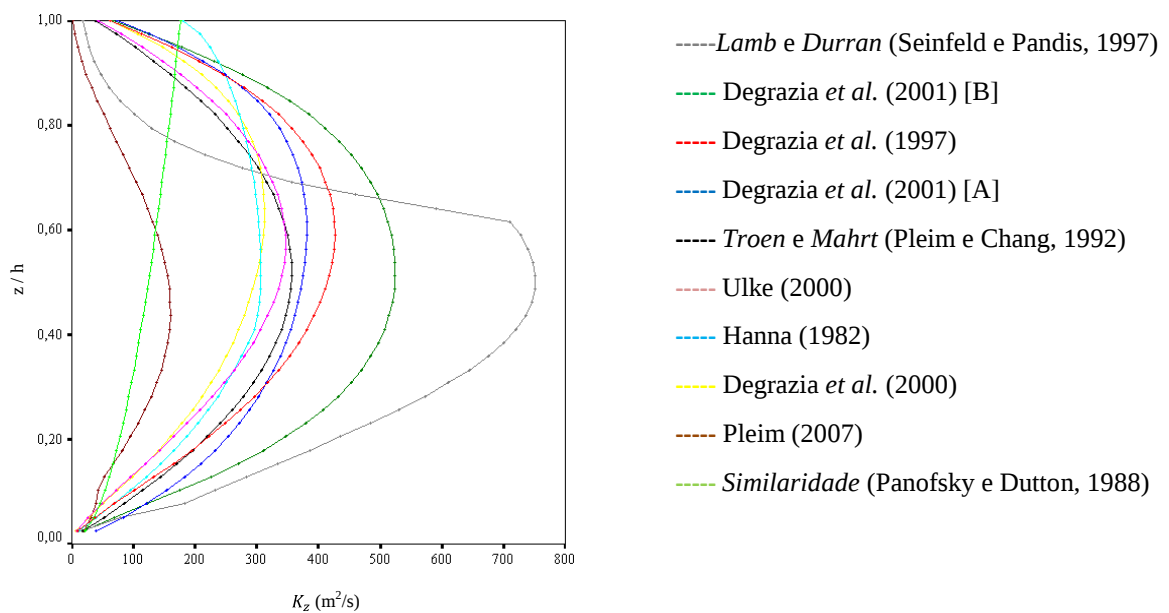


Figura 11: Perfil dos coeficientes de difusão vertical sob condições instáveis, considerando o Experimento 1 de Copenhagen.

É possível observar na Figura 11 que as parametrizações sugeridas por Ulke (2000), Troen e Mahrt (Pleim e Chang, 1992) e Degrazia et al. (2001) [A] apresentam a mesma intensidade de turbulência vertical. Da mesma forma, as parametrizações propostas por Degrazia et al. (1997) e Degrazia et al. (2001) [B] apresentaram comportamento semelhante. O

comportamento menos coerente para o coeficiente de difusão vertical foi obtido a partir da formulação de *Similaridade* (Panofsky e Dutton, 1988), não representando o padrão comum. Este tende a crescer com a altura da Camada Limite Convectiva, não diminuindo após certa altura. Nos demais casos, as expressões aplicadas na equação de cálculo da concentração, forneceram valores similares na base e no topo da CLC.

É fundamental conhecer a distância da fonte onde ocorre a concentração máxima de poluentes. Para isto, apresenta-se a seguir o gráfico das concentrações preditas pela solução 5.78 em função da distância da fonte, referente às simulações em três diferentes alturas de fonte, sendo $H_s=100m$, $H_s=250m$ e $H_s=500m$. As concentrações foram obtidas considerando a parametrização proposta por Degrazia *et al.* (1997) para o coeficiente de difusão vertical, com $N_A=30$ autovalores e os dados referentes ao Experimento 1 de Copenhagen (Tabela 1).

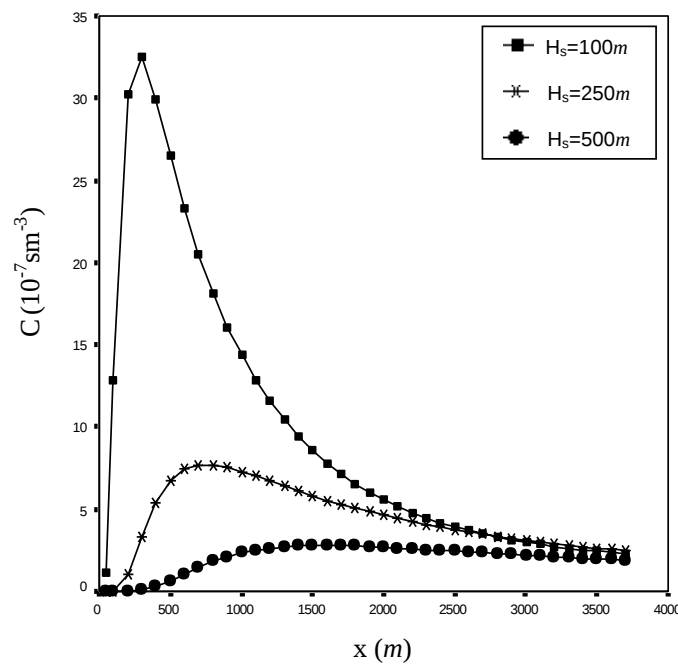


Figura 12: Concentração superficial em função da posição, considerando o Experimento 1 de Copenhagen, altura da fonte: $H_s=100m$, $H_s=250m$ e $H_s=500m$, de acordo com a parametrização proposta por Degrazia *et al.* (1997), representada pela equação 6.2.

Verifica-se na Figura 12 que para fonte mais baixa ($H_s=100m$) e área mais próxima à fonte os valores de concentração são maiores, isto é, o pico é mais acentuado. À medida que aumenta-

se a altura da fonte, observa-se um decaimento do pico de concentração em diferentes localizações (distâncias). Nota-se também que, com o crescimento da distância da fonte, as concentrações tendem a se homogeneizar. Desta forma, os resultados apresentaram comportamento físico convencional.

CAPÍTULO 8

8 Conclusões

Neste trabalho foi investigada a sensibilidade de uma solução semi-analítica da equação de difusão-advecção tridimensional estacionária obtida através do modelo GIADMT, na estimativa de concentrações para diferentes parametrizações do coeficiente de difusão vertical, considerando a atmosfera sob condições instáveis.

As simulações e comparações feitas com o modelo de dispersão GIADMT, utilizando as parametrizações para o coeficiente de difusão turbulento vertical expostas na seção 6.2.1.1, apontaram melhores resultados para o coeficientes de difusão proposto por Degrazia *et al.* (2001) [A], pois as concentrações obtidas por tal parametrização se aproximou mais das concentrações observadas no Experimento de Copenhagen, como demonstra os resultados da Tabela 3 e Figura 9(h). Tal afirmativa é comprovada pelos indicadores estatísticos na Tabela 4, onde é possível notar forte correlação (*Cor*) aliado a um maior Fator de dois (*Fat2*) e menores erros, em relação à aplicação das demais parametrizações. Desta forma, pode-se concluir que o modelo de dispersão de poluentes GIADMT, com a parametrização sugerida por Degrazia *et al.* (2001) [A] mostrou que possui mais informações físicas da CLC, gerando resultados satisfatórios para o campo de concentrações de poluentes liberados por fontes pontuais contínuas. As parametrizações sugeridas por Pleim (2007), Troen e Mahrt (Pleim e Chang, 1992) e *Similaridade* (Panofsky e Dutton, 1988) não apresentaram comportamento físico esperado.

O processo de inversão da solução realizado pelo esquema de *Quadratura de Gauss* alcançou resultados satisfatórios, mas sugere-se considerar o método de inversão algoritmo de *Talbot*, considerado mais robusto e eficiente para simulação da dispersão de poluentes na atmosfera (Abate e Valkó, 2004).

O estudo sobre a convergência da solução tridimensional mostrou que uma boa convergência, de seis dígitos significativos é atingida para distâncias mais próximas a fonte, como pode ser observado na Tabela 7 e Figura 10. Além disto, é nítida a influência da altura da discretização da CLC no processo de convergência das concentrações. O tempo de simulação das concentrações apresentou comportamento dentro do padrão esperado, ou seja, a medida que

aumenta-se o valor de Δz , o número de subcamadas diminui, reduzindo também o tempo computacional.

Assegura-se que as diferenças encontradas entre os resultados obtidos pelo modelo e os resultados de referência são originados pelas suposições do modelo matemático (erro de aproximação *stepwise*), uma vez que os erros de aproximações feitas nas resoluções numéricas são eliminados ao se resolver analiticamente a equação de difusão-advecção através do método GIADMT.

É fundamental salientar que no modelo proposto utiliza-se turbulência não-homogênea. Desta forma, conclui-se que a solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção obtida pelo modelo GIADMT, com uma correta parametrização do coeficiente de difusão vertical é uma poderosa ferramenta para o cálculo de concentrações, possibilitando um melhor entendimento do processo de dispersão de poluentes.

CAPÍTULO 9

9 Referências

- [1] Abate, J., Valkó, P. 2004. *Multi-precision Laplace transform inversion*. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 60, 979–993, 2004.
- [2] Arya, S. P. *Introduction to micrometeorology*. Academic Press, 2001.
- [3] Baetens, K., H. O, Q. T., Nuyttens, De Schamphelre, M., Endalew, A. M., Hertog, M. L. A. T. M., Nicolai, B., Ramon, H., Verboven, P. *A validated 2-D diffusion–advection model for prediction of drift from ground boom sprayers*. Atmospheric Environment, 43, 1674–1682, 2009.
- [4] Barad, M. L. *Project Prairie Grass, a field program in diffusion*. Rel. Téc. Geophysical Research Paper, 59, Vols. I e II, Bedford, MA, USA, 1958.
- [5] Berkowicz, R. R., Olesen, H. R., Torp, U. *The danish gaussian ari pollution model (OML): description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications*. In Proceedings of the 15th International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Applications V. St Louis, NY, USA, 1986.
- [6] Bianconi, R., Tamponi, M. *A mathematical model of diffusion from a steady source of short duration in a finite mixing layer*. Atmospheric Environment, 27, 781-792, 1993.
- [7] Blackadar, A. K. *Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences*. Springer-Verlag. 185, 1997.
- [8] Buligon, L. *Solução da equação de advecção-difusão unidimensional transiente para o estudo da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária*. Dissertação de Mestrado. Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, 2004.
- [9] Buske, D. *Solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILTT*

aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos. Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.

- [10] Buske, D., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Bodmann, B. *Air pollution steady-state advection-diffusion equation: The general three-dimensional solution*. Journal of Environmental Protection, 3, 1124-1134, 2012.
- [11] Carvalho, J. C., Vilhena, M. T., Moreira, D. M. *Comparison between Eulerian and Lagrangian semi-analytical models to simulate the pollutant dispersion*. Applied Mathematical Modelling, 31, 120-129, 2007.
- [12] Chrysikopoulos, C. V., Hildemann, L. M., Roberts, P. V. *A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source*. Atmospheric Environment, 26A, 747-747, 1992.
- [13] Costa, C. P. *Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária*. Dissertação de mestrado. Universidade federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.
- [14] Costa, C. P. *Simulação da dispersão de poluentes através da solução da equação de difusão-advecção tridimensional transiente pela técnica GIADMT*. Tese de doutorado, Universidade Federal do rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Porto Alegre, dezembro de 2007.
- [15] Costa, C. P., Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T. *A three-dimensional analytical solution for radioactive contaminant dispersion in the atmosphere*. International Nuclear Atlantic Conference. Santos, SP, 2007.
- [16] Costa, C. P., Vilhena, M. T., Moreira, D.M., Tirabassi, T. *Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer*. Atmospheric Environment, 40, 5659-5669, 2006.

- [17] Cotta, R. *Integral transforms in computational heat and fluid flow*. CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [18] Daly, A., Zannetti, P. *Air Pollution Modeling – An Overview*. In: *Ambient air pollution*. The Arab School for Science and Technology (ASST) and The EnviroComp Institute, 2007.
- [19] Degrazia, G. A., Anfossi, D., Carvalho, J.C., Mangia, C., Tirabassi, T., Campos Velho, H. F. *Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions*. *Atmospheric Environment*, 34, 3575-3583, 2000.
- [20] Degrazia, G. A., Moreira, D. M., Vilhena, M. T. *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, 2001.
- [21] Degrazia, G. A., Rizza, U., Mangia, C., Tirabassi, T. *Validation of a new turbulent parameterization for dispersion models in convective conditions*. *Boundary-Layer Meteorology* 85, 243–254, 1997.
- [22] Degrazia, G.A., Moraes, O. *A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer*. *Boundary Layer Meteorology*, 58, 91-115, 1992.
- [23] Doran, J. C., Horst, T. W. *An evaluation of gaussian plume depletion models with dual tracer field measurements*. *Atmospheric Environment*, 39, 939-951, 1985.
- [24] Druilhet, A., Frangi, J., Guedalia, D., Fontan, J. *Experimental studies of the turbulence structure parameters of the convective boundary layer*. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, 22, 594–608, 1983.
- [25] Essa, K. S. M., Etman, S. M, Embaby, M. *New analytical solution of the dispersion equation*. *Atmospheric Research*, 84, 337–344, 2007.
- [26] Gonçalves, G. A., Quadros, R. S., Buske, D. *An Analytical Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer*. *Journal of Environmental*

Protection, 4, 57-64, 2013.

- [27] Goulart, A. G., Moreira, D. M., Carvalho, J. C., Tirabassi, T. *Derivation of eddy diffusivities from an unsteady turbulence spectrum*. Atmospheric Environment, 38 (36), 6121-6124, 2004.
- [28] Gryanik, V. M., Hartmann, J. *A Turbulence Closure for the Convective Boundary Layer Based on a Two-Scale Mass-Flux Approach*. American Meteorology Society, 42, 2729-22749, 2002.
- [29] Gryning, S. E., Lyck, E. *Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations*. American Meteorological Society, 23, 651–660, 1984.
- [30] Gryning, S. E., Lyck, E. *The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements*. Riso National Laboratory, 2002.
- [31] Gryning, S. E., Holtslag, A. A. M., Irwin, J.S., Siversteen, B. *Applied dispersion modelling based on meteorologing scaling parameters*. Atmospheric Environment, 21, 79-89. 1987.
- [32] Guerrero, J. S. P., Pimentel, L. C. G., Oliveira-Júnior, J. F., Heilbron Filho, P. F. L., Ulke, A. G. *A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation*. Atmospheric Environment, 55, 201-212, 2012.
- [33] Guerrero, J. S. P., Pimentel, L. C. G., Skaggs, T. H. *Analytical solution for the advection–dispersion transport equation in layered media*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013.
- [34] Hanna, S. R. *Applications in Air Pollution Modeling*. Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling. Eds., D. Reidel Publishing, 275-310, 1982.
- [35] Hanna, S. R. *Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and*

jackknife resampling methods. Atmospheric Environment, 23, 1385-1395, 1989.

- [36] Hinze, J. O. *Turbulence*. Mc Graw Hill, 1975.
- [37] Irwin, J. S. *A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability*. Atmospheric Environment, 13, 191–194, 1979.
- [38] Lin, J. S., Hildemann, L. M. *Analytical Solutions of the Atmospheric Diffusion Equation with Multiple Sources and Height Dependent Wind Speed and Eddy Diffusivities*. Atmospheric Environment, 30, 239-254, 1996.
- [39] Mangia, C., Moreira, D. M., Schipa, I., Degrazia, G. A., Tirabassi, T., Rizza, U. *Evaluation of a new eddy diffusivity parameterization from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions*. Atmospheric Environment, 36, 67–76, 2002.
- [40] Massman, W. J. *An Analytical One-Dimensional Model of Momentum Transfer by Vegetation of Arbitrary Structure*. Boundary Layer Meteorology, 83, 407-421, 1997.
- [41] Monin, A. S., Obukov, A. M. *Basic laws of turbulent mixing in the ground layer of the atmosphere*. Trans. Geophys. Inst. Akad. Nauk, USSR, 151, 163-187, 1954.
- [42] Mooney, C. J., Wilson, J. D. *Disagreements between gradient-diffusion and Lagrangian stochastic dispersion models, even for surface near the ground*. Boundary Layer Meteorology, 64, 291–296, 1993.
- [43] Moreira, D. M. *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 em Física, UFSM, 1996.
- [44] Moreira, D. M., Tirabassi, T., Vilhena, M. T., A. G., Goulart, A. G. *A multi-layer model for pollutant dispersion with dry deposition to the ground*. Atmospheric Environment, 2010.

- [45] Moreira, D. M., Vilhena, M. T. *A Transformada de Laplace aplicada à modelagem matemática da dispersão de poluentes atmosféricos: O modelo ADMM*. Universidade Luterana do Brasil, 2005.
- [46] Moreira, D. M., Tirabassi, T., Carvalho, J. C. *Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers*. *Atmospheric Environment* 39 (20), 3643–3650, 2005c.
- [47] Moreira, D. M., Moraes, A. C., Goulart, A. G., Albuquerque, T. T. A. *A contribution to solve the atmospheric diffusion equation with eddy diffusivity depending on source distance*. *Atmospheric Environment*, 83, 254-259, 2014.
- [48] Nieuwstadt, F. T. M., Haan, B. J. *An analytical solution of one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation*. *Atmospheric Environment*, 15, 845-851. 1981.
- [49] Nieuwstadt, F. T. M. *The turbulent structure of the stable nocturnal boundary Layer*. *J. Atmos. Society*, 41, 2202–2216, 1984.
- [50] Paulsen, C. A. *The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer*. *Journal of Applied Meteorology*, 9, 857–861, 1975.
- [51] Panofsky, H. A., Dutton, J. A. *Atmospheric Turbulence*. Wiley-Interscience, J. Wiley and Sons, 397 edition, 1984.
- [52] Panofsky, H. A., Dutton, J. A. *Atmospheric Turbulence*. John Wiley & Sons, New York. 1988.
- [53] Pleim, J. E. *A Combined Local and Nonlocal Closure Model for the Atmospheric Boundary Layer. Part I: Model Description and Testing*. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 46, 2007.
- [54] Pleim, J. E., Chang, J. S. *A non-local closure model for vertical mixing in the convective*

- boundary layer*. Atmospheric Environment, Oxford, 26, n.6, 965-981, 1992.
- [55] Rizza, U., Carvalho, J. C., Moreira, D. M., Moraes, M. R., Goulart, A. G. *A global analysis of the atmospheric pollutant modeling*. Revista Brasileira de Meteorologia, 22, n.1, 1-9, 2007.
- [56] Seinfeld, J. H., Pandis, S. N. *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. Hoboken, N. J. Wiley, 1997.
- [57] Sharan, M., Gupta, S. *Two-Dimensional Analytical Model for Estimating Crosswind Integrated Concentration in a Capping Inversion: Eddy Diffusivity as a Function of Downwind Distance from the Source*. Atmospheric Environment, 36, 97-105, 2002.
- [58] Sharan, M., Kumar, P. *An analytical model for crosswind integrated concentrations released from a continuous source in a finite atmospheric boundary layer*. Atmospheric Environment, 43, 2268–2277, 2009.
- [59] Siversten, B., Bohler, T. *Verication of dispersion estimates using tracer data*. Nilu technical report, Norwegian Institute for Air Research, Lillestrom, Norway, October 1985.
- [60] Sorbjan, Z. *Local similarity of spectral and cospectral characteristics in the stable-continuous boundary layer*. Boundary-Layer Meteorology 35, 257-275, 1986.
- [61] Storch, R. B., Pimentel, L. C. G. *Desenvolvimento de um Modelo Euleriano de Dispersão Atmosférica via GITT e Modelos Algébricos para os Fluxos*. In III Workshop de Micrometeorologia. Santa Maria, RS, Brasil, 2003.
- [62] Stroud, A. H., Secrest, D. *Gaussian quadrature formulas*. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, NJ, 1966.
- [63] Stull, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/ Boston/ London, 1988.

- [64] Tangermann, G. *Numerical simulations of air pollutant dispersion in a stratified planetary boundary layer*. Atmospheric Environment, 12, 1365–1369, 1978.
- [65] Tennekes, H. *First course in turbulence*. Cambridge: Massachusetts Institute Technology Press, Massachusetts, USA, 1972.
- [66] Tirabassi, T., Tagliazucca, M., Zannetti, P. *A Non-Gaussian Plume Dispersion Model: Description and Evaluation Against Tracer Measurements*. JAPCA, 36, 592-596, 1986.
- [67] Tirabassi, T., Tagliazucca, M., Galliani, G. *Easy to use air pollution model for turbulent shear flow*. Environmental Software, 2, 37-44, 1987.
- [68] Tirabassi, T., Tiesi, A., Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M. *Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection–diffusion equation*. Atmospheric Environment, 43, 2221–2227, 2009.
- [69] Tiwary, A., Colls, J. *Air Pollution. Measurement, modelling and mitigation*. Routledge, third edition, 2010.
- [70] Ulke, A. G. *New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer*. Atmospheric Environment 34, 1029 -1042, 2000.
- [71] Ulke, A. G., Andrade, M. F. *Modeling urban air pollution in São Paulo, Brazil: sensitivity of model predicted concentrations to different turbulence parameterizations*. Atmospheric Environment, 35, 1747-1763, 2001.
- [72] Van Ulden, A. P. E. *A surface layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground*. Atmospheric Environment, 26A, 681-692. 1992.
- [73] Vilhena, M. T., Barichello, L. B. *A new analytical approach to solve the neutron transport equation*. Kerntechnik, 56, 5, 334-336, 1991.
- [74] Vilhena, M. T., C. P. Costa, C. P., Moreira, D. M., Tirabassi, T. *A semi-analytical solution for the three-dimensional advection–diffusion equation considering non-local*

turbulence closure. Atmospheric Research, 2008.

- [75] Vilhena, M. T., Rizza, U., Degrazia, G. A., Mangia, C., Moreira, D. M., Tirabassi, T. *An analytical air pollution model: Development and evaluation*. Contrib. Atmos. Phys. 71, 315-320, 1998.
- [76] Vilhena, M. T., Rizza, U., Degrazia, G. A., Mangia, C., Moreira, D. M., Tirabassi, T. *An Analytical Air Pollution Model: Development and Evaluation*. Contr. Atmos. Phys., 71, 315-320, 1998.
- [77] Wortmann, S., Vilhena, M. T., Cotta, R. M., Moreira, D. M. *On the Simulation of Pollutant Dispersion in Atmosphere by the GILTT*. 2005.
- [78] Wortmann, S., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., Buske, D. *A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL*. Atmospheric Environment, 39, 2171–2178, 2005.
- [79] Wyngaard, J. C., Brost R. A. *Top-down and Bottom-up Diffusion of a Scalar in the Convective Boundary Layer*. J. Atmos. Sci. 41, 102–112, 1984.

Apêndice A

Tabela 6: Convergência numérica da solução proposta pela equação 5.78, de acordo com a parametrização de Degrazia *et al.* (1997) para o coeficiente de difusão vertical (K_z).

N_A	$x=500m$			$x=3000m$			$x=8000m$		
	$\Delta z=5m$	$\Delta z=30m$	$\Delta z=50m$	$\Delta z=5m$	$\Delta z=30m$	$\Delta z=50m$	$\Delta z=5m$	$\Delta z=30m$	$\Delta z=50m$
5	13,5478	14,0929	13,7585	1,2390	1,2966	1,32300	0,2873	0,3556	0,3667
10	20,5415	22,0312	21,7731	2,2742	2,3828	2,44340	0,5412	0,6705	0,6920
15	22,9936	25,2874	25,2251	3,1575	3,3143	3,42500	0,7821	0,9700	1,0029
20	23,5259	26,1879	26,1681	3,8558	4,0563	4,23440	1,0050	1,2484	1,2938
25	23,5960	26,3805	26,2621	4,3664	4,6048	4,86440	1,2055	1,5013	1,5605
30	23,6007	26,4307	26,1672	4,7101	4,9804	5,33000	1,3819	1,7262	1,8003
35	23,6014	26,4504	26,0433	4,9211	5,2176	5,66030	1,5330	1,9219	2,0120
40	23,6026	26,4551	25,9215	5,0362	5,3548	5,88910	1,6591	2,0891	2,1959
45	23,6035	26,4507	25,8129	5,0879	5,4262	6,04820	1,7615	2,2295	2,3534
50	23,6040	26,4424	25,7247	5,1010	5,4582	6,16350	1,8424	2,3459	2,4869
55	23,6042	26,4342	25,6593	5,0925	5,4689	6,25330	1,9046	2,4413	2,5994
60	23,6042	26,4277	25,6152	5,0729	5,4695	6,32990	1,9510	2,5194	2,6939
65	23,6042	26,4232	25,5881	5,0481	5,4662	6,40020	1,9845	2,5833	2,7737
70	23,6042	26,4205	25,5733	5,0215	5,4625	6,46810	2,0079	2,6362	2,8418
75	23,6042	26,4190	25,5663	4,9948	5,4598	6,53560	2,0236	2,6808	2,9008
80	23,6042	26,4181	25,5639	4,9789	5,4588	6,60340	2,0337	2,7193	2,9530
85	23,6042	26,4177	25,5640	4,9445	5,4601	6,67210	2,0398	2,7535	3,0002
90	23,6042	26,4175	25,5652	4,9219	5,4636	6,74150	2,0434	2,7846	3,0438
95	23,6042	26,4174	25,5667	4,9013	5,4694	6,81180	2,0453	2,8138	3,0848
100	23,6042	26,4174	25,5681	4,8829	5,4777	6,88290	2,0464	2,8417	3,1242
105	23,6042	26,4174	25,5694	4,8667	5,4882	6,95450	2,0472	2,8689	3,1623
110	23,6042	26,4174	25,5704	4,8527	5,5009	7,02650	2,0481	2,8956	3,1996
115	23,6042	26,4174	25,5711	4,8409	5,5156	7,09870	2,0492	2,9221	3,2364
120	23,6042	26,4174	25,5717	4,8311	5,5320	7,17070	2,0509	2,9486	3,2728
125	23,6042	26,4174	25,5721	4,8230	5,5500	7,24240	2,0530	2,9750	3,3088
130	23,6042	26,4174	25,5724	4,8166	5,5691	7,31340	2,0558	3,0014	3,3446
135	23,6042	26,4174	25,5726	4,8117	5,5892	7,38340	2,0592	3,0279	3,3801
140	23,6042	26,4174	25,5727	4,8079	5,6098	7,45200	2,0632	3,0545	3,4155
145	23,6042	26,4174	25,5728	4,8051	5,6308	7,51900	2,0678	3,0811	3,4506
150	23,6042	26,4174	25,5729	4,8032	5,6517	7,58410	2,0731	3,1079	3,4854