

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PAMPA**

**UM MODELO PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE  
PLANETÁRIA COM COEFICIENTES DE DIFUSÃO DEPENDENTES DA  
DISTÂNCIA DA FONTE**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**AMILTON CRAVO MORAES**

**Alegrete**

**2013**



**AMILTON CRAVO MORAES**

**UM MODELO PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE  
PLANETÁRIA COM COEFICIENTES DE DIFUSÃO DEPENDENTES DA  
DISTÂNCIA DA FONTE**

Dissertação apresentada ao programa de Pós-graduação *Stricto Sensu* em Engenharia da Universidade Federal do Pampa, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Engenharia.

Orientador: Davidson Martins Moreira

Co-orientador: Antônio Gledson Oliveira  
Goulart

**Alegrete**

**2013**

Ficha catalográfica elaborada automaticamente com os dados fornecidos  
Pelo (a) autor (a) através do Módulo de Biblioteca do  
Sistema GURI (Gestão Unificada de Recursos Institucionais) .

M 516m Moraes, Amilton Cravo

Um modelo para dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária com coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte / Amilton Cravo Moraes. Alegre, 2013.

92 p.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal do Pampa, MESTRADO EM ENGENHARIA, 2013.

“Orientação: Davidson Martins Moreira; co-orientação: Antônio Gledson Oliveira Goulart ”

1. Equação da difusão-advecção
2. Coeficiente de difusão
3. Transformada de Laplace. I. Título.

**AMILTON CRAVO MORAES**

**UM MODELO PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE  
PLANERTÁRIA COM COEFICIENTES DE DIFUSÃO DEPENDENTES DA  
DISTÂNCIA DA FONTE**

Dissertação apresentada ao programa de Pós-graduação *Stricto sensu* em Engenharia da Universidade Federal do Pampa, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Engenharia.

Área de concentração: Fenômenos de Transportes

Dissertação defendida e aprovada em 15 de Julho de 2013.

Banca examinadora:

---

Prof. Dr. Antônio Gledson Oliveira Goulart

Co-orientador

Unipampa

---

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros

UFPel

---

Prof. Dr. Alexandro Gularte Schafer

Unipampa



Para minha esposa Magali, minha filha Juliana,  
minha mãe Alzira e meu pai Edgar (in memoriun).



## **AGRADECIMENTOS**

Ao prof. Dr. Davidson Martins Moreira pela orientação, hospitalidade e apoio para a elaboração do trabalho final de mestrado, juntamente com o prof. Dr. Antônio Gledson Oliveira Goulart pela excelente co-orientação.

Aos professores do PPGEng, minha gratidão pela forma que desempenharam o seu trabalho.

A todos os colegas do curso pelos momentos de convívio e amizade.

Ao prof. Dr. Claudio Machado, coordenador do curso de Eletromecânica pela sua compreensão e sensibilidade, pois suas ações viabilizaram cursar as disciplinas do mestrado.

Ao prof. Dr. João Roger Sastre, Diretor de Administração e Planejamento do IFSUL, pelo apoio financeiro.

A minha família pelo apoio irrestrito.

A Deus.



## RESUMO

Este trabalho apresenta a solução da equação da difusão-advecção bidimensional estacionária para simular a dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária. A solução é obtida através do método ADMM (Analytical Dispersion Multilayer Model) e da técnica de inversão numérica utilizando o algoritmo de Fixed Talbot. A validação da solução é comprovada, mediante os parâmetros estatísticos, através do confronto das concentrações calculadas a partir do modelo com as obtidas experimentalmente pelo experimento de Prairie Grass. Para a determinação das concentrações utiliza-se o perfil do vento segundo o modelo de similaridade de Monin-Obukhov e os parâmetros de turbulência com dependência da distância longitudinal da fonte e da altura vertical, considerando a componente vertical do espectro Euleriano e de acordo com o modelo sugerido por Højstrup que divide os espectros em alta e baixa frequência. Para efeito comparativo utiliza-se um coeficiente de difusão para grandes tempos de difusão. Os melhores resultados foram alcançados com a utilização dos coeficientes de difusão considerando a distância longitudinal da fonte e a altura vertical.

Palavras-chave: Coeficiente de difusão, Transformada de Laplace, Equação de difusão-advecção.



## ABSTRACT

This work presents the solution of two-dimensional advection-diffusion equation stationary to simulate the dispersion of pollutants in the Planetary Boundary Layer. The solution is obtained through the ADMM method (Analytical Multilayer Dispersion Model) and the numerical inversion technique using the algorithm Fixed Talbot. Validation of the solution is proven, statistical parameters, through the confrontation of the concentrations calculated from the model with those obtained experimentally by the Experiment of Prairie Grass. For the determination of the concentration profile of the wind the form of Monin-Obukhov similarity and turbulence parameters with longitudinal distance dependence of source and of vertical height, considering the vertical component of the Eulerian spectrum and according to the model proposed by Højstrup that divides the high and low frequency spectra. To use the comparative effect diffusion coefficient for large diffusion times according. The best results were achieved with the use of diffusion coefficients considering the longitudinal distance from the source and the vertical height.

Key words: Eddy diffusivity, Laplace Transform, advection-diffusion equation.



## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Pittsburg retratado em plena revolução industrial .....	20
Figura 3.1 - A estrutura térmica da atmosfera .....	29
Figura 3.2 - Divisão da troposfera em função do efeito do atrito causado pelo contato entre o ar e a superfície .....	30
Figura 3.3 - Evolução temporal da Camada Limite Planetária .....	32
Figura 3.4 - Diferença entre o comportamento da pluma dispersada na Camada Limite Estável e outra na Camada Residual .....	36
Figura 3.5 - Lofting de uma pluma dispersada na Camada Residual .....	36
Figura 3.6 - O esquema da CLP dividida em um sistema multicamadas .....	39
Figura 6.1 - Comparação entre os coeficientes de difusão obtidos a partir da equação (3.31) e da equação (4.31), para as distâncias de 100, 400 e 1600 m .....	40
Figura 6.2 - Gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente para o experimento de Prairie Grass dos dados observados de concentração ( $C_0$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $C_P$ ) utilizando o coeficiente de difusão representado pela equação (4.31).....	71
Figura 6.3 - Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional $C^y(\frac{\overline{c^y U z_i}}{Q})$ em função da posição adimensional $X(\frac{x w_*}{U z_i})$ utilizando o modelo representado pela equação (4.26) com a equação (4.31) .....	72
Figura 6.4 - Gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente para o experimento de Prairie Grass dos dados observados de concentração ( $C_0$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $C_P$ ) utilizando o coeficiente de difusão representado pela equação (4.52).....	74
Figura 6.5 - Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional $C^y(\frac{\overline{c^y U z_i}}{Q})$ em função da posição adimensional $X(\frac{x w_*}{U z_i})$ utilizando o modelo representado pela equação (4.26) com a equação (4.52) .....	75
Figura 6.6 - Gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente para o experimento de Prairie Grass dos dados observados de concentração ( $C_0$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $C_P$ ) utilizando o coeficiente de difusão representado pela equação (3.31).....	77



Figura 6.7 - Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional  $C^y(\frac{\bar{c}^y U_{z_i}}{Q})$  em função da posição adimensional  $X(\frac{xw_*}{U_{z_i}})$  utilizando o modelo representado pela equação (4.26) com a equação (3.31) ..... 78



## LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 - Dados meteorológicos do experimento de Prairie Grass .....	69
Tabela 6.1 - Concentrações observadas integradas lateralmente a 1.5 m para o experimento de Prairie Grass, $\overline{c_n^y}$ ( $gm^{-2}$ ). Na primeira linha a concentração observada em Prairie Grass, e na segunda linha, a concentração predita no modelo representado pela equação (4.26) utilizando a equação (4.31) para a determinação do coeficiente de difusão, sendo $H_s = 0.5$ m.....	70
Tabela 6.2- Índices estatísticos para o experimento de Prairie Grass com a equação (4.31) .....	71
Tabela 6.3 - Concentrações observadas integradas lateralmente a 1.5 m para o experimento de Prairie Grass, $\overline{c_n^y}$ ( $gm^{-2}$ ). Na primeira linha a concentração observada em Prairie Grass, e na segunda linha, a concentração predita no modelo representado pela equação (4.26) utilizando a equação (4.52) para a determinação do coeficiente de difusão, sendo $H_s = 0.5$ m.....	73
Tabela 6.4 - Índices estatísticos para o experimento de Prairie Grass com a equação (4.52) .....	74
Tabela 6.5 - Concentrações observadas integradas lateralmente a 1.5 m para o experimento de Prairie Grass, $\overline{c_n^y}$ ( $gm^{-2}$ ). Na primeira linha a concentração observada em Prairie Grass, e na segunda linha, a concentração predita no modelo representado pela equação (4.26) utilizando a equação (3.31) para a determinação do coeficiente de difusão, com $H_s=0.5$ m.....	76
Tabela 6.6 - Índices estatísticos para o experimento de Prairie Grass com a equação (3.31) .....	77



## LISTA DE ABREVIATURAS

ADMM	Analytical Dispersion Multilayer Model
AL	Atmosfera Livre
API	American of Petroleum Institute
CITT	Classical of Integral Transform Technique
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
COR	Coefficiente de Correlação
CR	Camada Residual
CS	Camada Superficial
EAF	Eulerian Autocorrelation Function
EDO	Equações Diferenciais Ordinárias
FA2	Fator de Dois
FB	Fator de Inclinação
FS	Desvio Fracional
FT	Fixed Talbot
GIADMT	Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique
GITT	Generalized Integral Transform Technique
INEL	Idaho National Engineering Laboratory
NMSE	Erro Quadrático Médio Normalizado
PDF	Função Densidade de Probabilidade
USEPA	United States Environmental Protection Agency
ZE	Zona de Entranhamento



## LISTA DE SÍMBOLOS

$K_x, K_y, K_z$	Coeficiente de difusão nas direções $x$ , $y$ e $z$ respectivamente.....	$[m^2.s^{-1}]$
$U, V, W$	Velocidade média do vento nas direções $x$ , $y$ e $z$ , respectivamente.....	$[m.s^{-1}]$
$Z$	Altura acima da superfície .....	$[m]$
$z_i$	Altura da Camada Limite Convectiva .....	$[m]$
$z_t$	Altura da Camada Superficial .....	$[m]$
$V_g$	Velocidade de deposição .....	$[m.s^{-1}]$
$G$	Constante utilizada no polinômio de Jacobi .....	$[-]$
$u_*$	Velocidade de fricção .....	$[m.s^{-1}]$
$\theta$	Temperatura potencial média .....	$[k]$
$K$	Constante de Von Kármán .....	$[-]$
$G$	Aceleração da gravidade .....	$[m.s^{-2}]$
$(\overline{w\theta})_0$	Fluxo de calor turbulento na superfície .....	$[k.m.s^{-1}]$
$L$	Comprimento de Monin-Obukhov .....	$[m]$
$w_*$	Escala de velocidade convectiva .....	$[m.s^{-1}]$
$C$	Concentração média no modelo Gaussiano.....	$[g.m^{-3}]$
$V$	Velocidade média do vento na direção $y$ .....	$[m.s^{-1}]$
$W$	Velocidade média do vento na direção $z$ .....	$[m.s^{-1}]$
$\sigma_y, \sigma_z$	Coeficiente de dispersão lateral e vertical, respectivamente .....	$[m]$
$Q$	Vazão mássica de emissão .....	$[g.s^{-1}]$
$H_s$	Altura efetiva da chaminé .....	$[m]$
$T$	Tempo .....	$[s]$
$\tau$	Tempo de correlação .....	$[s]$
$T$	Escala de tempo integral .....	$[s]$
$M$	Quantidade adimensional .....	$[-]$
$\bar{c}$	Concentração média de poluentes.....	$[g.m^{-3}]$
$\overline{c^y}$	Concentração média integrada na direção lateral .....	$[g.m^{-3}]$
$K_n$	Coeficiente de difusão na região $n$ .....	$[m^2.s^{-1}]$
$\overline{c_n^y}$	Concentração média integrada na direção lateral na região $n$ .....	$[g.m^{-3}]$
$\delta$	Função generalizada Delta de Dirac .....	$[-]$
$N$	Número de camadas .....	$[-]$



$Um$	Velocidade média do vento na direção $n$ .....[m.s <sup>-1</sup> ]
$x^*$	Termo difusivo dependente da distância da fonte .....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$L_P$	Transformada de Laplace .....[-]
$A_n, B_n$	Constantes de integração .....[-]
$M$	Matriz de coeficientes .....[-]
$M^*$	Número de termos no somatório no algoritmo de FT .....[-]
$\sigma_w^2$	Variância da componente vertical da velocidade .....[m]
$R_{i,j}$	Função correlação .....[-]
$\Phi_{i,j}$	Tensor espectro .....[-]
$K$	Raio .....[m]
$\beta_i$	Razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana ( $i=u, v, w$ ).....[-]
$E_\alpha$	Espectro de energia Euleriano( $\alpha=u, v, w$ ).....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$c_w$	Constante de turbulência isotrópica .....[-]
$\Psi$	Função taxa de dissipação molecular adimensional .....[-]
$\varepsilon$	Coefficiente de dissipação de energia cinética turbulenta .....[m <sup>2</sup> .s <sup>-3</sup> ]
$f_m^*$	Frequência adim. do pico espectral independente da estratificação.....[-]
$B_w$	Pico espectral do comprimento de onda vertical .....[-]
$X$	Distância adimensional da fonte .....[-]
$N$	Frequência adimensional .....[-]
$F$	Frequência natural .....[s <sup>-1</sup> ]
$S_w(f)$	Densidade espectral Lagrangeana.....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$S(n)$	Espectro de energia Lagrangeano .....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$S_L(n)$	Componente relativa à baixa frequência .....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$S_H(n)$	Componente relativa à alta frequência .....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$S_{wb}(f)$	Densidade espectral Lagrangeana relativa ao empuxo.....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$S_{ws}(f)$	Densidade espectral Lagrangeana relativa ao cisalhamento.....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$\gamma$	Constante de Corrsin .....[-]
$K_z^b$	Coefficiente de difusão vertical considerando o efeito do empuxo .....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$K_z^s$	Coefficiente de difusão vertical considerando o efeito do cisalhamento.....[m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> ]
$F_w^E$	Espectro de energia Euleriano normalizado pela velocidade $w$ .....[-]
$\sigma_w$	Desvio padrão Euleriano da velocidade $w$ .....[m]
$\lambda_m$	Comprimento de onda associado ao máximo espectro .....[m]
$z_o$	Comprimento da rugosidade aerodinâmica .....[m]



$\psi_m$	Função estabilidade adimensional .....[-]
$C_0$	Concentração observada .....[g.m <sup>-3</sup> ]
$C_P$	Concentração predita.....[g.m <sup>-3</sup> ]
$\sigma_0$	Desvio padrão das concentrações observadas .....[g.m <sup>-3</sup> ]
$\sigma_P$	Desvio padrão das concentrações preditas.....[g.m <sup>-3</sup> ]



## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>17</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>19</b>
<b>2.1</b>	<b>Um breve histórico da poluição atmosférica .....</b>	<b>19</b>
<b>2.2</b>	<b>Soluções da equação de difusão-advecção .....</b>	<b>21</b>
<b>2.3</b>	<b>Soluções obtidas usando a metodologia multicamadas .....</b>	<b>24</b>
<b>3</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA .....</b>	<b>29</b>
<b>3.1</b>	<b>Camada Limite Planetária .....</b>	<b>29</b>
<b>3.1.1</b>	<b>Estrutura da atmosfera .....</b>	<b>29</b>
<b>3.1.1.1</b>	<b>Camada Limite Convectiva (CLC) .....</b>	<b>32</b>
<b>3.1.1.1.1</b>	<b>Camada Superficial (CS) .....</b>	<b>33</b>
<b>3.1.1.1.2</b>	<b>Camada de Convecção Livre (CCL) .....</b>	<b>34</b>
<b>3.1.1.1.3</b>	<b>Camada de Mistura (CM) .....</b>	<b>34</b>
<b>3.1.1.1.4</b>	<b>Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE) .</b>	<b>35</b>
<b>3.1.1.2</b>	<b>Camada Residual (CR) .....</b>	<b>35</b>
<b>3.1.1.3</b>	<b>Camada Limite Estável (CLE) .....</b>	<b>37</b>
<b>3.1.2</b>	<b>A Estrutura da Turbulência na Camada Limite Convectiva .....</b>	<b>38</b>
<b>3.2</b>	<b>Modelo Euleriano de Poluição do Ar .....</b>	<b>38</b>
<b>3.2.1</b>	<b>Discretização da Camada Limite Planetária .....</b>	<b>39</b>
<b>3.3</b>	<b>Parametrização da turbulência e perfil do vento médio .....</b>	<b>42</b>
<b>3.3.1</b>	<b>Coeficiente de difusão dependente da distancia da fonte e altura vertical ..</b>	<b>42</b>
<b>3.3.1.1</b>	<b>O coeficiente de difusão vertical convectivo .....</b>	<b>44</b>
<b>3.3.1.2</b>	<b>O coeficiente de difusão vertical na camada superficial .....</b>	<b>45</b>
<b>3.3.1.3</b>	<b>Coeficiente de difusão para grandes tempos de difusão .....</b>	<b>47</b>
<b>3.3.2</b>	<b>O modelo da parametrização do vento médio .....</b>	<b>47</b>
<b>4</b>	<b>DERIVAÇÃO DO MODELO DE POLUIÇÃO DO AR .....</b>	<b>49</b>
<b>4.1</b>	<b>Solução da equação da difusão-advecção bidimensional estacionária .....</b>	<b>49</b>
<b>4.1.1</b>	<b>Solução homogênea .....</b>	<b>50</b>
<b>4.1.2</b>	<b>Solução particular .....</b>	<b>51</b>
<b>4.1.3</b>	<b>Solução geral .....</b>	<b>53</b>
<b>4.1.4</b>	<b>Inversão da solução .....</b>	<b>55</b>



4.2	Determinação dos coeficientes de difusão aplicados no modelo .....	57
4.2.1	Coeficiente de difusão convectivo .....	58
4.2.2	Coeficiente de difusão vertical na camada superficial .....	59
4.2.2.1	Coeficiente de difusão para a camada superficial (escala de tempo $z_i/w_*$ ).	60
4.2.2.2	Coeficiente de difusão para a camada superficial (escala de tempo $z/u_*$ )...	61
4.2.3	Coeficiente de difusão independente da distância da fonte .....	63
4.3	Escolha do modelo do vento médio .....	64
5	DADOS EXPERIMENTAIS PARA VALIDAÇÃO DO MODELO .....	65
5.1	Dados experimentais .....	66
5.1.1	Experimento de Prairie Grass .....	66
5.2	Índices estatísticos .....	67
6	RESULTADOS .....	69
7	CONCLUSÃO .....	81
	REFERÊNCIAS.....	83



## 1. INTRODUÇÃO

A ansiedade do homem em preservar o meio ambiente e a qualidade do ar vem crescendo consideravelmente nas últimas décadas, a preocupação com o fenômeno do aquecimento global, por exemplo, ocorreu por volta de 1970. Desde esta época, a industrialização emprega na realização de seus processos uma tecnologia dita “suja”, pois a maior parte das indústrias tem em seus processos a queima de combustíveis fósseis. Esta prática, em conjunto com o desmatamento, produz gás carbônico ( $\text{CO}_2$ ) e outros gases, provocando o aquecimento global. Na tentativa de minimizar estes efeitos, o protocolo de Quioto propôs um calendário no qual os países-membros (principalmente os desenvolvidos) teriam a obrigação de reduzir a emissão de gases em pelo menos 5,2%, em relação aos níveis de 1990, no período entre 2008 e 2012. Deste modo, o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera é relevante e desempenha um papel fundamental em estratégias para redução ou eliminação destes gases e seus efeitos nocivos ao meio ambiente.

Para estudar a dispersão de poluentes na atmosfera podem ser utilizados experimentos de campo e as simulações computacionais. Entretanto, devido às dificuldades operacionais e os elevados custos dos experimentos de campo, torna-se a simulação computacional o método mais utilizado para a análise da dispersão de poluentes na atmosfera. Neste contexto, para determinação da concentração de poluentes na atmosfera existem modelos matemáticos, os quais são indispensáveis para simular estes fenômenos, destacando-se os modelos Eulerianos e Lagrangeanos. Segundo Anfossi (2005), a diferença essencial entre estes modelos é o sistema de referência. No primeiro ele é fixo em relação à terra, enquanto que o sistema de referência para o modelo Lagrangeano segue a velocidade instantânea do fluido. Cabe ressaltar que a metodologia usada neste trabalho segue o procedimento Euleriano.

Tradicionalmente os movimentos atmosféricos e os fenômenos relacionados têm sido classificados de acordo com as suas dimensões horizontais em macroescala, mesoescala e microescala. Na vertical, os movimentos têm seu limite na Camada Limite Planetária (CLP), também conhecida como Camada Limite Atmosférica (CLA) (STULL, 1988). Segundo Stull (1988) a micrometeorologia é o ramo da meteorologia que se dedica ao estudo dos fenômenos e escoamentos atmosféricos de escala temporal inferior à 1 hora e espacial inferior a 1 km, sendo a área de interesse deste trabalho.

Cabe ressaltar que as principais vantagens de um modelo analítico em relação aos modelos numéricos são as reduzidas aproximações e a menor demanda de esforço computacional para a obtenção dos campos de concentração, que o tornam uma ferramenta

particularmente útil em respostas rápidas para casos de acidentes envolvendo poluentes atmosféricos, assim como para testes, calibrações e geração de condições iniciais de modelos numéricos.

Os coeficientes de difusão obtidos neste trabalho são determinados a partir da teoria de Batchelor (1949) para o caso convectivo e, segundo Højstrup (1981) válido para a camada superficial. A formulação de Degrazia et al., (1997), a qual não considera a dependência da distância da fonte, será utilizada para confronto dos resultados de concentração e para verificar o efeito de memória presente no processo de dispersão.

Será realizada uma avaliação estatística do desempenho da concentração obtida com a utilização do modelo, confrontando-se esta, com os resultados experimentais de Prairie Grass (BARAD, 1958).

Este trabalho apresentará uma solução analítica da equação de difusão-advecção, válida para um coeficiente de difusão fisicamente coerente com o processo de dispersão na atmosfera.

O objetivo deste trabalho é obter uma solução analítica da equação da difusão-advecção bidimensional estacionária utilizando a transformada de Laplace e com método de inversão segundo o algoritmo de Fixed Talbot, onde o coeficiente de difusão utilizado no modelo pode ser dependente da altura e da distância longitudinal da fonte.

A presente dissertação encontra-se estruturada em 7 capítulos. No capítulo 2 encontra-se uma revisão bibliográfica motivando a realização deste trabalho. No capítulo 3, descreve-se uma fundamentação teórica relativa à camada limite planetária, ao modelo de poluição do ar, as propriedades da turbulência e perfil do vento. No capítulo 4 estuda-se o modelo de poluição do ar derivando-se a metodologia de solução da equação da difusão-advecção para o caso bidimensional estacionário e a derivação dos coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte e da altura vertical, para o caso convectivo e, com validade para a camada superficial, como também, o coeficiente de difusão válido para grandes tempos de difusão, além do perfil do vento utilizado. No capítulo 5 apresenta-se o experimento de dispersão para a validação deste modelo, realizado em Prairie Grass, e os passos para a validação do modelo. No capítulo 6 apresentam-se os resultados obtidos com o modelo confrontando-os com os dados do experimento de Prairie Grass e, finalmente, no capítulo 7, temos as conclusões.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

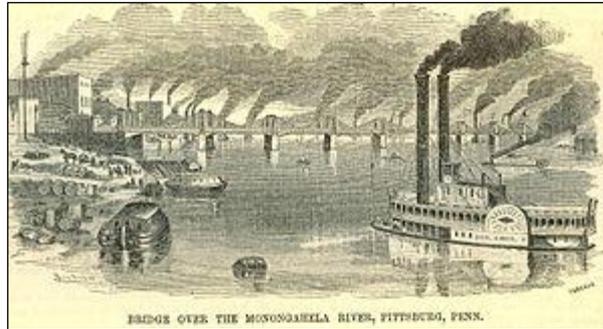
A fim de inspirar a realização deste trabalho, apresenta-se inicialmente uma breve história do problema de poluição ambiental e, em seguida, uma revisão da bibliografia sobre as soluções analíticas da equação da difusão-advecção aplicada à dispersão de poluentes na atmosfera disponibilizadas na literatura consultada, com particular ênfase a solução proposta pelo método multicamadas.

### 2.1 Um breve historia da poluição atmosférica

Na Roma Antiga a poluição era geralmente encontrada em cidades pré-industriais, onde as pessoas queimavam madeira e trabalhavam em artesanato e indústria. Já no século V a.C., Hipócrates observa o efeito dos alimentos, da ocupação e, sobretudo, do clima nas doenças, escrevendo o livro *Ar, água e lugares*, onde descreve a importância do clima, as diferentes propriedades do ar em função de diferentes ventos e da qualidade do ar e da água. Posteriormente, outra referência surge em 61 a.C., através de Sêneca, que afirma: "*mal deixei o ar pesado de Roma para trás e o mau cheiro do fumo das chaminés ... que derramam vapor pestilento e fuligem... senti uma alteração do meu humor*". Em 1257, a Rainha Leonor de Provença é forçada a deixar o Castelo de Nottingham devido à falta de ar causadas pelos intensos fumos de carvão. Mais tarde, em 1558, a Rainha Isabel I de Inglaterra e Escócia proibiu a queima de carvão durante as Sessões do Parlamento por ser alérgica aos fumos resultantes da queima do carvão. No século seguinte, em 1661, John Evelyn escreve "*Fumifugium, or the Inconveniencie of the Air and the Smoke of London Dissipated*", onde retrata o nível de poluição que afetava a capital inglesa e propunha medidas mitigadoras, como limitar o uso de carvão, realocar as indústrias, desenvolver novos combustíveis ou mesmo plantar corredores verdes ao longo da cidade.

Na Figura 2.1 tem-se a representação de Pittsburg por ocasião da época da revolução industrial.

Figura 2.1 - Pittsburgh retratada em plena revolução industrial.



Fonte: Mr. Kilbert and Tarbell, 1857

Contudo, os problemas persistiram e com a revolução industrial um novo fôlego ocorreu no campo da poluição atmosférica. De fato, a combustão de carvão aumentou mais de 100 vezes no século XIX na Grã-Bretanha, tendo sido tentado por inúmeras vezes estabelecer critérios de emissões poluentes. Já no século XVIII, nos Estados Unidos, surgem às primeiras leis municipais que visam reduzir a poluição atmosférica de fábricas, ferrovias e navios. Em 1896, o químico Sueco Svante August Arrhenius desenvolve um estudo sobre os efeitos do dióxido de carbono na atmosfera, prevendo um aumento da temperatura global na ordem dos 12°C caso se duplique a concentração de CO<sub>2</sub> no trabalho intitulado "*On the Influence of Carbonic Acid in the Air upon the Temperature of the Ground*".

Nos Estados Unidos, em 1954, a visibilidade é reduzida drasticamente pela densa camada de *smog* (*smoke*-fumaça e *fog*-nevoeiro) em Los Angeles, estando na origem de cerca de 2000 acidentes rodoviários num único dia. Um dos maiores desastres (senão o maior) de todos os tempos causados pela poluição atmosférica ocorreu em Bhopal, na Índia, em 1984, quando uma nuvem tóxica originária de uma fábrica de pesticidas atingiu a cidade, causando a morte de 20.000 pessoas e deixando feridas ou com problemas de saúde outras 120.000 pessoas.

A história dos estudos sobre turbulência tem uma significativa importância para embasamento dos trabalhos contemporâneos sobre a dispersão de poluentes na atmosfera. Garratt (1992) afirma que a teoria estatística da turbulência relacionada tanto a problemas de difusão quanto à escala de tempo e ao espectro da turbulência, deve muito a Taylor entre os anos de 1915 e 1938. Afirma também que tanto Von Karman em 1930 quanto Prandtl em 1925, que enunciaram hipóteses referentes ao comprimento de mistura para a aplicação direta na atmosfera, baseando-se na analogia com a teoria de transferência molecular para a utilização de coeficientes de difusão. Kolmogorov desenvolveu a teoria da similaridade,

contribuindo para a melhor compreensão da estrutura de pequena escala da turbulência e do processo de transferência de energia da grande para a pequena escala.

## 2.2 Soluções da equação de difusão-advecção

Uma variedade bastante expressiva de soluções numéricas da equação da difusão-advecção pode ser encontrada na literatura (NIEUWSTAD e VAN ULDEN; LAMB, 1978; CARVALHO, 1996). Embora a procura de soluções analíticas ainda seja um dos principais focos de pesquisa nesta área, devido ao fato de que todos os parâmetros aparecem de forma explícita na solução de maneira que a influência dos mesmos pode ser confiavelmente investigada, ainda existem muitas pesquisas envolvendo a solução numérica desta equação. Uma das grandes vantagens da solução analítica é a obtenção do comportamento assintótico da solução, o que através de cálculos numéricos às vezes é de difícil geração.

A formulação da teoria do transporte por gradiente foi inicialmente estabelecida por Adolph Fick, um fisiologista alemão, em 1855. Desde então, esta teoria tem sido utilizada como base na descrição matemática no processo de dispersão e na formulação da equação de difusão-advecção.

Roberts (1923) resolveu para fontes ao nível do solo a equação bidimensional considerando a velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical seguindo leis da potência, ou seja, funções de potência da altura  $z$ :

$$U = U_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^m \quad e \quad K_z = K_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^n, \quad (2.1)$$

Sendo  $z_1$  o ponto onde  $U_1$  e  $K_1$  são avaliados,  $m$  e  $n$  os expoentes que variam entre 0 e 1.

Rounds (1955) obteve uma solução para a equação bidimensional válida para fontes elevadas, considerando a variação exponencial para a velocidade do vento e um perfil linear para o coeficiente de difusão.

A equação bidimensional de transporte e difusão, sendo que  $U$  e  $K_z$  são funções exponenciais da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt (1- expoente de  $K_z$ ) foram resolvidas por Smith (1957). Em 1957, Smith também apresentou uma solução para a equação bidimensional para o caso em que a velocidade do vento é constante e o coeficiente de difusão  $K_z$  dado pela expressão:

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

Onde  $K_0$  é uma constante,  $\alpha$  e  $\beta$  são constantes variando entre 0 e 1 de acordo com a altura da camada limite planetária  $z_i$ .

Em Scriven e Fisher (1975) é apresentada a solução da equação bidimensional com a velocidade do vento constante e coeficiente de difusão dado por:

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

na qual  $z_t$  é uma altura pré-determinada, geralmente a altura da camada superficial. Esta solução permite um fluxo líquido de material para o solo, dado por:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = V_g C, \quad (2.4)$$

em que  $V_g$  é a velocidade de deposição. Esta solução tem sido amplamente aplicada no Reino Unido para o transporte de poluentes em grande escala.

Foi publicada uma solução bidimensional para fontes elevadas com  $U$  e  $K_z$ , segundo perfis de potência, considerando a atmosfera sem contorno superior ( $K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$  em  $z \rightarrow \infty$ ). Estas soluções foram obtidas em termos das funções de Green (YEN e HUANG; BERLYAND, 1975).

Demuth (1978) apresentou uma solução baseada nas funções de Bessel, para uma camada limitada na vertical ( $K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$  em  $z \rightarrow z_i$ ).

Com a utilização da teoria da similaridade desenvolvida por Monin-Obukhov (1954) para a difusão, Van Ulden (1978), derivou uma solução para a difusão vertical a partir de fontes de emissão contínuas próximas ao solo, partindo do pressuposto de que a velocidade do vento  $U$  e o coeficiente de difusão vertical  $K_z$  seguem os perfis da similaridade. Os resultados alcançados são próximos aos atingidos por Roberts (1923), mas ele obteve um modelo para fontes não superficiais, entretanto, aplicável para fontes dentro da camada superficial. Um modelo que utiliza esta solução é o modelo de dispersão SPM - Skewed Puff Model- (TIRABASSI e RIZZA, 1995).

Nieuwstadt (1980) apresentou a solução para uma equação unidimensional transiente, utilizando polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado pela equação a seguir. Esta

solução foi um caso particular da solução obtida por Smith (1957). Posteriormente, Nieuwstadt e de Haan (1981), estenderam a solução encontrada para a situação de crescimento da altura da camada limite utilizando os polinômios de Jacobi.

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

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

Quase no final dos anos 80, Koch (1989), apresentou uma solução analítica para a equação bidimensional considerando uma fonte no nível do solo, onde o vento médio e os coeficientes de difusão seguem um perfil de potência, sendo que nesta solução estão inclusos os efeitos da absorção de contaminantes pelo solo. A deposição de contaminantes foi descrita em termos de funções hipergeométricas. Chysikopoulos et al. (1992), encontraram uma solução para a equação tridimensional considerando uma fonte aérea contínua ao nível do solo, sendo que a velocidade do vento  $U$  e o coeficiente difusivo  $K_z$  são determinados de acordo com a equação (2.1), incluindo um termo de deposição seca. Na solução desta equação foram incorporadas as funções de Bessel e funções hipergeométricas.

No ano de 1996 foram desenvolvidos por Sharan et al. (1996a; 1996b) modelos matemáticos para a situação relativa à dispersão de poluentes tridimensional na atmosfera. Nesta modelagem foram utilizados coeficientes de difusão constantes e parametrizações em termos das funções de Bessel e combinações lineares da função de Green. Lin e Hildeman (1997) estenderam as soluções apresentadas por Demuth (1978) para o caso de deposição seca na superfície do solo. Estas soluções foram apresentadas em termos das funções de Bessel modificadas.

No final dos anos 90, Brown et al. (1997) derivaram, a partir da solução encontrada por Yeh e Huang (1975), equações para liberações de fontes pontuais para os primeiros quatro momentos da distribuição de concentração vertical e para a magnitude e localização da concentração máxima no solo.

Sharan e Yadav (1998) usaram um modelo de difusão incluindo a difusão longitudinal e coeficientes de difusão variáveis para descrever o processo de dispersão em condições de ventos fracos. Os coeficientes de difusão adotados foram considerados como função linear da distância longitudinal da fonte. O modelo de Cirilo e Poli (1992) apresentaram resultados muito similares comparativamente com os alcançados por Sharan e Yadav (1998) para o experimento de INEL (*Idaho National Engineering Laboratory*). Sagendorf e Dickson (1974)

utilizaram um modelo Gaussiano e estratificaram cada período computacional em intervalos de tempo de 2 minutos, somando os resultados obtidos para determinar a concentração total. Mais recentemente, Sharan e Modani (2007) aperfeiçoaram o modelo de Sharan et al. (1996) utilizando uma condição de contorno finita no limite superior.

### 2.3 Soluções obtidas usando a metodologia multicamadas

Recentemente, foram obtidas soluções em séries da equação de difusão advecção, as quais resolvem problemas com coeficientes variáveis. Wortmann et al. (2000) desenvolveram uma solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável. Neste trabalho, o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) resultante da aplicação da GITT foi resolvido analiticamente com o emprego da transformada de Laplace e diagonalização. Esse procedimento recebeu o nome de GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) e foi uma novidade em relação ao uso típico da GITT (na GITT a solução do problema transformado é numérica (COTTA, 1993; COTTA e MIKHAYLOV, 1997)). A obtenção da solução do problema via GILTT pode ser resumido da seguinte forma: procede-se à transformação integral normalmente até a obtenção do sistema de equações diferenciais ordinárias, posteriormente aplica-se a transformada de Laplace neste sistema, o que resulta em um sistema algébrico, sendo que a matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após a diagonalização esta matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico.

A GITT é uma técnica integral híbrida (analítico-numérica) derivada da transformação integral clássica (CITT- *Classical of Integral Transform Technique*), que combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão é utilizada uma base de autofunções determinadas a partir da solução de um problema de Sturm-Liouville associado, com as condições de contorno do problema original. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. Este procedimento resulta em um sistema que equações diferenciais ordinárias (EDO), que, uma vez solucionado, é invertido para a obtenção do resultado da equação original. A solução do sistema EDO (também chamado de problema transformado) resultante da aplicação da GITT é feita com o auxílio de sub-rotinas numéricas (BUSKE, 2004).

Moreira et al. (2009; 2010) apresenta uma revisão onde podemos encontrar uma série de soluções para equação de advecção-difusão bidimensional estacionária e dependente do

tempo, considerando advecção vertical, difusão longitudinal, fechamentos local e não local para a turbulência (considerando fluxos na direção oposta ao seu gradiente), condições não homogêneas e também remoção do poluente por deposição e o efeito do empuxo sobre a pluma (BUSKE et al., 2006; BUSKE et al., 2007 a-b, BUSKE, 2008; BUSKE et al., 2010; BUSKE et al., 2011 a-b; MACEDO et al., 2009; MOREIRA et al., 2005c; MOREIRA et al., 2006; SCHUCH et al., 2011; TIRABASSI et al., 2008; TIRABASSI et al., 2009; TIRABASSI et al., 2011).

Ao contrário do procedimento adotado no método ADMM, nas técnicas GITT e GILTT não há necessidade de discretização do domínio (BUSKE, 2008). A GILTT possui ainda as vantagens de obter a solução da equação de difusão-advecção sem nenhuma restrição ao coeficiente de difusão e perfil de vento dependentes da altura. Comparações estatísticas dos métodos ADMM e GILTT confirmam a equivalência destes métodos (Moreira et al., 2010b).

Ribeiro et al. (2002) avaliaram o transporte de poluentes em toda a região da camada limite atmosférica utilizando a GITT. Velloso et al. (2003) utilizaram a GITT em um modelo que permite simular mecanismos de transporte na atmosfera, incluindo os processos de deposição de poluentes.

Storch e Pimentel (2003) simularam a dispersão de poluentes através da equação da difusão-advecção sendo obtidos os resultados numéricos considerando o transporte turbulento somente na direção vertical. Ainda no ano de 2003, Buske et al. (2003) apresentaram a derivação matemática de um problema bidimensional difusivo-advectivo estacionário, que modela a dispersão de poluentes na camada limite planetária utilizando a ideia apresentada por Wortmann et al. (2000).

Em (BUSKE, 2004; WORTMANN, 2005) os resultados do problema bidimensional difusivo-convectivo estacionário são apresentados e comparados com os modelos ADMM (VILHENA, 1998) e KAPPA-G (TIRABASSI, 1986). Buske et al. (2005) compararam os métodos ADMM e GILTT utilizando os experimentos de Cabauw e Minnesota na equação da difusão-advecção unidimensional transiente.

Ainda em 2005 a técnica GITT foi utilizada juntamente com o método ADMM por Costa et al. (2005), para resolver a equação da difusão-advecção tridimensional originando o método GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*).

Kumar e Sharan (2010) utilizaram uma solução em série para a equação da difusão-advecção bidimensional estacionária a qual possui algumas restrições na obtenção da solução

sobre a forma do coeficiente de difusão dependente destas duas variáveis, restringindo sua aplicabilidade, além da solução ser bastante complicada.

Moura et al. (1995) propuseram uma solução analítica para a equação da difusão-advecção unidimensional transiente, para a dispersão de contaminantes passivos em uma Camada Limite Estável (CLE). Para a obtenção dos resultados numéricos foi aplicada a transformada de Laplace com coeficientes de difusão constantes. Em seguida, Pires (1996) deduziu uma solução similar para a Camada Limite Convectiva (CLC).

Moreira (1996) atingiu um objetivo mais abrangente, propondo a solução para o caso bidimensional estacionário utilizando o mesmo artifício de trabalhos anteriores, também para a CLC. A técnica apresentada por Moreira (1996) foi denominada de ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*). A ideia básica do método ADMM é embasada na discretização da CLP em N subcamadas, em que cada subcamada a equação da difusão-advecção é resolvida pela técnica da transformada de Laplace considerando-se valores médios para os coeficientes de difusão e para o perfil do vento. Portanto, o problema com coeficiente de difusão variável foi substituído por um conjunto de problemas com coeficientes de difusão constantes (coeficientes médios), associados a condições de continuidade de concentração e de fluxo de contaminantes nas interfaces das camadas sucessivas.

No ADMM o domínio do problema é dividido em subcamadas, com velocidades e coeficientes de difusão turbulentos médios em cada subcamada (*Stepwise approximation*). Cada subcamada dá origem a uma equação da advecção difusão, assim, a equação de advecção-difusão é resolvida pela técnica da transformada de Laplace e o problema de coeficiente variável é substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes médios acoplados por condições de continuidade e fluxo de contaminantes nas interfaces. Esta solução é semi-analítica e é apresentada na forma integral. Ao inverter a concentração transformada numericamente, obtemos a concentração do poluente (COSTA et al., 2003; MOREIRA; VILHENA, 2005; MOREIRA et al., 2006a).

O método ADMM pode ser utilizado apenas na resolução de problemas bidimensionais. De forma a resolver problemas tridimensionais fazendo uso da ideia do método ADMM surgiu na literatura o método semi-analítico GIADMT. A ideia básica da técnica GIADMT consiste na transformação do problema tridimensional em um problema bidimensional pela aplicação da GITT na variável. O problema bidimensional é então resolvido pelo método ADMM (COSTA et al., 2006; VILHENA et al., 2008; COSTA et al. 2009; COSTA et al. 2010).

O método ADMM foi utilizado em 2003 por Ferreira Neto (2003) para prever o campo de concentração de poluentes na CLC e solucionar a equação da difusão-advecção bidimensional transiente. Os resultados deste trabalho são mostrados em Moreira et al. (2005a). Aprofundaram o método ADMM solucionando, respectivamente, a equação unidimensional transiente (BULINGON; COSTA, 2004) e a equação bidimensional estacionária (COSTA et al., 2005) considerando o fechamento não-Fickiano da turbulência. Foram utilizados dados dos experimentos de INEL e ITT Delhi. A mesma solução foi adotada para simular a dispersão de tritium para o experimento de Angra dos Reis (MOREIRA et al., 2005b). No ano de 2006 foi apresentada uma revisão completa sobre a utilização da técnica ADMM (MOREIRA et al., 2006).

Vilhena et al. (2008) apresentaram uma solução semi-analítica para a equação tridimensional da difusão-advecção estacionária, considerando o fechamento da turbulência não local utilizando a técnica GIADMT. Moreira et al. (2009) apresentaram uma revisão das soluções GILTT para a equação da difusão-advecção bidimensional transiente supondo modelos de contra gradientes para uma ampla classe de problemas.

Recentemente, Vilhena et al. (2012) resolveram a equação da difusão-advecção tridimensional dependente do tempo combinando as abordagens de decomposição e GILTT. Alves, et al. (2012) concluíram que deve-se incluir a dependência longitudinal da distância da fonte, para fontes baixas, na determinação do coeficiente de difusão.

Como se pode verificar, existem vários estudos para a obtenção de uma solução abrangente da equação da difusão-advecção. Espera-se com o presente trabalho, uma evolução na obtenção de soluções analíticas desta equação, principalmente devido à consideração de que o coeficiente de difusão vertical é dependente da distância longitudinal da fonte.



### 3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo descreve-se a Camada Limite Planetária, o modelo para caracterização da poluição do ar, da parametrização da turbulência e o perfil do vento médio.

#### 3.1 Camada Limite Planetária

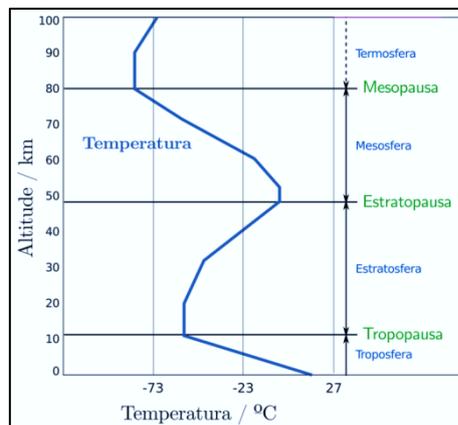
Descrevem-se a principio as camadas da atmosfera, dando maior importância para a primeira camada, denominada de troposfera, onde a CLP está inserida. Além disso, descrevem-se fundamentações sobre a dispersão de poluentes nas diferentes condições de estabilidade assim como as estratificações existentes durante a sua evolução durante o dia.

##### 3.1.1 Estrutura da atmosfera

A atmosfera da Terra é uma camada de ar, constituída de gases, vapor d'água e particulado, que envolve o planeta, o qual está em permanente movimento, devido em última instância ao aquecimento diferencial proveniente do Sol. De modo geral, cerca de 80% da massa da atmosfera encontra-se abaixo de 10 km de altitude e contém praticamente toda a água atmosférica nas suas diferentes fases.

A atmosfera não é uma camada homogênea e sua estrutura está apresentada a seguir na figura 3.1. Pode-se observar a divisão em quatro camadas distintas: a troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera – quando acontece a inversão do gradiente de temperatura e, onde se encontra a tropopausa, estratopausa e a mesopausa.

Figura 3.1 – A estrutura térmica da atmosfera

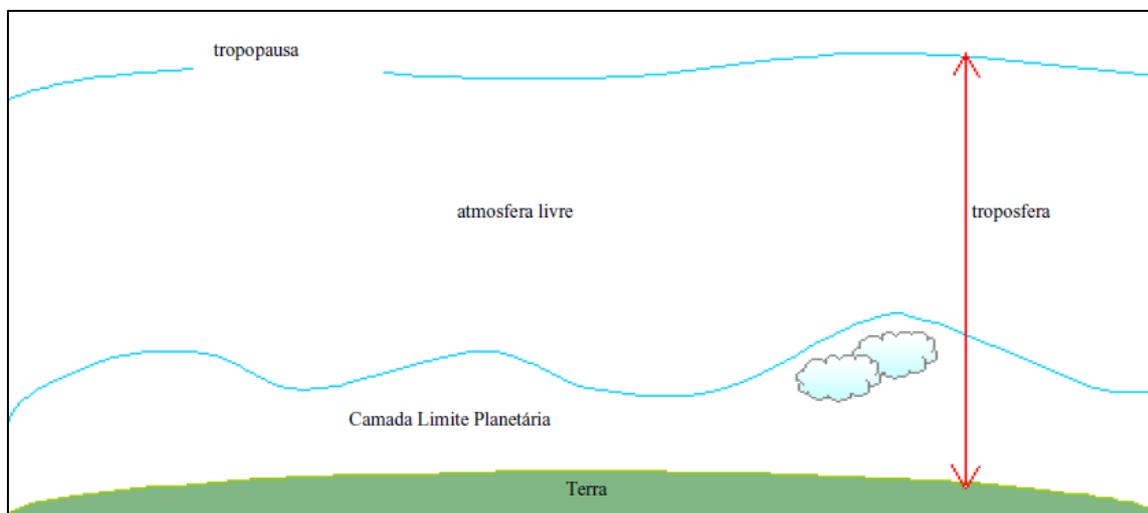


Fonte: Ahrens, C.D., 2000. Figura adaptada.

O presente trabalho irá focar a camada mais baixa da atmosfera, ou seja, a troposfera. A palavra troposfera é de origem grega e tem como significado, literalmente, globo em mudança. Uma de suas propriedades fundamentais é ser caracterizada como uma região onde ocorre uma intensa mistura vertical, resultante da presença de turbilhões de dimensões muito variadas, entre as quais se podem destacar correntes ascendentes e descendentes de ar. Uma parcela de ar pode percorrer toda a sua extensão vertical em poucos dias, ou mesmo poucos minutos, quando forçada por uma corrente ascendente associada a uma tempestade.

A troposfera é caracterizada por apresentar uma diminuição da temperatura com a altura, podendo atingir, em média, uma profundidade de 11 km. Compreendem duas camadas distintas, a Camada Limite Planetária (CLP) e a Atmosfera Livre (AL), sendo que esta representação encontra-se na figura 3.2. A primeira corresponde à região turbulenta da atmosfera devido ao fato da mesma estar ligada diretamente ao solo e por isto sofrer a influência da superfície terrestre. Os tempos de resposta da CLP aos diferentes forçantes da superfície terrestre são relativamente rápidos. Nesta primeira camada vive uma grande parte dos seres vivos, portanto é realizada a maior parte das atividades humanas, o que confere uma grande importância ao seu estudo. A espessura dessa camada sofre mudanças no tempo e no espaço, variando de aproximadamente 10 m até 2 a 3 km e depende da taxa de aquecimento e resfriamento da superfície da Terra, do cisalhamento do vento, da rugosidade da superfície, dos movimentos verticais de larga escala, da advecção horizontal de calor e umidade, entre outros fatores.

Figura 3.2 – Divisão da troposfera em função do efeito do atrito causado pelo contato entre o ar e a superfície.



Fonte: Stull, 1988. Figura adaptada.

Segundo Stull (1988) e Garrat (1992), a CLP ainda pode ser definida como uma camada na qual os efeitos da superfície são sentidos diretamente numa escala de tempo menor que uma hora onde fluxos de momentum, calor e massa são transferidos pelos movimentos turbulentos numa escala da ordem da profundidade da CLP ou menor. Uma das principais características da CLP está ligada ao comportamento da temperatura durante o ciclo diurno, provocado pelo aquecimento e resfriamento da superfície, ou seja, a estabilidade atmosférica (STULL, 1988).

A compreensão da fenomenologia que ocorre na CLP tem relevância em inúmeros domínios, tais como na parametrização dos efeitos associados à CLP nos modelos numéricos de larga escala e/ou de área limitada, na dispersão de poluentes sobre a atmosfera, na previsão de parâmetros meteorológicos à superfície, na formação de nuvens, na ligação entre a própria CLP e tempestades bem como na previsão de ventos fortes.

A maior parte da turbulência existente na CLP é gerada por forçantes superficiais, os quais estão divididos em três categorias:

- Vento médio: é o responsável pelo transporte rápido na horizontal (transporte advectivo). A rugosidade superficial da terra influencia a velocidade do vento, ocasionando valores menores junto à superfície, devido ao mecanismo de fricção. Os ventos médios na direção vertical são menos intensos em comparação com os ventos na direção horizontal.

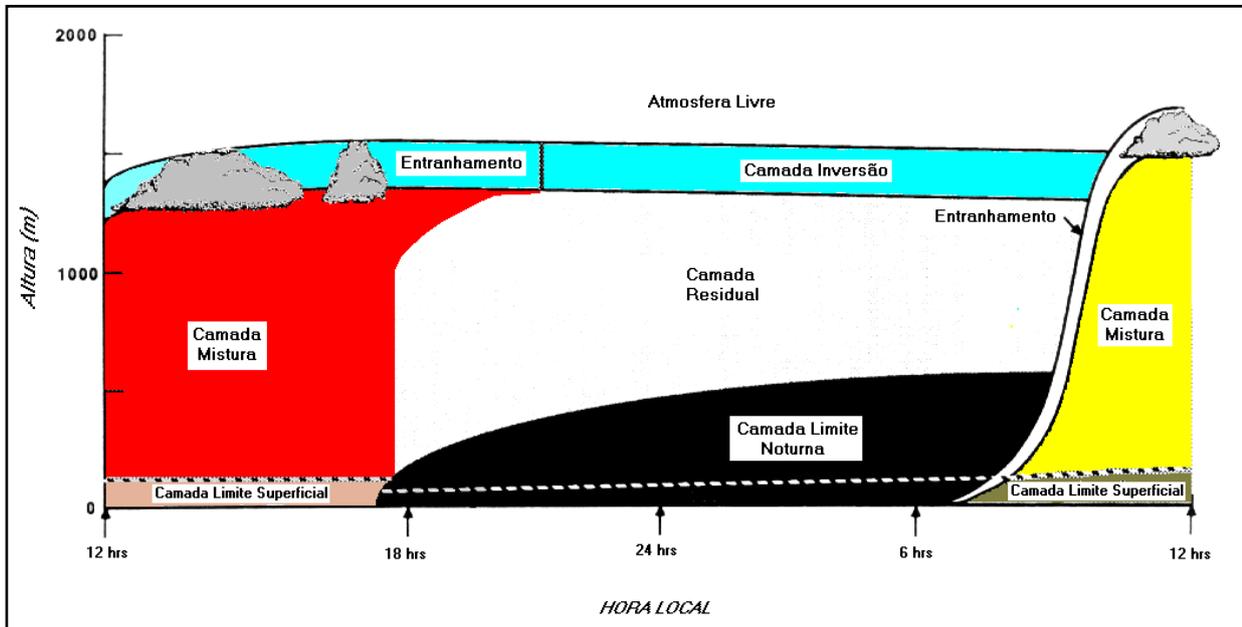
- Ondas: geralmente ocorrem durante o período noturno e são geradas localmente pelo cisalhamento dos ventos médios e pelo fluxo sobre obstáculos. Transportam pouco calor, umidade e outros escalares, mas são efetivas no transporte de energia e momento.

- Turbulência: é constituída de turbilhões que se sobrepõem, cujos diâmetros variam de 1 mm até 3000m. A turbulência tem como efeitos causadores, respectivamente, o efeito mecânico ocasionado pelo cisalhamento do vento (fricção do ar e escoamento sobre a rugosidade do terreno) e o efeito térmico devido ao aquecimento do ar junto à superfície. Fora da camada limite, a turbulência é encontrada em nuvens convectivas e nas proximidades de correntes de jato, onde ocorrem intensos cisalhamentos do vento.

Segundo Stull (1988), sobre a superfície terrestre, nas regiões de alta pressão, a Camada Limite Planetária tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia. Normalmente, em um período de 24 horas, a CLP pode ser classificada, como mostra a figura

3.3, quanto aos seus forçantes como: Camada Limite Convectiva, Camada Residual e Camada Limite Estável.

Figura 3.3 – Evolução temporal da Camada Limite Planetária



Fonte: Adaptada de Stull, (1988).

### 3.1.1.1 Camada Limite Convectiva (CLC)

Ao amanhecer, a Terra é aquecida pela radiação advinda do Sol, e esta se torna mais quente que a atmosfera, a qual por condução aquece o ar em contato com ela. Este ar aquecido se torna mais leve que o ar logo acima (mais frio) e, tende a subir; enquanto o ar mais frio tende a descer. Este movimento convectivo e consecutivo dá origem à Camada Limite Convectiva (CLC). No meio da tarde esta camada pode atingir a altura de 1000 a 2000 m. Como a maioria das fontes poluidoras está próxima da superfície, a concentração de contaminantes pode aumentar significativamente na CLC, pois estes poluentes são transportados por turbilhões e pelas termas (massas de ar quente que se elevam a partir do solo). Durante o decorrer do dia, as termas vão alcançando alturas cada vez maiores.

Pode-se, definir a CLC como aquela região da atmosfera que se estende desde o solo ( $z = 0$ ) até a altura onde ocorre fluxo de calor negativo ( $z = z_i$ ), e que é caracterizada por uma forte mistura impulsionada pelo fluxo vertical de calor positivo. Esta mistura intensa é provocada por movimentos convectivos organizados, gerados pelo aquecimento solar da

superfície terrestre. A CLP pode ser dividida em: Camada Superficial, Camada de Convecção Livre, Camada de Mistura e Camada Interfacial de Entranhamento.

### 3.1.1.1.1 Camada Superficial (CS)

Na camada superficial são observados grandes gradientes de temperatura e velocidade, e o fluxo turbulento é aproximadamente constante. Na camada superficial é onde a teoria de Monin-Obukhov é válida, ou seja, o cisalhamento do vento (turbulência mecânica) tem um papel dominante e está restrita a alturas menores do que  $z \leq |L|$ . O comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) é definido pela equação (3.1).

$$L = -\frac{u_*^3}{k \frac{g}{\theta} (\overline{w\theta})_0}, \quad (3.1)$$

Onde  $\theta$  é a temperatura potencial média que vem a ser aquela que uma parcela de ar teria se esta parcela fosse levada por um escoamento adiabático até a pressão de referência igual a 1000 Pa,  $(\overline{w\theta})_0$  é o fluxo de calor turbulento na superfície,  $u_*$  é a velocidade de fricção na superfície,  $k$  é a constante de Von Karmán e  $g$  é a aceleração da gravidade.

Para Panovsky e Dutton (1984), uma CLC é considerada bem desenvolvida quando valores de  $|L|$  estão entre 10 e 100 metros e onde  $\frac{z_i}{|L|} \geq 10$  sendo que esta razão pode ser considerada um parâmetro de estabilidade, já que expressa a importância da turbulência mecânica.

A partir da razão entre a altura da CLC ( $z_i$ ) e o comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) podemos saber se o experimento analisado é de convecção fraca, moderada ou forte, isto é:

- Convecção fraca:  $\frac{z_i}{|L|} < 5$ ;
- Convecção moderada:  $5 < \frac{z_i}{|L|} < 10$ ;
- Convecção alta:  $\frac{z_i}{|L|} > 10$ .

### 3.1.1.1.2 Camada de Convecção Livre (CCL)

Esta camada compreende a parte da CLC entre  $|L| < z < 0.1z_i$ , nesta camada a velocidade  $u_*$ , não é importante, mas a escala  $z$  ainda é. De fato,  $u_*$ , nunca chega à zero na prática, mas a condição de convecção livre local determina a escala da estrutura da turbulência.

### 3.1.1.1.3 Camada de Mistura (CM)

Esta camada compreende a maior parte da CLC:  $0.1z_i < z < z_i$ , e tem este nome devido à intensa mistura vertical que tende a conservar as variáveis como a temperatura potencial e umidade aproximadamente constantes com a altura. A velocidade do vento nesta região é aproximadamente constante.

Devido a esta mistura, a turbulência nesta região pode ser considerada quase homogênea, e insensível a  $z$  e  $u_*$ .

Sendo assim os parâmetros mais importantes para a descrição desta camada são  $z_i$  e a escala convectiva  $w_*$ , conforme modelos numéricos descritos em Deardorff (1972), observações de campo mostradas em Kaimal e Wyngaard (1976) e experimentos de laboratório descritos em Willis e Deardorff (1976). A escala de velocidade convectiva é expressa por:

$$w_* = \left( \frac{g}{\theta} (\overline{w\theta})_0 z_i \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.2)$$

As dimensões dos grandes turbilhões convectivos são expressas em função de  $z_i$  e as velocidades turbulentas são proporcionais a  $w_*$ . Valores típicos de  $z_i$  e  $w_*$  são, respectivamente, 1000 m e 2000 m e 2m/s (WEIL e BROWER, 1984).

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

#### **3.1.1.1.4 Camada Interfacial de Entranhamento ou Zona de Entranhamento (ZE)**

A camada interfacial de entranhamento estende-se de aproximadamente  $0.8z_i$  até  $1.2z_i$ , e pode ser muito espessa (em média aproximadamente 40% da profundidade da camada de mistura) devido ao processo de entranhamento.

A zona de entranhamento é a região de ar estaticamente estável no topo da camada de mistura, onde existe entranhamento de ar da atmosfera livre para baixo e penetração convectiva das plumas térmicas para cima. Nesta zona, a estrutura da turbulência pode ser dominada por efeitos de entranhamento, pelas características da camada de inversão e pela atmosfera estável acima.

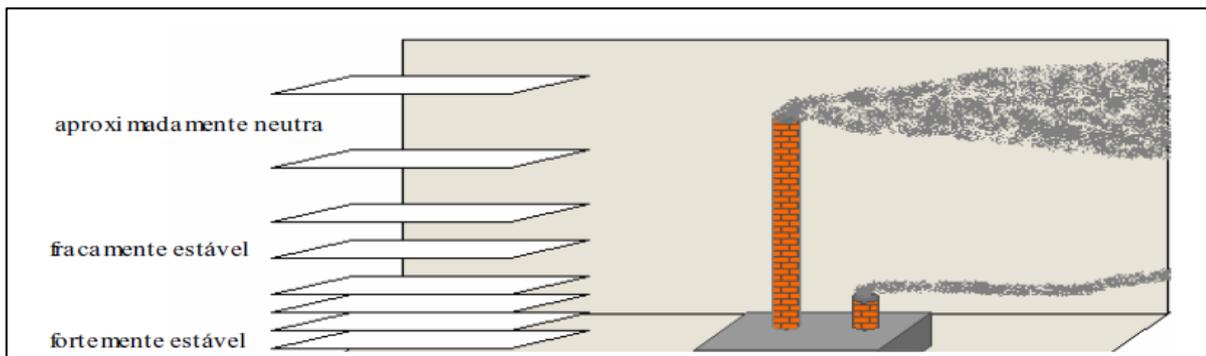
Durante a convecção livre (o fluxo de calor é o principal forçante da turbulência) ocorre a penetração de convecção, onde plumas térmicas provenientes da superfície ganham momentum e se elevam através da camada de mistura. Estas plumas buscam o ar da atmosfera livre e encontram um empuxo negativo, fazendo com que penetrem a uma curta distância devido a seu momentum.

Há pouca turbulência na atmosfera livre, e então não há como dispensar o ar proveniente das termas para a atmosfera livre. Durante a penetração, dentro da inversão, um pouco de ar é empurrado para dentro da camada de mistura. Este ar torna-se rapidamente misturado dentro da camada de mistura devido à forte turbulência e não retorna para cima na camada estável mesmo tendo seu empuxo positivo. O resultado é o entranhamento do ar da atmosfera livre para dentro da camada de mistura.

#### **3.1.1.2 Camada Residual (CR)**

Pouco antes do pôr-do-sol ocorre um decaimento dos grandes turbilhões, que formam a CLC, resultando numa Camada Residual, que é uma camada na qual a turbulência existente é um resíduo daquela gerada por convecção, durante o dia. Na ausência da advecção, traçadores passivos dispersados durante o dia dentro da camada de mistura permanecerão durante a noite na CR. Na Camada Residual, a turbulência existente é aproximadamente igual em todas as direções. Como resultado, plumas de fumaça emitidos dentro da CR tendem a se dispersar em razões iguais nas direções lateral e vertical, apresentando uma forma cônica, como está representado na figura 3.4.

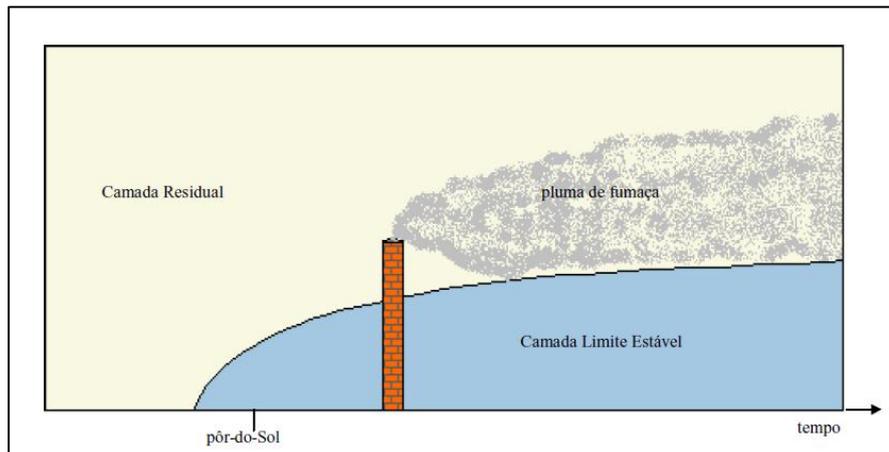
Figura 3.4–Diferença entre o comportamento da pluma dispersada na Camada Limite Estável e outra na Camada Residual



Fonte: Adaptada de Stull, (1988).

No caso de fumaça emitida dentro da CR, dificilmente esta vai ser dispersa em direção ao solo, devido à turbulência limitada. Segundo Stull (1988), plumas de fumaça na CR podem se dispersar até onde a base da pluma colide com o topo da Camada Limite Estável (CLE). A forte estabilidade estática e a redução frequente na turbulência reduzem a mistura para baixo dentro da CLE. O topo da pluma da fumaça algumas vezes pode continuar a subir dentro do ar neutro. Isto é chamado de lofting, que está caracterizado na figura 3.5.

Figura 3.5 – Lofting de uma pluma dispersada na Camada Residual



Fonte: Adaptada de Stull (1988)

Frequentemente a CR aparece durante um período de tempo nas manhãs, antes de entranhar-se dentro da nova Camada de Mistura. Durante este tempo, a radiação solar pode desencadear reações fotoquímicas.

A CR não fica em contato com o solo, mas tem sua base modificada pelo avanço da Camada Limite Estável, que surge durante a noite. O restante da CR não é afetado pelo

transporte das propriedades da superfície, o que faz com que esta camada não se adapte completamente as definições de Camada Limite Planetária, as quais afirmam que a atmosfera é considerada CLP até a altura na qual há influência da superfície no escoamento do ar. Portanto, deve-se considerar a Camada Residual como uma exceção das regras nos estudos da Camada Limite Planetária.

### **3.1.1.3 Camada Limite Estável (CLE)**

A Camada Limite Estável surge antes do pôr-do-Sol, quando a atmosfera está cedendo calor para a Terra, ou seja, a superfície terrestre está mais fria do que o ar em contato com ela. O ar em contato com a superfície passa então a ceder calor por condução, fazendo com que a superfície esfrie-se e, conseqüentemente, se estabilize.

O tipo de estrutura desta CLE depende basicamente de dois tipos de resfriamento: o radiativo (de onda longa, denominada infravermelha) e o turbulento (caracterizado pelo transporte turbulento de calor sensível).

Na situação de domínio do resfriamento radiativo, a inversão é acentuada e a turbulência é fraca e intermitente, levando a um desacoplamento entre as diferentes partes da CLE e colaborando para a formação de jatos de baixos níveis. Neste caso, tem-se uma CLE considerada muito estável, onde os jatos de baixos níveis contribuem para a formação da turbulência mecânica. Na situação oposta, quando o resfriamento turbulento é dominante, a presença de turbilhões tende a gerar uma camada de mistura contínua que acopla as diferentes partes da CLE, e esta é considerada pouco estável.

Devido à natureza física da CLE, podem-se distinguir algumas diferenças sensíveis de profundidade entre a altura da inversão e a camada de mistura turbulenta. A camada de mistura turbulenta pode ser bem menor do que a profundidade de inversão, no caso de perfil de resfriamento radiativo, e também podem ocorrer casos em que a camada de mistura turbulenta seja bem desenvolvida, com a mesma ordem de grandeza da inversão, no caso de perfil de resfriamento turbulento.

Quanto mais desenvolvida for a Camada Limite Estável, maior será a sua profundidade e, conseqüentemente, menor será a espessura da Camada Residual. Neste trabalho, o modelo é aplicado à CLC, já que os dados experimentais confrontados com o mesmo foram obtidos nas condições convectivas.

### 3.1.2 Estrutura da Turbulência na Camada Limite Convectiva

Na CLC, o fluxo de calor sensível turbulento, gerado pelo aquecimento solar da superfície da Terra, dá origem a uma estrutura de plumas térmicas (ar quente que se eleva até a base da inversão térmica) circundadas por ar mais frio que desce do topo das nuvens em direção ao solo. Para condições suficientemente instáveis, estas estruturas são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional, com escalas de tempo da ordem de 15 minutos.

As observações na atmosfera indicam que 40% da área de uma CLC são ocupadas por plumas térmicas (updrafts), enquanto que 60% são ocupadas por ar mais frio que desce (downdrafts). Pela lei da conservação da massa, o ar quente subindo tem uma velocidade maior do que o ar frio que desce.

Modelos numéricos mostram que esta estrutura assimétrica da CLC é responsável por padrões de dispersão vertical que são distintas dos padrões Gaussianos (LAMB, 1982). Esta assimetria na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés na CLC.

A circulação convectiva, incluindo o downdraft e updraft, tem escalas horizontais de  $1.5z_i$  (CANGHEY e PALMER, 1979). Velocidades verticais em termas podem alcançar 5m/s ou mais, embora updrafts de 1 a 2 m/s sejam mais comuns.

### 3.2 Modelo Euleriano de poluição do ar

Será apresentado o método para resolver a equação da difusão turbulenta usando a transformada de Laplace considerando a Camada Limite Planetária (CLP) como um sistema multicamadas (método ADMM – *Advection Diffusion Multilayer Model*). Este método permite utilizar valores contínuos de coeficientes de difusão e velocidades do vento.

As soluções analíticas podem ser expressas sob a forma integral ou por séries (MOREIRA, 2010). Existem várias soluções analíticas na literatura, mas para problemas específicos e particulares. Entre eles, podemos citar as obras de Rounds, (1955), Smith (1957), Scriven e Fischer (1975), Demuth; Van Ulden (1978), Nieuwstadt e de Hann (1981), Lin e Hildemann (1997), Wortmann et al (2005), Sharan e Modani (2007) e Sharan e Kumar (2009). Na verdade, todas essas soluções são válidas para situações práticas muito especializadas, com restrições em perfis verticais de vento e coeficientes de difusão. Tendo

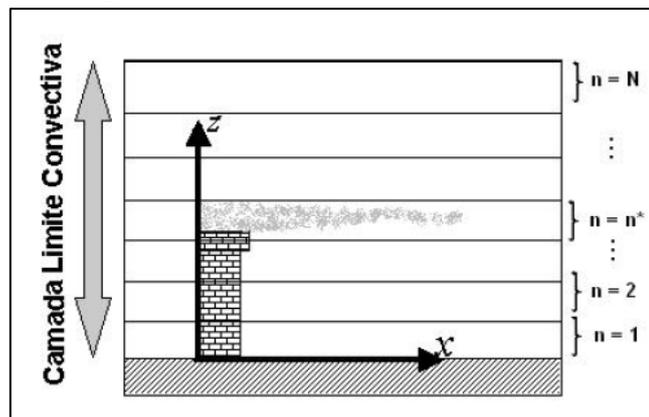
em conta a equivalência destas soluções, mostram-se neste estudo, os resultados alcançados por uma solução integral considerando o coeficiente de difusão dependendo das variáveis  $x$  e  $z$  (sem valores médios na direção  $x$ , como em trabalhos anteriores).

### 3.2.1. Discretização da Camada Limite Planetária

Várias equações simplificadas clássicas da equação de difusão-advecção existem resolvidas analiticamente na literatura, entretanto, a maior parte pode somente ser usada para turbulência homogênea devido ao fato que elas consideram os coeficientes de difusão constantes. Por outro lado, a metodologia de aplicar a transformada de Laplace e dividir a CLP em um sistema multicamadas permite a utilização deste modelo em turbulência não homogênea, sendo que para cada subcamada a equação de difusão-advecção é resolvida usando a transformada de Laplace, considerando-se o coeficiente de difusão vertical em função da distância longitudinal  $K(x,z)$ , como também a velocidade do vento dependente da variável  $U(z)$ , sendo que isto representa um progresso no entendimento da estrutura da CLP.

Na figura 3.6 podemos observar um esquema da discretização da CLP, sendo  $n^*$  a camada onde ocorre a emissão do poluente.

Figura 3.6 - O esquema da CLP dividida em um sistema multicamadas



Fonte: Costa, C.P., 2004

O estudo do transporte e dispersão de poluentes dentro da atmosfera pode ser descrito pela equação da difusão-advecção, que é obtida pela parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade pela utilização do modelo de transporte por gradiente, ou teoria  $K$ . Neste sentido, considerando um sistema cartesiano de coordenadas onde a direção

longitudinal  $x$  seja coincidente com a do vento médio  $U$ , esta equação (regime estacionário) pode ser escrita como em Ayra (1995):

$$U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (3.3)$$

onde  $\bar{c}$  representa a concentração média,  $U$  é a velocidade média do vento e  $K_x, K_y, K_z$  são, respectivamente, os coeficientes de difusão nas direções longitudinal, lateral e vertical. Integrando-se lateralmente a equação (3.3) e, desprezando-se a difusão longitudinal (o qual é importante somente em condições de ventos fracos), devido ao fato do termo do transporte advectivo na direção longitudinal ser muito maior que o termo difusivo turbulento, o resultado da equação bidimensional estacionária será:

$$U(z) \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z(x, z) \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} \right) \quad (3.4)$$

onde  $\bar{c}^y$  representa a concentração média integrada na direção lateral (eixo  $y$ ). Para que o problema de difusão vertical seja resolvido, toma-se como fronteiras a superfície da terra e a altura da CLP, sendo que para as tais supõe-se que não há passagem de qualquer poluente, isto é, o fluxo é zero no solo e no topo da CLP. Portanto, a equação (3.4) fica sujeita às condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0, z_i \quad (3.5)$$

Além disto, supõe-se também um contato perfeito entre as subcamadas nas quais a CLP foi dividida, considerando-se as condições de continuidade para a concentração e fluxo de concentração na interface, respectivamente:

$$\bar{c}_n^y = \bar{c}_{n+1}^y \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (3.6)$$

$$K_n \frac{\partial \bar{c}_n^y}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial \bar{c}_{n+1}^y}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (3.7)$$

Com uma fonte de taxa de emissão constante  $Q$  na altura  $H_s$ :

$$U\overline{c}_n^y(0, z) = Q\delta(z - H_s) \text{ em } x = 0 \quad (3.8)$$

onde  $\delta$  é função delta de Dirac.

Neste momento, é importante mencionar que o coeficiente de difusão pode ser escrito como  $K(x, z) = g(z) \cdot f(x, z)$ , onde  $g(z)$  é uma função (ou constante) cuja dimensão é  $[L^2T^{-1}]$  e  $f(x, z)$  é uma função a ser determinada. São tomados valores médios para as funções  $g(z)$  e  $f(x, z)$ . Portanto, a solução do problema representado pela equação (3.4) é reduzida a N problemas do tipo:

$$U_n \frac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial x} = \overline{g}_n \cdot \overline{f}_n(x) \frac{\partial^2 \overline{c}_n^y}{\partial z^2} \quad z_n \leq z \leq z_{n+1} \quad (3.9)$$

Para  $n = 1: N$ , onde  $\overline{c}_n^y$  denota a concentração no enésimo sub-intervalo e,

$$U_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} U_z(z) dz \quad (3.10)$$

$$\overline{g}_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} g(z) dz \quad (3.11)$$

$$\overline{f}_n(x) = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} f(x, z) dz \quad (3.12)$$

Para obtenção da solução da equação (3.9), pode-se fazer uma mudança de variável (CRANK, 1979), introduzindo neste momento uma nova variável de espaço  $x^*$  definida pela transformação:

$$x^* = \int_0^x \overline{f}_n(x) dx \quad (3.13)$$

A dimensão de  $x^*$  é a mesma de  $x$ , ou seja  $[L]$ , por isso é referida como uma nova variável de espaço. Sendo  $\overline{f}_n(x) > 0$ , a função  $x \rightarrow x^*$  é uma função crescente em  $x$ , e

desaparece quando  $x = 0$ . Observe que  $x^*$  contém o termo dependente da distância da fonte. Portanto, a equação a ser resolvida neste trabalho é a equação (3.9).

### **3.3 Parametrização da turbulência e perfil do vento médio**

Um fluxo turbulento consiste na superposição de turbilhões. Os vários tamanhos de turbilhões dos quais o movimento turbulento é composto possuem energia cinética, quantificada pela sua vorticidade ou pela magnitude das flutuações da velocidade e da frequência correspondente.

Os turbilhões interagem continuamente com os mecanismos dos forçantes turbulentos, dos quais eles extraem suas energias, e também interagem com outros turbilhões. Uma interessante questão na física da dispersão de poluentes é como ocorre à distribuição de energia cinética da turbulência, de acordo com as várias escalas (frequências) dos turbilhões que possuem a maior energia cinética turbulenta (espectro de energia). Do ponto de vista estatístico, estes turbilhões são os responsáveis pelo transporte turbulento na CLP.

A escolha adequada da parametrização da turbulência, ou seja, do coeficiente de difusão, representa um papel importante nos modelos de dispersão de poluentes. A seguir mostram-se três coeficientes de difusão para descrever a estrutura turbulenta da CLP. O primeiro baseado na teoria de Batchelor (1949) o segundo para a camada superficial, baseado em um modelo sugerido por Højstrup (PANOFSKI e DUTTON, 1984) e o último para grandes tempos de difusão, proposto por Degrazia et al. (1997).

#### **3.3.1 Coeficiente de difusão dependente da distância da fonte e da altura vertical**

Este coeficiente de difusão é calculado diretamente da teoria de Batchelor (BATCHELOR, 1949), a qual permite determinar o coeficiente de difusão de forma simples e direta. A derivação utiliza a teoria estatística clássica e as características e propriedades espectrais dos turbilhões mais energéticos. Este coeficiente de difusão contém as escalas de velocidade e comprimento, característicos dos turbilhões mais energéticos e podem descrever a dispersão em campos próximos e intermediários de uma fonte pontual contínua, ou seja, quando a escala da pluma é menor que a escala da turbulência.

De acordo com Batchelor (1949), pode-se escrever o modelo para o coeficiente de difusão dependente da distância da fonte como:

$$K_{i,j} = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_w^2}{dt} = \int_0^t R_{i,j}(\tau) d\tau, \quad (3.14)$$

Onde  $\sigma_w^2$  é a variância da componente vertical da velocidade,  $K_{i,j}$  é o coeficiente de difusão e  $R_{i,j}$  é a função correlação definida como:

$$R_{i,j}(\tau) = \overline{u_i(t)u_j(t+\tau)} \quad (3.15)$$

A equação (3.15) define a correlação entre a velocidade de uma partícula em um tempo  $u_i(t)$  e em um deslocamento temporal  $u_j(t+\tau)$ . A forma adimensional da função é chamada de coeficiente de autocorrelação.

O tensor espectro  $\Phi_{i,j}(\omega)$ , que é a transformada de Fourier de  $R_{i,j}(\tau)$ , é dado por:

$$\Phi_{i,j}(\omega) = \int R_{i,j}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau \quad (3.16)$$

$$R_{i,j}(\tau) = \int \Phi_{i,j}(\omega) e^{i\omega\tau} d\omega \quad (3.17)$$

Substituindo a equação (3.17) na equação (3.14), a seguinte expressão para coeficientes de difusão é obtida:

$$K_{i,j} = \int_0^\infty \Phi_{i,j}(\omega) \frac{\sin(\omega t)}{\omega} d\omega, \quad (3.18)$$

onde foi considerado que  $\Phi_{i,j}(\omega)$  é uma função par em um campo estacionário e, devido ao interesse na soma das componentes da diagonal de  $\Phi_{i,j}(\omega)$ , foi considerado  $i = j$ . Como se está interessado em expressar os coeficientes de difusão em função da distância da fonte, pode-se escrever o tensor espectro em termos do número de onda  $\Phi_{i,i}(\omega) = U^{-1} \varphi_{i,i}(k)$ . Além disso, considera-se a função espectro de energia  $E(k) = 2\pi k^2 \varphi_{i,i}(k)$ , obtida pela integração do tensor espectro sobre uma casca esférica de raio  $k$  no espaço de número de onda. Portanto, pode-se escrever a equação (3.18) da seguinte forma:

$$K_\alpha = \frac{1}{U} \int_0^\infty E_\alpha(k) \frac{\sin(kx)}{k} dk \quad \alpha = x, y, z \quad (3.19)$$

onde  $K_{1,1}, K_{2,2}, K_{3,3}$  é  $K_x, K_y, K_z$ , respectivamente e  $x$  é a distância da fonte em metros.

Da teoria de Taylor (TAYLOR, 1921), os parâmetros de dispersão  $\sigma_\alpha$ , determinam a lei que governa a distribuição média de partículas inicialmente concentradas em um ponto, e em algum tempo posterior. Então, para que os coeficientes de difusão descritos pela equação (3.19) estejam em concordância com a teoria de Taylor, é necessário considerar-se um sistema de referência movendo-se na mesma velocidade do vento médio  $U$ . Então, a função espectro de energia  $E_\alpha(k)$  deve ser Lagrangeana. Porém, como o espectro unidimensional é medido normalmente em pontos fixos, é conveniente expressar os coeficientes de difusão em termos de espectro Euleriano. Então, os coeficientes de difusão são obtidos da forma geral:

$$K_\alpha = \frac{\beta_i}{U} \int_0^\infty E_\alpha^E(k) \frac{\sin(kx/\beta_i)}{k} dk \quad i = u, v, w \quad (3.20)$$

onde  $\beta_i$  é definido como a razão das escalas integrais de tempo Lagrangeana e Euleriana.

### 3.3.1.1 O coeficiente de difusão vertical convectivo

Para calcular o coeficiente de difusão vertical, considera-se a componente vertical do espectro Euleriano de Degrazia et al. (1988)

$$E_w(k) = \frac{a_w}{(1 + b_w k)^{5/3}} \quad (3.21)$$

$$a_w = \frac{1.06}{2\pi} c_w \left(\frac{z}{z_i}\right)^{5/3} z_i \Psi^{1/3} w_*^2 \left[(f_m^*)_w^c\right]^{-5/3} \quad (3.22)$$

$$b_w = \frac{1.5 z}{2\pi z_i} z_i \frac{1}{(f_m^*)_w^c}, \quad (3.23)$$

onde  $c_w = 0.36$  (CHAMPAGNE, 1977);  $z$  é a altura acima do solo;  $z_i$  é a altura da camada limite,  $w_*$  é a escala de velocidade convectiva;  $\Psi = \frac{\varepsilon z_i}{w_*^3}$  é a função taxa de dissipação molecular adimensional, onde  $\varepsilon$  é a dissipação média da energia cinética turbulenta por unidade de tempo por unidade de massa do fluido;  $(f_m^*)_w^c = \frac{z}{B_w z_i}$  é a frequência normalizada do pico espectral independente da estratificação, em que:

$$B_w = 1.8 \left[ 1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right], \quad (3.24)$$

é o valor do pico espectral do comprimento de onda vertical, que foi obtido empiricamente dos dados de Caughey e Palmer (1979).

Para calcular o coeficiente de difusão vertical a partir da equação (3.20) considera-se

$$\beta_w = 0.55 \frac{U}{\sigma_w} \text{ (DEGRAZIA e ANFOSSI, 1998), onde:}$$

$$\sigma_w^2 = \int_0^\infty E_w(k) dk, \quad (3.25)$$

é a variância da componente vertical da velocidade.

### 3.3.1.2 O coeficiente de difusão vertical na camada superficial

Uma parametrização nova para o coeficiente de difusão dependente da distância da fonte e altura vertical dentro da CLP pode ser desenvolvida por meio de um modelo utilizando o espectro de frequências de energia induzidas na camada superficial. A independência estatística de componentes de Fourier para frequências distantes permite a especificação do espectro turbulento da energia cinética como a soma de uma flutuabilidade, (efeito térmico), e uma parte de cisalhamento (efeito mecânico) (PANOFSKY e DUTTON, 1984). O modelo de Højstrup (HØJSTRUP, 1982) divide os espectros em alta e baixa frequência, como sendo a soma de uma flutuabilidade e de um cisalhamento produzido, respectivamente:

$$S(n) = S_L(n) + S_H(n), \quad (3.26)$$

onde a componente vertical relativa a baixa frequência  $S_L(n)$  ocorre devido a produção de empuxo, sendo dependente de  $n = fz/U$  e  $z/L$ , considerando uma escala de velocidade de atrito  $u_*$ , onde  $n$  é uma frequência adimensional,  $f$  é a frequência,  $z$  é a altura acima do solo e  $U$  é a velocidade longitudinal do vento. Considerando-se a escala de velocidade convectiva  $w_*$ , a frequência adimensional será dada por  $n = fz_i/U$  e  $z_i/L$ . A parte de alta frequência  $S_H(n)$  ocorre devido à produção de empuxo e será dependente somente da frequência adimensional. Especificamente o modelo contém a seguinte expressão para a componente vertical:

$$\frac{fS_w(f)}{u_*^2} = \frac{32n}{(1 + 17n)^{5/3}} \left(\frac{z}{-L}\right)^{2/3} + \frac{2n}{1 + 5.3n^{5/3}}, \quad (3.27)$$

onde  $S_w(f)$  é a densidade espectral de  $w$  (velocidade vertical). A velocidade de fricção de superfície é representada por  $u_*$ . A relação entre a velocidade de fricção e a componente vertical da velocidade é dada por:

$$w_* = u_* \left(\frac{z_i}{-\kappa L}\right)^{1/3} \quad (3.28)$$

onde  $\kappa$  a constante de von Kármán, considerada igual a 0.4.

Na equação (3.27) o primeiro termo representa o efeito do empuxo e o segundo termo o efeito mecânico. A variação de velocidade turbulenta vertical é representada por:

$$\sigma_w^2 = \int_0^\infty S_w(f) df \quad (3.29)$$

A presente abordagem depende fundamentalmente do tempo na equação de Batchelor (BATCHELOR, 1949) para a determinação do coeficiente de difusão, em que  $\beta_w = \gamma \frac{U}{\sigma_w}$  é definido como a razão do tempo na escala Lagrangeana pelo tempo integral na escala Euleriano na direção vertical ( $\gamma = 0.55$  é a constante de Corrsin) e  $t = x/U$  (tempo de viagem),

integrantes da equação da difusividade vertical na camada superficial. A equação geral tem a seguinte forma:

$$K_z = \frac{\beta_w}{2\pi} \int_0^\infty S_w(f) \sin(2\pi t f / \beta_w) \frac{df}{f} \quad (3.30)$$

### 3.3.1.3 Coeficiente de difusão para grandes tempos de difusão

O coeficiente de difusão turbulenta utilizado para as simulações não dependente da distância longitudinal da fonte, ou seja, para grandes tempos de difusão, foi obtido por Degrazia et al. (1997), válido para toda a CLP. Não é objetivo deste trabalho a obtenção desta expressão, sendo que será usada somente para comparar com a formulação proposta. Portanto, a equação final é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right] \quad (3.31)$$

Os coeficientes de difusão turbulentos que dependem da distância da fonte permitem capturar o efeito de memória que está presente no campo turbulento próximo as fontes. Para grandes tempos de viagem o coeficiente de difusão da equação (3.31) torna-se independente da distância da fonte e é função apenas das propriedades locais da turbulência. Esta comparação é fundamental para mostrar este efeito.

### 3.3.2 O modelo da parametrização do vento médio

O modelo para parametrização do vento médio são as de similaridade (PANOFSKY e DUTTON, 1984) de Monin-Obukhov e o modelo OML (BERKOWICZ, 1986), dado por:

$$U = \frac{u_*}{\kappa} \left[ \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \psi_m\left(\frac{z}{L}\right) + \psi_m\left(\frac{z_0}{L}\right) \right] \quad z \leq z_b \quad (3.32)$$

onde  $z_b$  é o mínimo valor entre  $|L|$  e  $0,1z_i$ ,  $\kappa$  é a constante de Von Kármán, com valor aproximadamente de 0,4,  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $z_0$  é o comprimento de rugosidade e  $\Psi_m$  é a função de estabilidade dada por Paulson (1975) para  $z \leq z_b$ . Sendo,

$$\psi_m = 2 \ln \left[ \frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[ \frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \operatorname{tg}^{-1}(A) + \frac{\pi}{2}$$

onde

$$A = \left( 1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/4}$$

Existe também, a velocidade do perfil do vento descrita pela lei de potência, conforme está descrito em Panofski e Dutton (1984):

$$U = U_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^n \quad (3.33)$$

Onde  $z_1$  e  $U_1$  são respectivamente a altura e a velocidade na altura em que foi medido o vento, o valor de  $n$  depende da estabilidade.

## 4 DERIVAÇÃO DO MODELO DE POLUIÇÃO DO AR

### 4.1 Solução da equação da difusão-advecção bidimensional estacionária

A transformada de Laplace é uma técnica bem conhecida para resolver equações diferenciais lineares e uma literatura vasta é encontrada sobre este assunto. Esta metodologia é aplicada para resolver a equação (3.9) da difusão-advecção estacionária integrada lateralmente de modo a construir soluções analíticas para a equação de difusão-advecção o que permitirá realizar simulações numéricas da dispersão de poluentes na CLP. Para atingir este objetivo, esta equação é transformada em um conjunto de equações diferenciais ordinárias pela aplicação da transformada de Laplace. Após resolver estas equações com procedimento padrão, a concentração de poluentes é obtida realizando-se a inversão da concentração transformada pelo algoritmo Fixed Talbot (ABATE e VALKÓ, 2004).

Para a resolução da equação (3.9) aplica-se a transformada de Laplace na variável  $x^*$ :

$$\overline{c_n^y}(s, z) = L_P\{\overline{c_n^y}(x^*, z); x^* \rightarrow s\} \quad (4.1)$$

portanto,

$$L_P\left\{\frac{U_n}{\overline{g}_n} \frac{\partial \overline{c_n^y}(x^*, z)}{\partial x^*}\right\} = L_P\left\{\frac{\partial^2 \overline{c_n^y}(x^*, z)}{\partial z^2}\right\} \quad (4.2a)$$

logo,

$$\frac{d^2 \overline{c_n^y}(s, z)}{dz^2} - \frac{sU_n}{\overline{g}_n} \overline{c_n^y}(s, z) = -\frac{U_n}{\overline{g}_n} \overline{c_n^y}(0, z) \quad (4.2b)$$

Substituindo-se a condição de fonte mostrada na equação (3.8), obtém-se a seguinte equação diferencial ordinária de segunda ordem, com coeficientes constantes e não homogênea:

$$\frac{d^2 \overline{c_n^y}(s, z)}{dz^2} - \frac{sU_n}{\overline{g}_n} \overline{c_n^y}(s, z) = -\frac{Q\delta}{\overline{g}_n} (z - H_s) \quad (4.2c)$$

A equação (4.2c) é uma equação diferencial linear não homogênea, com coeficientes constantes. Para facilitar a notação reescreve-se a equação (4.2c) da seguinte forma:

$$\overline{c_n^y}'' - \frac{sU_n}{\overline{g}_n} \overline{c_n^y} = -\frac{Q\delta}{\overline{g}_n} (z - H_s) \quad (4.2d)$$

A solução geral da equação (4.2d) pode ser escrita sob a forma:

$$\overline{c_n^y}(s, z) = \overline{c_{nh}^y}(s, z) + \overline{c_{np}^y}(s, z) \quad (4.3)$$

Onde  $\overline{c_{np}^y}(s, z)$  é a solução particular e  $\overline{c_{nh}^y}(s, z)$  é a solução homogênea, da equação homogênea associada.

#### 4.1.1 Solução Homogênea

Equação homogênea associada à equação (4.2d) é:

$$\overline{c_n^y}'' - \frac{sU_n}{\overline{g}_n} \overline{c_n^y} = 0 \quad (4.4)$$

Resolve-se a equação (4.4) e tem-se:

$$\lambda^2 - \frac{sU_n}{\overline{g}_n} = 0 \quad (4.5)$$

$$\lambda = \pm \sqrt{\frac{sU_n}{\overline{g}_n}} \quad (4.6)$$

Logo para  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  reais e distintos, tem-se como solução homogênea:

$$\overline{c_{nh}^y}(s, z) = A_n e^{-\frac{sU_n z}{\overline{g}_n}} + B_n e^{\frac{sU_n z}{\overline{g}_n}} \quad (4.7)$$

### 4.1.2 Solução particular

Um caminho para se chegar a solução particular  $\overline{c_{np}^y}(s, z)$ , é relacioná-la com a expressão de  $\overline{c_{nh}^y}(s, z)$ . De forma que  $\overline{c_{np}^y}(s, z)$  pode ser escrita sob a forma integral como segue, conforme Kreider et al. (1972).

$$\overline{c_{np}^y} = \int_0^{z_i} G(z, t)h(t)dt \quad (4.8)$$

onde  $h(t)$  é uma função impulso; neste caso,  $h(t) = -\frac{Q\delta}{\bar{g}_n}(t - H_S)$ , e  $G(z, t)$  é a função de Green, definida por:

$$G(z, t) = \frac{y_2(z)y_1(t) - y_1(z)y_2(t)}{W[(y_1(t)y_2(t))]} \quad (4.9)$$

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

$$W[(y_1(t)y_2(t))] = \begin{vmatrix} y_1(t) & y_2(t) \\ y_1'(t) & y_2'(t) \end{vmatrix} \quad (4.10)$$

Como:

$$y_1(z) = e^{-\left(\sqrt{\frac{sU_n}{\bar{g}_n}}\right)z}$$

$$y_2(z) = e^{\left(\sqrt{\frac{sU_n}{\bar{g}_n}}\right)z}$$

e, denotando:

$$R_N = \sqrt{\frac{U_n s}{\bar{g}_n}}$$

Assim, encontra-se o Wrosquiano,  $W[(y_1(t), y_2(t))]$ :

$$W[(y_1(t)y_2(t))] = \begin{vmatrix} e^{-R_N t} & e^{R_N t} \\ -R_N e^{-R_N t} & R_N e^{R_N t} \end{vmatrix} \quad (4.11a)$$

$$= R_N e^{-R_N t} e^{R_N t} + R_N e^{-R_N t} e^{R_N t} \quad (4.11b)$$

$$= 2R_N e^{-R_N t + R_N t} \quad (4.11c)$$

$$= 2R_N \quad (4.11d)$$

Portanto, a função Green procura para o presente problema é:

$$G(z, t) = \frac{e^{R_N z} \cdot e^{-R_N t} - e^{-R_N z} \cdot e^{R_N t}}{2R_N} \quad (4.12)$$

Assim, substituindo a equação (4.12) na equação (4.8), obtem-se:

$$\overline{c_{np}^y} = \int_0^{z_i} \frac{e^{R_N z} \cdot e^{-R_N t} - e^{-R_N z} \cdot e^{R_N t}}{2R_N} \left[ -\frac{Q\delta}{\bar{g}_n} (t - H_S) \right] dt \quad (4.13a)$$

$$= -\frac{Q}{2R_N \bar{g}_n} \left[ e^{R_N z} \int_0^{z_i} e^{-R_N t} \delta(t - H_S) dt - e^{-R_N z} \int_0^{z_i} e^{R_N t} \delta(t - H_S) dt \right] \quad (4.13b)$$

$$= -\frac{Q}{2R_N \bar{g}_n} [e^{R_N z} \cdot e^{-R_N H_S} - e^{-R_N z} \cdot e^{R_N H_S}] \quad (4.13c)$$

$$= -\frac{Q}{2R_N \bar{g}_n} [e^{R_N(z-H_S)} - e^{-R_N(z-H_S)}] \quad (4.13d)$$

$$= \frac{Q}{2R_A} [e^{R_N(z-H_S)} - e^{-R_N(z-H_S)}] \quad (4.13e)$$

onde:  $R_A = \sqrt{U_n s \bar{g}_n}$

Portanto a solução particular é:

$$\overline{c_{np}^y}(s, z) = \frac{Q}{2R_A} (e^{-R_N(z-H_S)} - e^{R_N(z-H_S)}) \quad (4.14)$$

### 4.1.3 Solução geral

Assim a solução geral da equação (4.3) dada pelo somatório da solução homogênea (equação (4.7)) e da solução particular (equação (4.14)) será:

$$\overline{c}_n^y(s, z) = A_n e^{-R_N z} + B_n e^{R_N z} + \frac{Q}{2R_A} (e^{-R_N(z-H_s)} - e^{R_N(z-H_s)}) \quad (4.15)$$

Onde o último termo do lado direito é válido na camada que contém a fonte. Para se determinar as constantes  $A_n$  e  $B_n$ , aplicam-se as  $(2N-2)$  condições de continuidade para a concentração e fluxo de concentração na interface representadas nas equações (3.6) e (3.7):

$$\begin{aligned} \text{em } z = 0: & \left\{ \begin{array}{l} K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_1(s, 0) = 0 \end{array} \right. \\ \\ \text{em } z = z_1: & \left\{ \begin{array}{l} \overline{C}_1(s, z_1) = \overline{C}_2(s, z_1) \\ K_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_1(s, z_1) = K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_2(s, z_1) \end{array} \right. \\ \\ \text{em } z = z_2: & \left\{ \begin{array}{l} \overline{C}_2(s, z_2) = \overline{C}_3(s, z_2) \\ K_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_2(s, z_2) = K_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_3(s, z_2) \end{array} \right. \\ \\ \text{em } z = z_3: & \left\{ \begin{array}{l} \overline{C}_3(s, z_3) = \overline{C}_4(s, z_3) \\ K_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_3(s, z_3) = K_{z_4} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_4(s, z_3) \end{array} \right. \\ & \qquad \qquad \qquad \vdots \qquad \qquad \qquad \vdots \\ \\ \text{em } z = z_{(N-1)}: & \left\{ \begin{array}{l} \overline{C}_{N-1}(s, z_{(N-1)}) = \overline{C}_N(s, z_{(N-1)}) \\ K_{z_{(N-1)}} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_{N-1}(s, z_{(N-1)}) = K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_N(s, z_{(N-1)}) \end{array} \right. \\ \\ \text{em } z = z_i: & \left\{ \begin{array}{l} K_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C}_N(s, z_i) = 0 \end{array} \right. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Com as expressões obtidas na equação (4.16) chega-se a um sistema linear de dimensão ( $d=2N$ ) dado por  $\mathbf{MX} = \mathbf{b}$ :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & M_{46} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & M_{53} & M_{54} & M_{55} & M_{56} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{65} & M_{66} & M_{67} & M_{68} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{75} & M_{76} & M_{77} & M_{78} & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d-1,d-3} & M_{d-1,d-2} & M_{d-1,d-1} & M_{d-1,d} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d,d-1} & M_{d,d} \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

$$\mathbf{X} = [A_1 \quad B_1 \quad A_2 \quad B_2 \quad A_3 \quad B_1 \quad \dots \quad \dots \quad A_N \quad B_N]^T \quad (4.18)$$

$$\mathbf{b} = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \dots \quad \dots \quad -S_{pN^*} \quad -S'_{pN^*} \quad \dots \quad 0 \quad 0] \quad (4.19)$$

onde  $n^*$  indica a região de emissão.  $S_{pN^*}$  é a solução particular  $S'_{pN^*}$  é a derivada da solução particular, ambas aplicadas na região da emissão, ou seja:

$$S_{pN^*} = \frac{Q}{2R_{A^*}} (e^{-R_{N^*}(z-H_s)} - e^{R_{N^*}(z-H_s)}) \quad (4.20)$$

$$S'_{pN^*} = R_{A^*} \frac{Q}{2R_{A^*}} (e^{-R_{N^*}(z-H_s)} - e^{R_{N^*}(z-H_s)}) \quad (4.21)$$

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

$$M_{11} = -R_1$$

$$M_{12} = R_1$$

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

$$M_{2n,2n-1} = e^{-R_n z_n}$$

$$M_{2n,2n} = e^{R_n z_n}$$

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

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

$$M_{2n+1,2n-1} = (-K_n R_n) e^{-R_n z_n}$$

$$M_{2n+1,2n} = (K_n R_n) e^{R_n z_n}$$

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

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

$$M_{2n+2,2n+1} = e^{-R_{n+1} z_{n+1}}$$

$$M_{2n+2,2n+2} = -e^{R_{n+1} z_{n+1}}$$

$$M_{2n+2,2n+3} = e^{-R_{n+2} z_{n+1}}$$

$$M_{2n+2,2n+4} = -e^{R_{n+2} z_{n+1}}$$

e por fim,

$$M_{n,n-1} = -R_n e^{-R_n z_n}$$

$$M_{n,n} = R_n e^{R_n z_n}$$

O sistema  $\mathbf{MX}=\mathbf{b}$  será resolvido numericamente utilizando o método da Eliminação de Gauss, (BURDEN, 2003). O algoritmo foi implementado na linguagem de programação FORTRAN.

#### 4.1.4 Inversão da solução

Na seção anterior obteve-se a equação (4.15) de forma analítica, porém a concentração de poluentes  $\overline{c}_n^y(x^*, z)$  é obtida invertendo  $\overline{c}_n^y(s, z)$  numericamente. O esquema do algoritmo Fixed Talbot será mostrado a seguir:

Se  $f(s) = \mathcal{L}\{F(t)\}$  então  $\mathcal{L}^{-1}\{f(s)\}$  é dada pela integral de Mellin

$$F(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} f(s) ds, \quad t > 0 \quad (4.22)$$

$F(t) = 0$  para  $t < 0$ . Esse resultado é chamado *integral ou fórmula complexa de inversão*. Também é conhecido como *fórmula integral de Bromwich*. O resultado proporciona um meio direto de obter a transformada inversa de Laplace de uma função dada  $f(s)$ .

No problema que está sendo resolvido neste trabalho, tem-se que:

$$\overline{c}_n^y(x^*, z) = \mathcal{L}^{-1}\{\overline{c}_n^y(s, z)\} \quad (4.23)$$

então

$$\overline{c}_n^y(x^*, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{sx^*} \overline{c}_n^y(s, z) ds, \quad (4.24)$$

Logo a solução procurada será obtida substituindo-se a equação (4.15) na equação (4.24), tendo-se:

$$\overline{c}_n^y(x^*, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{i-\gamma\infty}^{i+\gamma\infty} e^{sx^*} \left\{ A_n e^{-R_N z} + B_n e^{R_N z} + \frac{Q}{2R_A} [e^{-(z-H_S)R_N} - e^{(z-H_S)R_N}] H(z - H_S) \right\} ds \quad (4.25)$$

$$R_N = \sqrt{\frac{U_n s}{\overline{g}_n}} \quad (4.25a)$$

$$R_A = \sqrt{U_n s \overline{g}_n} \quad (4.25b)$$

onde  $H(z - H_S)$  é a função de Heaviside. As constantes de integração  $A_N$  e  $B_N$  são previamente determinadas resolvendo o sistema linear resultante da aplicação das condições de contorno e interfaces. Na verdade, devido à complexidade, podemos solucionar a integral que aparece na equação (4.36) numericamente pelo algoritmo Fixed Talbot (FT) (ABATE e VALKÓ, 2004). Este procedimento gera-se a:

$$\overline{c}_n^y(x^*, z) = \frac{r}{M^*} \left[ \frac{1}{2} \overline{c}_n^y(r, z) e^{rx^*} + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re} \left[ e^{x^* S(\theta_k)} \overline{c}_n^y(s(\theta_k), z) (1 + i\tau(\theta_k)) \right] \right] \quad (4.26)$$

onde

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

$$\tau(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot \theta_k - 1)\cot \theta_k$$

$$\theta_k = \frac{k \pi}{M^*}$$

Sendo que  $r$  é um parâmetro baseado em experimentos numéricos e  $M^*$  é o número de termos no somatório no algoritmo de FT. No que se refere à questão da aproximação *stepwise*, é importante ter em mente que a aproximação *stepwise* de uma função contínua converge para a função contínua quando o intervalo da aproximação vai para zero. Neste método só é necessário escolher o número das subcamadas de forma adequada, tomando a suavidade das funções  $K$  e  $U$ . Portanto, este modelo preserva a beleza de uma solução analítica sem comprometer a precisão do coeficiente de difusão e da velocidade do vento para calcular as concentrações integradas lateralmente.

A partir do modelo de difusão descrito neste capítulo fazem-se necessárias, para simular o campo de concentração superficial de poluentes fornecido pela equação (4.26), as informações sobre a taxa de emissão, altura da fonte, a componente vertical do coeficiente de difusão, a velocidade do vento médio e alguns parâmetros micrometeorológicos, que normalmente são obtidos através de experimentos. A seguir têm-se informações sobre a determinação parametrização da turbulência e apresentação do perfil do vento médio e alguns elementos essenciais para a determinação da simulação do campo de concentração superficial de poluentes.

## 4.2 Determinação dos coeficientes de difusão aplicados no modelo

A seguir iremos determinar os coeficientes de difusão aplicados ao modelo para determinação da concentração de poluentes bidimensional estacionária. Estes coeficientes serão dependentes da distancia longitudinal e da altura vertical e independente da distância longitudinal com a finalidade de confrontar os resultados.

#### 4.2.1 Coeficiente de difusão convectivo

Então, o coeficiente de difusão vertical descrito em termos dos turbilhões mais energéticos, função da distância adimensional  $X = xw_*/Uz_i$  e da altura adimensional  $z/z_i$  pode ser determinado de acordo com o procedimento a seguir mostrado:

a) Inicialmente determina-se a variância da componente vertical da velocidade ( $\sigma_w^2$ ) através da integração da equação (3.25) e substituição dos coeficientes  $a_w$ ,  $b_w$  e  $c_w = 0.36$ , dados pelas equações (3.22) e (3.23). O resultado será:

$$\sigma_w^2 = 0.382 \left( \frac{z}{z_i} \right)^{2/3} \Psi^{2/3} w_*^2 \left[ (f_m^*)_w^c \right]^{-2/3} \quad (4.27)$$

b) Extraíndo-se a raiz quadrada da equação (4.27) tem-se o valor do desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento ( $\sigma_w$ ).

$$\sigma_w = 0.618 \left( \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \Psi^{1/3} w_* \left[ (f_m^*)_w^c \right]^{-1/3} \quad (4.28)$$

c) Para a determinação da razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana ( $\beta_w$ ) substitui-se a equação (4.28) na equação que a define e tem-se:

$$\beta_w = 0.89U \left( \frac{z}{z_i} \right)^{-1/3} \Psi^{-1/3} w_*^{-1} \left[ (f_m^*)_w^c \right]^{1/3} \quad (4.29)$$

d) Para a determinação do coeficiente de difusão convectivo  $K_{(z)}(x, z)$  dependente da distância da fonte, segundo a teoria de Batchelor, utiliza-se a equação abaixo, substituindo o valor de ( $\beta_w$ ) que é mostrado na equação (4.29) e as expressões que definem o espectro Euleriano de Degrazia et al. (1997):

$$K_{(z)}(x, z) = \frac{\beta_w}{U} \int_0^\infty E_w^E(k) \frac{\sin\left(\frac{kx}{\beta_w}\right)}{k} dk \quad (4.30)$$

$$\frac{K_{(z)}(x, z)}{w_* z_i} = 0.054 \left( \frac{z/z_i}{(f_m^*)_w^c} \right)^{4/3} \Psi^{1/3} \int_0^\infty \frac{\sin \left( 1.12 (z/z_i)^{1/3} [(f_m^*)_w^c]^{-1/3} \Psi^{1/3} X z_i k \right) dk}{\left( 1 + \frac{1.5}{2\pi} \frac{z}{(f_m^*)_w^c} k \right)^{5/3}} \frac{dk}{k} \quad (4.31)$$

A equação (4.31) contém a função  $\Psi$  que representa a taxa de dissipação molecular adimensional, sendo que a evolução da CLP é dependente desta função.

Observações e simulações numéricas na região central da CLP mostram que  $\Psi \cong 0.4$  (CAUGHEY, 1982). Apesar disto, muitos experimentos de campo na CLP (KAIMAL, 1976) e (CAUGHEY, 1982) mostram que para alturas adimensionais entre  $0.05 < z/z_i < 0.3$ , os valores de  $\Psi$  são muito maiores que 0.4.

Desta forma, seguindo Druilhet et al. (1983), o perfil de  $\Psi$  pode ser aproximado pela equação:

$$\Psi = 1.26 \exp \left( -\frac{z}{0.8 z_i} \right) \quad (4.32)$$

Por outro lado, baseado nos experimentos de Minnesota e Aschuerch (CAUGHEY, 1982), a função dissipação pode ser descrita da seguinte forma:

$$\Psi = 1.5 - 1.2 \left( \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \quad (4.33)$$

Finalmente, segundo Højstrup (1982) sugeriu a seguinte curva para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, que será adotada neste trabalho.

$$\Psi = \left[ \left( 1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \left( \frac{z}{-L} \right)^{-2/3} + 0.75 \right]^{3/2}, \quad (4.34)$$

Onde  $L$  é comprimento de Monin-Obukhov.

#### 4.2.2 Coeficiente de difusão vertical na camada superficial

Determina-se o coeficiente de difusão isolando-se os espectros de frequência mostrados na equação (3.27) e aplicados na equação (3.29), com diferentes escalas de tempo.

As escalas de tempo adotadas são a convectiva (altura da camada limite e velocidade convectiva) e a escala de tempo superficial (altura acima do solo e velocidade de atrito)

#### 4.2.2.1 Coeficiente de difusão para a camada superficial (escala de tempo $z_i/w_*$ )

A densidade espectral vertical considerando apenas o efeito de empuxo  $S_{wb}(f)$ , representado pela primeira parte da equação (3.27) é dada por:

$$S_{wb}(f) = \frac{17.38w_*^2 z_i}{U(1 + 17fz_i/U)^{5/3}} \quad (4.35)$$

Em seguida, usando a equação (3.29), a variância da velocidade turbulenta vertical é:

$$\sigma_{wb}^2 = 1.533w_*^2 \quad (4.36)$$

Usando a relação de  $\beta_w$  resulta:

$$\beta_{wb} = \frac{0.444U}{w_*}, \quad (4.37)$$

e, finalmente, usando a equação (3.30), obtêm-se o coeficiente de difusão vertical considerando-se o efeito do empuxo para a camada superficial sendo que a escala de tempo considerada é  $z_i/w_*$ :

$$\frac{K_z^b(x, z)}{w_* z_i} = 1.228 \int_0^\infty \frac{\sin(14.151Xn)}{(1 + 17n)^{5/3}} \frac{dn}{n}, \quad (4.38)$$

$$\text{onde } X = \frac{w_* x}{U z_i} \text{ e } f = \frac{nU}{z_i}$$

A densidade espectral vertical, considerando apenas o efeito mecânico,  $S_{ws}(f)$  representado pela segunda parte da equação (3.27) é dada por:

$$S_{ws}(f) = \frac{1.086w_*^2 z_i (z_i/-L)^{-2/3}}{U(1 + 5.3(fz_i/U)^{5/3})} \quad (4.39)$$

Em seguida, usando a equação (3.29), a variância de velocidade turbulenta vertical é:

$$\sigma_{ws}^2 = 0.791w_*^2(z_i/-L)^{-2/3} \quad (4.40)$$

Usando a relação de  $\beta_w$  resulta:

$$\beta_{ws} = \frac{0.619U(z_i/-L)^{1/3}}{w_*}, \quad (4.41)$$

e, finalmente, usando a equação (3.30), obtemos o coeficiente de difusão vertical considerando o efeito mecânico para a camada superficial sendo que a escala de tempo considerada é  $z_i/w_*$ :

$$\frac{K_z^s(x, z)}{w_*z_i} = 0.106(z_i/-L)^{-1/3} \int_0^\infty \frac{\sin(10.150(z_i/-L)^{-1/3}Xn)}{(1 + 5.3n^{5/3})} \frac{dn}{n}, \quad (4.42)$$

$$\text{onde } X = \frac{w_*x}{Uz_i} \text{ e } f = \frac{nU}{z_i}$$

#### 4.2.2.2 Coeficiente de difusão para a camada superficial (escala de tempo $z/u_*$ )

A densidade espectral vertical considerando apenas o efeito de empuxo  $S_{wb}(f)$  é dada representado pela primeira parte da equação (3.27) é dada por:

$$S_{wb}(f) = \frac{32u_*^2z(z/-L)^{2/3}}{U(1 + 17fz/U)^{5/3}} \quad (4.43)$$

Em seguida, usando a equação (3.29), a variância da velocidade turbulenta vertical é:

$$\sigma_{wb}^2 = 2.824u_*^2(z/-L)^{2/3} \quad (4.44)$$

Usando a relação de  $\beta_w$  resulta:

$$\beta_{wb} = \frac{0.327U(z/-L)^{-1/3}}{u_*}, \quad (4.45)$$

e, finalmente, usando a equação (3.30), obtêm-se o coeficiente de difusão vertical considerando-se o efeito do empuxo para a camada superficial sendo que a escala de tempo considerada é  $z/u_*$ :

$$\frac{K_z^b(x, z)}{u_* z} = 1.667(z/-L)^{1/3} \int_0^\infty \frac{\sin(19.190(z/-L)^{1/3} X n)}{(1 + 17n)^{5/3}} \frac{dn}{n}, \quad (4.46)$$

$$\text{onde } X = \frac{u_* x}{Uz} \text{ e } f = \frac{nU}{z}$$

A densidade espectral vertical, considerando apenas o efeito mecânico,  $S_{ws}(f)$  representado pela segunda parte da equação (3.27) é dada por:

$$S_{ws}(f) = \frac{2u_*^2 z}{U(1 + 5.3(fz/U)^{5/3})} \quad (4.47)$$

Em seguida, usando a equação (3.29), a variância da velocidade turbulenta vertical é:

$$\sigma_{ws}^2 = 1.457u_*^2 \quad (4.48)$$

Usando a relação de  $\beta_w$  resulta:

$$\beta_{ws} = \frac{0.456U}{u_*}, \quad (4.49)$$

e, finalmente, usando a equação (3.30), obtêm-se o coeficiente de difusão vertical considerando o efeito mecânico para a camada superficial, sendo que a escala de tempo considerada é  $z/u_*$ :

$$\frac{K_z^s(x, z)}{u_* z} = 0.145 \int_0^\infty \frac{\sin(13.790Xn)}{(1 + 5.3n^{5/3})} \frac{dn}{n}, \quad (4.50)$$

$$\text{onde } X = \frac{u_* x}{Uz} \text{ e } f = \frac{nU}{z}$$

Sabe-se que a dispersão na CLP é gerada através de dois processos diferentes: o primeiro é processo relacionado ao empuxo que normalmente é responsável pelo transporte convectivo e o segundo processo referente ao vento e é mais efetivo nas proximidades da superfície. Assim, assumindo a hipótese de superposição dos efeitos produzidos pelos dois mecanismos forçantes, pode-se escrever o coeficiente de difusão para a camada superficial como uma combinação das equações (4.38) e (4.42) considerando a escala de tempo  $z_i/w_*$  e, através da combinação das equações (4.46) e (4.50) considerando a escala de tempo  $z/u_*$  conforme as expressões a seguir:

$$K_z(x, z) = K_z^b(x, z) + K_z^s(x, z) \quad (4.51)$$

a) Com a escala de tempo  $z_i/w_*$

$$\begin{aligned} \frac{K_z(x, z)}{w_* z_i} = 1.228 \int_0^\infty \frac{\sin(14.151Xn) dn}{(1 + 17n)^{5/3} n} \\ + 0.106(z_i/-L)^{-1/3} \int_0^\infty \frac{\sin(10.150(z_i/-L)^{-1/3}Xn) dn}{(1 + 5.3n^{5/3}) n} \end{aligned} \quad (4.52)$$

b) Com a escala de tempo  $z/u_*$

$$\frac{K_z(x, z)}{u_* z} = 1.66 \left(\frac{z}{-L}\right)^{\frac{1}{3}} \int_0^\infty \frac{\sin(19.21X(z/-L)^{1/3}n) dn}{(1 + 17n)^{5/3} n} + 0.146 \int_0^\infty \frac{\sin(13.65Xn) dn}{(1 + 5.3n^{5/3}) n} \quad (4.53)$$

### 4.2.3 Coeficiente de difusão independente da distância da fonte

O coeficiente de difusão utilizado no modelo, para simulações independentes da distância longitudinal da fonte, ou seja, para grandes tempos de difusão, é mostrada na equação (3.31), que repetimos a seguir:

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right] \quad (3.31)$$

### 4.3 Escolha do modelo do vento médio

O modelo de parametrização do vento médio escolhido para este trabalho é o da similaridade, representado pela equação (3.32), que é mostrada a seguir:

$$U = \frac{u_*}{\kappa} \left[ \ln \left( \frac{z}{z_0} \right) - \psi_m \left( \frac{z}{L} \right) + \psi_m \left( \frac{z_0}{L} \right) \right] \quad z \leq z_b \quad (3.32)$$

## 5 DADOS EXPERIMENTAIS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO

Após a definição do modelo que expressa a dispersão de poluentes na CLP temos que realizar a validação deste, a fim de verificar se as soluções obtidas apresentem um bom grau de confiança. Encontrar a solução de um problema proposto é parte do processo, entretanto, a análise dos resultados encontrados é fundamental. Portanto, um modelo para a determinação do nível de concentração de poluentes que é utilizado para conhecer a qualidade do ar atmosférico deve ter os seguintes atributos:

- Incorporar uma descrição realística dos elementos físicos que caracterizam o sistema a ser modelado;
- Produzir estimativas adequadas dos dados observacionais.

Hanna (HANNA, 1989) dividiu a validação de um modelo de dispersão em três fases, com a finalidade de organizar a metodologia para a obtenção de um determinado modelo:

- i. Análise da estrutura do modelo a ser estudado,
- ii. Análise da sensibilidade, e
- iii. Confrontamento dos resultados obtidos com a aplicação do modelo e os resultados observados através de experimentos.

É de fundamental importância, portanto, verificar na formulação do modelo proposto, as hipóteses e simplificações envolvidas a fim de realizar a perfeita compreensão do problema e perceber de maneira objetiva o que será necessário para a sua validação. Esta fase é imprescindível porque oportuniza a organização da modelagem e sua confirmação determinando uma diferenciação relacionada a outros modelos. O processo de validação do modelo estudado tem como objetivo verificar o procedimento adotado, bem como o grau de correção dos cálculos realizados durante a modelagem como também a efetividade da programação computacional necessária para a resolução do problema.

A fim de cumprir estes objetivos, neste trabalho são utilizados dados experimentais consagrados na literatura para comparação com resultados calculados. Por fim, para efeito de comparação com estes dados experimentais, é feita uma análise estatística de acordo com o trabalho de Hanna (HANNA, 1989).

## 5.1 Dados experimentais

Com o intuito de avaliar o desempenho dos modelos estudados confrontam-se dados gerados pelos modelos com dados observados no experimento de Prairie Grass (BARAD, 1958). O experimento de Prairie Grass é muito particular, pois se caracteriza por ser de fonte baixa (~0.5 m) com forte turbulência convectiva ( $\frac{z_i}{|L|} > 10$ ).

### 5.1.1 Experimento de Prairie Grass

O experimento de Prairie Grass foi realizado em O'Neill, Nebraska (EUA), nos meses de Julho e Agosto de 1956, descritos por Barad (1958). O traçador utilizado para realização deste experimento foi o dióxido de enxofre (SO<sub>2</sub>) que foi liberado a uma altura de aproximadamente 0.5 m e coletado a uma altura de 1.5 m acima do solo, na direção do vento predominante, ao longo de 05 arcos concêntricos em distâncias de 50, 100, 200, 400 e 800 m. Portanto, o desempenho do modelo para fonte baixa é analisado através do confronto dos resultados obtidos com a aplicação do modelo e os dados para o caso fortemente convectivo descritos no trabalho de Nieuwstadt (1980). O terreno de Prairie Grass é plano com comprimento de rugosidade aerodinâmica de 0,6 cm. A tabela 5.1 mostra os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão utilizados no modelo.

Tabela 5.1 – Dados micrometeorológicos do experimento de Prairie Grass

Experimento	L (m)	$z_i$ (m)	$w_*$ (m/s)	U (m/s)	Q (g/s)
1	-9	260	0.84	3.2	82
5	-28	780	1.64	7.0	78
7	-10	1340	2.27	5.1	90
8	-18	1380	1.87	5.4	91
9	-31	550	1.70	8.4	92
10	-11	950	2.01	5.4	92
15	-8	80	0.70	3.8	96
16	-5	1060	2.03	3.6	93
19	-28	650	1.58	7.2	102
20	-62	710	1.92	11.3	102
25	-6	650	1.35	3.2	104
26	-32	900	1.86	7.8	98
27	-30	1280	2.08	7.6	99
30	-39	1560	2.23	8.5	98
43	-16	600	1.66	6.1	99
44	-25	1450	2.20	7.2	101
49	-28	550	1.73	8.0	102
50	-26	750	1.91	8.0	103
51	-40	1880	2.30	8.0	102
61	-38	450	1.65	9.3	102

Fonte: Nieuwstadt, 1980.

## 5.2 Índices estatísticos

Geralmente, procura-se avaliar o desempenho dos modelos através da utilização de índices estatísticos, os quais descrevem a capacidade de representar dados observados. Para a realização desta análise estatística utiliza-se um programa desenvolvido por Hanna (HANNA, 1989). Estes índices estatísticos são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental Americana (USEPA), bem como pela comunidade científica relacionada a área de dispersão de poluentes na atmosfera após o

Workshop “Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessments in Europa”, realizado na Bélgica no ano de 1994 (OLSEN, 1995).

As notações utilizadas para os índices  $o$  e  $p$  indicam, respectivamente, as quantidades observadas e previstas, sendo que  $C$  é a concentração de poluentes e  $\sigma$  é o desvio padrão. Os índices estatísticos aplicados neste trabalho são definidos da seguinte forma:

I. Erro quadrático médio normalizado: 
$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}$$

Informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas nos diferentes experimentos. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.

II. Coeficiente de correlação: 
$$COR = \frac{(\overline{C_o - C_o})(\overline{C_p - C_p})}{\sigma_o \sigma_p}$$

Descreve o grau de associação ou concordância entre duas variáveis. Para um bom desempenho do modelo o seu valor deve ser 1.

III. Fator de dois:  $FA2$

Fração de dados que estão compreendidos entre  $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$ . Quanto mais próximo a 1 este valor maior é a confiabilidade do modelo.

IV. Fração de inclinação: 
$$FB = \frac{\overline{C_o - C_p}}{0,5(\overline{C_o + C_p})}$$

Informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

V. Desvio fracional padrão: 
$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)}$$

O valor ótimo é zero.

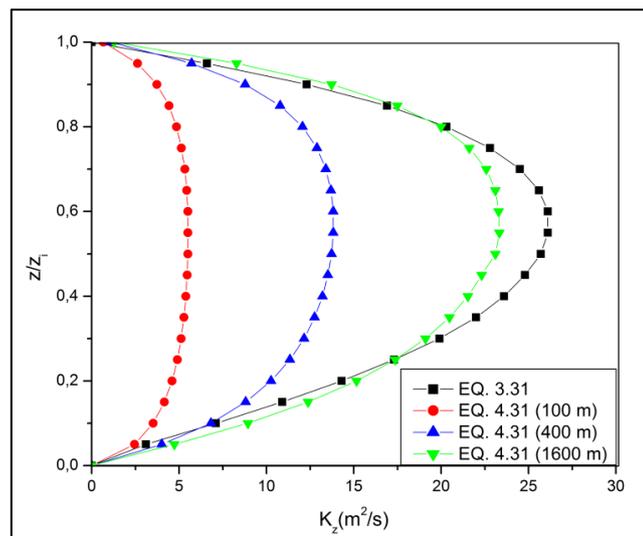
## 6 RESULTADOS

Neste capítulo apresentam-se os resultados das simulações do modelo representado pela equação (4.26) quando parametrizado com o perfil do vento da equação (3.32) e os coeficientes de difusão dados pelas equações (4.31), (4.52) e (3.31).

A discretização utilizada neste trabalho é de 0.5 m até a altura  $0.1z_i$  (significando que a CLP foi discretizada 10%), por se tratar de fonte baixa. Alturas acima deste valor foram discretizadas em regiões de 5 m. Esta é somente uma estratégia para redução do tempo computacional, sem alteração dos resultados numéricos.

Pode-se perceber pelo gráfico apresentado na figura 6.1 que à medida que a distância longitudinal aumenta, os coeficientes de difusão tendem a um limite assintótico. Nesta figura temos a comparação do coeficiente de difusão obtido segundo Degrazia et al. (1997), conforme a equação (3.31) (dependente somente de  $z$ ), e o coeficiente segundo Batchelor (1949) de acordo com a equação (4.31) (dependente de  $x$  e  $z$ ). Esta comparação foi feita para distâncias longitudinais de 100, 400 e 1600 m, utilizando os dados do experimento 1 de Prairie Grass.

Figura 6.1 – Comparação entre os coeficientes de difusão obtidos a partir da equação (3.31) e da equação (4.31), para as distâncias de 100, 400 e 1600 m



Fonte: Autoria própria

A seguir, na tabela 6.1, apresentam-se as concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo para diferentes distâncias da fonte (50, 100, 200, 400 e 800 m) utilizando a equação (4.31) (DEGRAZIA et al., 2001).

Tabela 6.1- Concentrações observadas integradas lateralmente a 1.5 m para o experimento de Prairie Grass,  $\overline{c_n^y}$  ( $\text{gm}^{-2}$ ). Na primeira linha a concentração observada em Prairie Grass, e na segunda linha, a concentração predita no modelo representado pela equação (4.26) utilizando a equação (4.31) para a determinação do coeficiente de difusão, sendo  $H_s=0.5$  m

<b>Exp.</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(50m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(100m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(200m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(400m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(800m)</b>
<b>1</b>	7.0	2.3	0.51	0.16	0.061
	7.2	3.64	1.68	0.8	0.41
<b>5</b>	3.3	1.8	0.81	0.29	0.092
	4.08	2.23	1.02	0.46	0.22
<b>7</b>	4.0	2.2	1.0	0.40	0.18
	3.81	1.54	0.7	0.33	0.17
<b>8</b>	5.1	2.6	1.1	0.39	0.14
	4.84	2.58	0.98	0.45	0.22
<b>9</b>	3.7	2.2	1.0	0.41	0.13
	4.1	2.29	1.06	0.48	0.23
<b>10</b>	4.5	1.8	0.71	0.20	0.032
	4.47	1.92	0.85	0.4	0.2
<b>15</b>	7.1	3.4	1.35	0.37	0.11
	8.16	4.59	2.33	1.29	0.75
<b>16</b>	5.0	1.8	0.48	0.10	0.017
	4.73	1.84	0.83	0.4	0.2
<b>19</b>	4.5	2.2	0.86	0.27	0.058
	5.15	2.79	1.27	0.57	0.27
<b>20</b>	3.4	1,8	0.85	0.34	0.13
	3.44	2.35	1.01	0.45	0.21
<b>25</b>	7.9	2.7	0.75	0.30	0.063
	6.64	3.06	1.38	0.65	0.32
<b>26</b>	3.9	2.2	1.04	0.39	0.127
	4.1	2.38	0.94	0.42	0.21
<b>27</b>	4.3	2.3	1.16	0.46	0.18
	4.36	2.56	1.01	0.45	1.01
<b>30</b>	4.2	2.3	1.11	0.40	0.10
	3.69	2.18	0.85	0.39	0.19
<b>43</b>	5.0	2.4	1.09	0.37	0.12
	4.88	2.24	1	0.47	0.23
<b>44</b>	4.5	2.3	1.09	0.43	0.14
	4.11	2.25	0.87	0.4	0.2
<b>49</b>	4.3	2.4	1.16	0.45	0.15
	4.64	2.49	1.14	0.52	0.25
<b>50</b>	4.2	2.3	0.91	0.39	0.11
	4.51	2.35	1.07	0.48	0.23
<b>51</b>	4.7	2.4	1.00	0.38	0.084
	3.84	2.21	0.84	0.4	0.2
<b>61</b>	3.5	2.1	1.14	0.53	0.20
	4.27	2.53	1.2	0.54	0.26

Fonte: Autoria própria

A tabela 6.2 apresenta os índices estatísticos dos resultados de concentrações integradas lateralmente utilizando-se a equação (4.31).

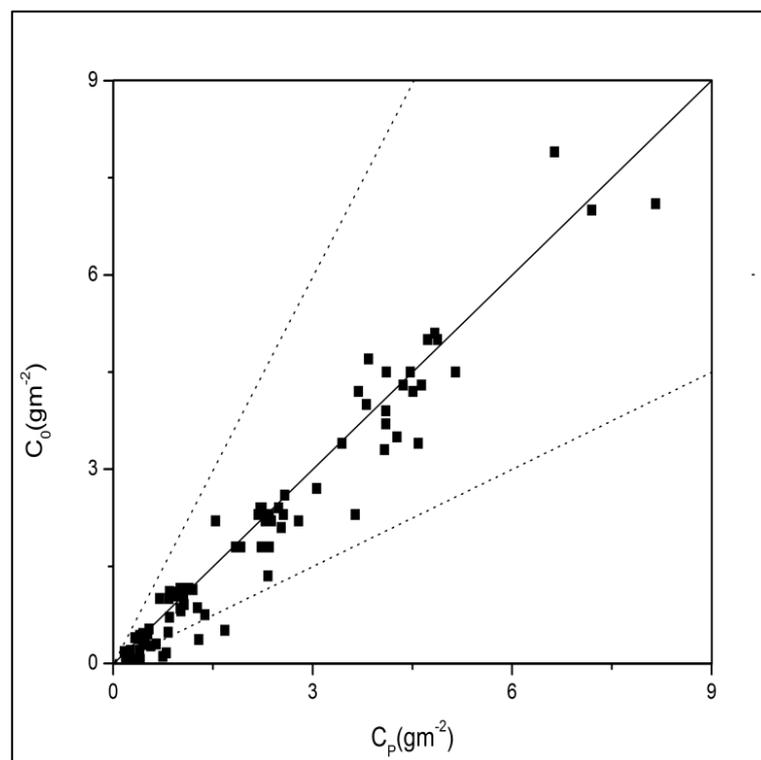
Tabela 6.2- Índices estatísticos para o experimento de Prairie Grass com a equação (4.31)

Nmse	Fa2	Cor	Fb	Fs
0.06	0.86	0.98	-0.08	0.01

Fonte: Autoria própria

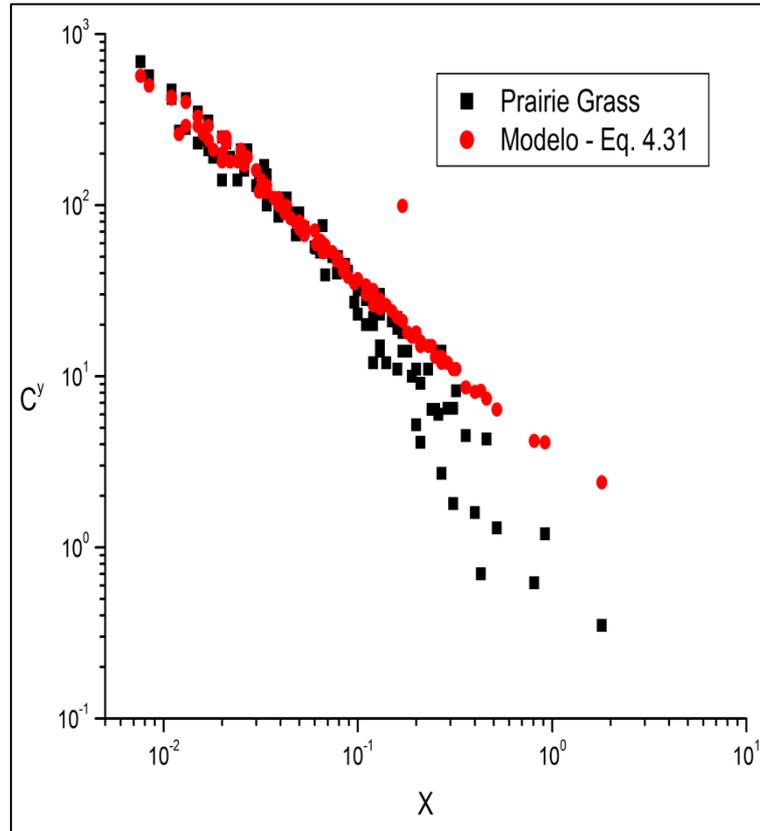
Considerando-se a equação (4.31), na figura 6.2 apresenta-se o seguinte gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente, e na figura 6.3 a concentração adimensional em função da posição adimensional para o experimento de Prairie Grass.

Figura 6.2 - Gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente para o experimento de Prairie Grass dos dados observados de concentração ( $C_0$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $C_p$ ) utilizando o coeficiente de difusão representado pela equação (4.31).



Fonte: Autoria própria

Figura 6.3 – Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional  $C^y \left( \frac{\overline{C^y U z_i}}{Q} \right)$  em função da posição adimensional  $X \left( \frac{x w_*}{U z_i} \right)$  utilizando o modelo representado pela equação (4.26) com a equação (4.31)



Fonte: Autoria própria

Observa-se da tabela 6.2, do gráfico de espalhamento representado pela figura 6.2 e do gráfico da concentração adimensional em função da distância adimensional, representada pela figura 6.3, uma excelente concordância entre os resultados do modelo representado pela equação (4.26) com coeficiente de difusão dado pela equação (4.31) e os dados experimentais.

A seguir, na tabela 6.3, apresentam-se as concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo para diferentes distâncias da fonte (50, 100, 200, 400 e 800 m) utilizando a equação (4.52).

Tabela 6.3- Concentrações observadas integradas lateralmente a 1.5 m para o experimento de Prairie Grass,  $\overline{c_n^y}$  ( $\text{gm}^{-2}$ ). Na primeira linha a concentração observada em Prairie Grass, e na segunda linha, a concentração predita no modelo representado pela equação (4.26) utilizando a equação (4.52) para a determinação do coeficiente de difusão, sendo  $H_S=0.5$  m

<b>Exp.</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(50m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(100m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(200m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(400m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(800m)</b>
<b>1</b>	7.0	2.3	0.51	0.16	0.061
	6.56	3.26	1.66	0.18	0.11
<b>5</b>	3.3	1.8	0.81	0.29	0.092
	3.21	1.56	0.76	0.38	0.19
<b>7</b>	4.0	2.2	1.0	0.40	0.18
	4.34	2.11	1.04	0.52	0.27
<b>8</b>	5.1	2.6	1.1	0.39	0.14
	4.51	2.19	1.07	0.53	0.27
<b>9</b>	3.7	2.2	1.0	0.41	0.13
	3.14	1.53	0.75	0.38	0.2
<b>10</b>	4.5	1.8	0.71	0.20	0.032
	4.4	2.14	1.05	0.53	0.04
<b>15</b>	7.1	3.4	1.35	0.37	0.11
	6.8	3.49	0.52	0.35	0.34
<b>16</b>	5.0	1.8	0.48	0.10	0.017
	5.74	2.83	1.42	0.72	0.04
<b>19</b>	4.5	2.2	0.86	0.27	0.058
	4.12	2.0	0.98	0.49	0.25
<b>20</b>	3.4	1.8	0.85	0.34	0.13
	2.68	1.3	0.63	0.31	0.16
<b>25</b>	7.9	2.7	0.75	0.30	0.063
	7.94	3.90	1.96	1.01	0.08
<b>26</b>	3.9	2.2	1.04	0.39	0.127
	3.54	1.71	0.84	0.41	0.21
<b>27</b>	4.3	2.3	1.16	0.46	0.18
	3.67	1.78	0.86	0.43	0.21
<b>30</b>	4.2	2.3	1.11	0.40	0.10
	3.34	1.62	0.78	0.38	0.19
<b>43</b>	5.0	2.4	1.09	0.37	0.12
	4.38	2.14	1.05	0.53	0.05
<b>44</b>	4.5	2.3	1.09	0.43	0.14
	3.92	1.9	0.92	0.45	0.23
<b>49</b>	4.3	2.4	1.16	0.45	0.15
	3.48	1.7	0.84	0.42	0.05
<b>50</b>	4.2	2.3	0.91	0.39	0.11
	3.68	1.78	0.87	0.44	0.22
<b>51</b>	4.7	2.4	1.00	0.38	0.084
	3.49	1.69	0.82	0.4	0.2
<b>61</b>	3.5	2.1	1.14	0.53	0.20
	3.12	1.52	0.75	0.38	0.05

Fonte: Autoria própria

A tabela 6.4 apresenta os índices estatísticos dos resultados de concentrações integradas lateralmente utilizando-se a equação (4.52).

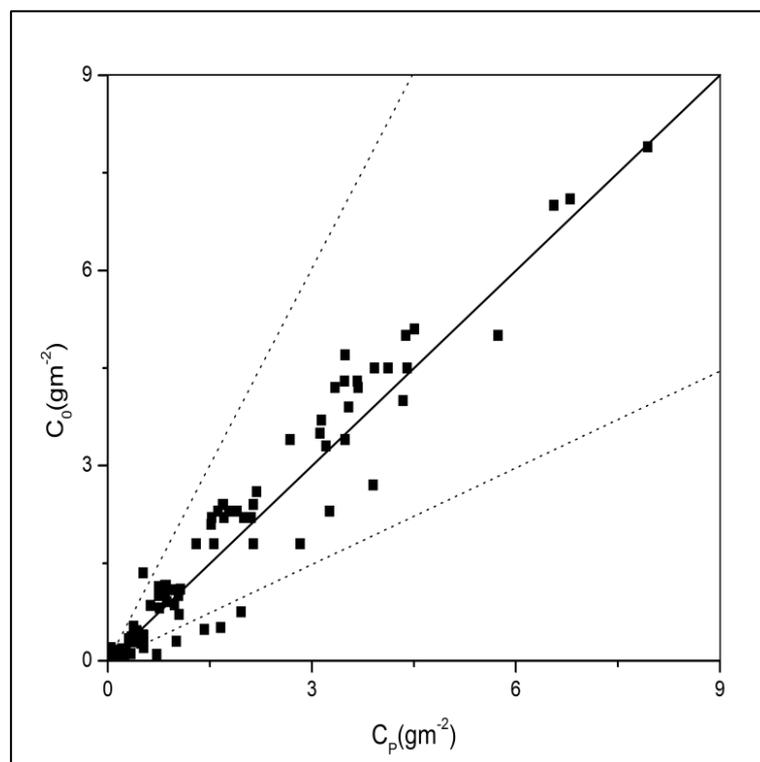
Tabela 6.4- Índices estatísticos para o experimento de Prairie Grass com a equação (4.52).

Nmse	Fa2	Cor	Fb	Fs
0.08	0.84	0.969	0.046	0.073

Fonte: Autoria própria

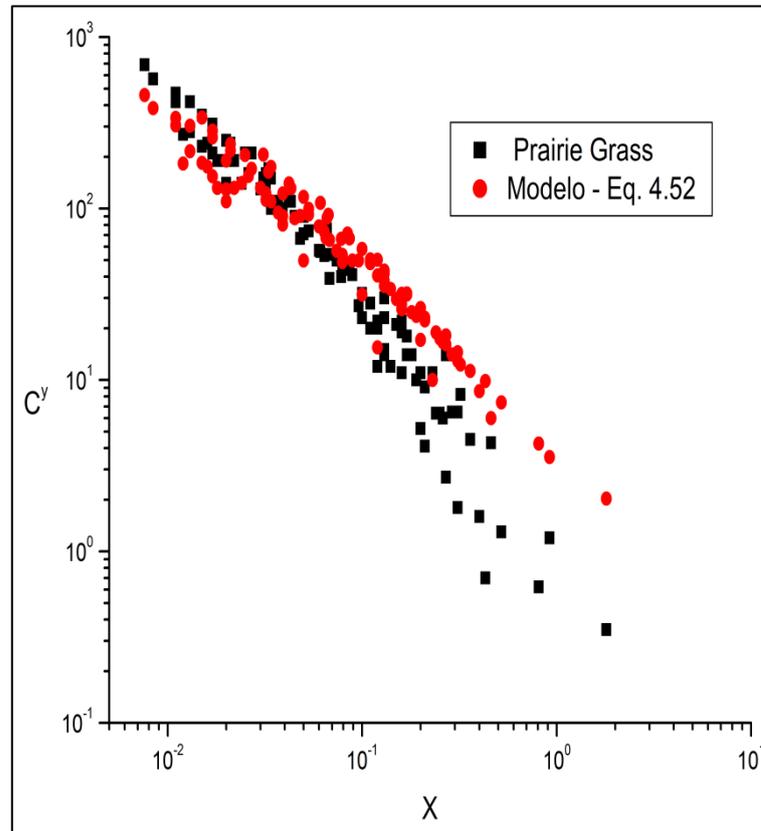
Considerando-se a equação (4.52), na figura 6.4 apresenta-se o seguinte gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente referentes à tabela 6.3 e na figura 6.5 a concentração adimensional em função da posição adimensional para o experimento de Prairie Grass.

Figura 6.4 - Gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente para o experimento de Prairie Grass dos dados observados de concentração ( $C_0$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $C_p$ ) utilizando o coeficiente de difusão representado pela equação (4.52).



Fonte: Autoria própria

Figura 6.5– Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional  $C^y \left( \frac{\bar{c}^y U z_i}{Q} \right)$  em função da posição adimensional  $X \left( \frac{x w_s}{U z_i} \right)$  utilizando o modelo representado pela equação (4.26) com a equação (4.52)



Fonte: Autoria própria

Observa-se da tabela 6.3, do gráfico de espalhamento representado pela figura 6.4e do gráfico da concentração adimensional em função da distância adimensional, representado pela figura 6.5 uma excelente concordância entre os resultados do modelo representado pela equação (4.26) com coeficiente de difusão dado pela equação (4.52) e os dados experimentais.

A seguir, na tabela 6.5 apresentam-se as concentrações observadas integradas lateralmente confrontadas com os resultados do modelo para diferentes distâncias da fonte (50, 100, 200, 400 e 800 m) utilizando a equação (3.31).

Tabela 6.5- Concentrações observadas integradas lateralmente a 1.5 m para o experimento de Prairie Grass,  $\overline{c_n^y}$  ( $\text{gm}^{-2}$ ). Na primeira linha a concentração observada em Prairie Grass, e na segunda linha, a concentração predita no modelo representado pela equação (4.26) utilizando a equação (3.31) para a determinação do coeficiente de difusão, com  $H_S=0.5$  m

<b>Exp.</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(50m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(100m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(200m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(400m)</b>	$\overline{c_n^y}$ <b>(800m)</b>
<b>1</b>	7.0	2.3	0.51	0.16	0.061
	4.91	3.09	1.69	0.85	0.42
<b>5</b>	3.3	1.8	0.81	0.29	0.092
	2.64	1.88	1.12	0.58	0.27
<b>7</b>	4.0	2.2	1.0	0.40	0.18
	3.42	2.16	1.16	0.55	0.24
<b>8</b>	5.1	2.6	1.1	0.39	0.14
	3.7	2.5	1.43	0.71	0.32
<b>9</b>	3.7	2.2	1.0	0.41	0.13
	2.62	1.88	1.13	0.59	0.28
<b>10</b>	4.5	1.8	0.71	0.20	0.032
	3.4	2.18	1.19	0.57	0.26
<b>15</b>	7.1	3.4	1.35	0.37	0.11
	4.91	3.17	1.89	1.12	0.64
<b>16</b>	5.0	1.8	0.48	0.10	0.017
	4.14	2.42	1.23	0.56	0.24
<b>19</b>	4.5	2.2	0.86	0.27	0.058
	3.36	2.39	1.43	0.74	0.35
<b>20</b>	3.4	1.8	0.85	0.34	0.13
	2.33	1.79	1.15	0.63	0.30
<b>25</b>	7.9	2.7	0.75	0.30	0.063
	5.62	3.38	1.77	0.83	0.37
<b>26</b>	3.9	2.2	1.04	0.39	0.127
	3.01	2.16	1.29	0.67	0.31
<b>27</b>	4.3	2.3	1.16	0.46	0.18
	3.1	2.22	1.33	0.68	0.32
<b>30</b>	4.2	2.3	1.11	0.40	0.10
	2.84	2.1	1.29	0.68	0.32
<b>43</b>	5.0	2.4	1.09	0.37	0.12
	3.5	2.33	1.32	0.66	0.30
<b>44</b>	4.5	2.3	1.09	0.43	0.14
	3.26	2.29	1.35	0.69	0.31
<b>49</b>	4.3	2.4	1.16	0.45	0.15
	2.98	2.1	1.24	0.64	0.30
<b>50</b>	4.2	2.3	0.91	0.39	0.11
	3.02	2.12	1.26	0.65	0.30
<b>51</b>	4.7	2.4	1.00	0.38	0.084
	3.11	2.3	1.4	0.73	0.34
<b>61</b>	3.5	2.1	1.14	0.53	0.20
	2.69	1.96	1.19	0.63	0.30

Fonte: Autoria própria

A tabela 6.6 apresenta os índices estatísticos dos resultados de concentrações integradas lateralmente utilizando-se a equação (3.31).

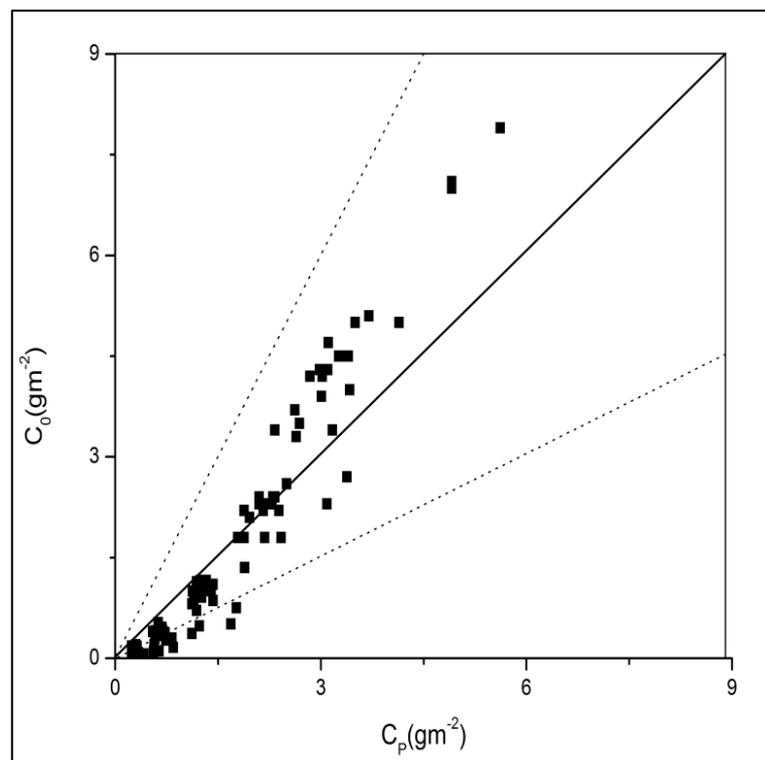
Tabela 6.6 - Índices estatísticos para o experimento de Prairie Grass com a equação (3.31)

Nmse	Fa2	Cor	Fb	Fs
0.17	0.74	0.97	0.04	0.38

Fonte: Autoria própria

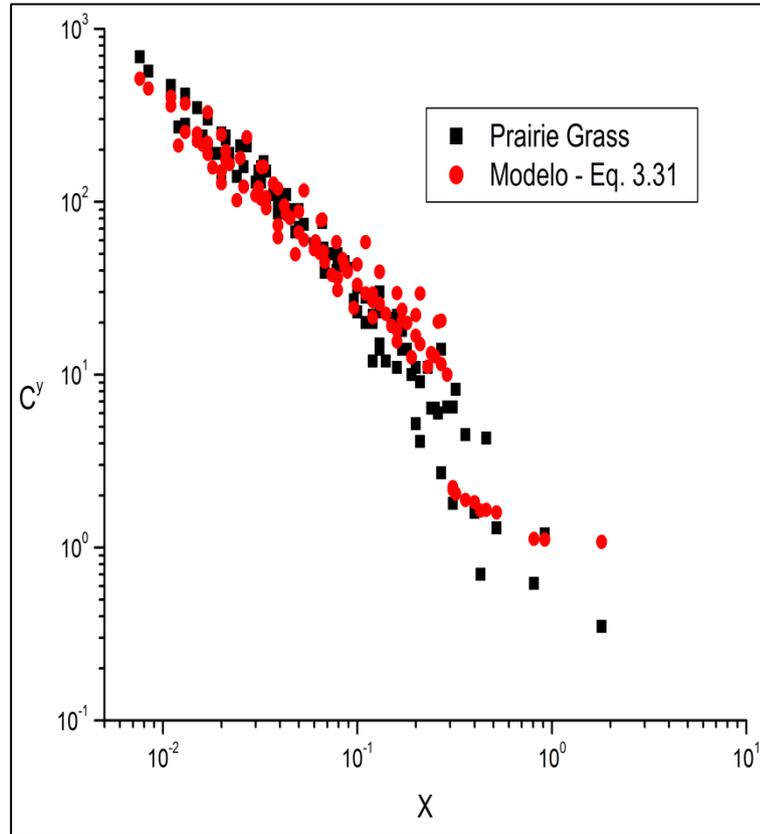
Considerando-se a equação (3.31), na figura 6.6 apresenta-se o seguinte gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente referentes à tabela 6.3 e na figura 6.7 a concentração adimensional em função da posição adimensional para o experimento de Prairie Grass.

Figura 6.6 - Gráfico de espalhamento de concentrações integradas lateralmente para o experimento de Prairie Grass dos dados observados de concentração ( $C_0$ ) em comparação com os resultados de concentração do modelo ( $C_p$ ) utilizando o coeficiente de difusão representado pela equação (3.31).



Fonte: Autoria própria

Figura 6.7– Gráfico para o experimento de Prairie Grass dos dados observacionais de concentração adimensional  $C^y \left( \frac{\overline{c^y U z_i}}{Q} \right)$  em função da posição adimensional  $X \left( \frac{x w_*}{U z_i} \right)$  utilizando o modelo representado pela equação (4.26) com a equação (3.31)



Fonte: Autoria própria

Observa-se da tabela 6.4, do gráfico de espalhamento representado pela figura 6.6e do gráfico da concentração adimensional em função da distância adimensional, representado pela figura 6.7 uma excelente concordância entre os resultados do modelo representado pela equação (4.26) com coeficiente de difusão dado pela equação (3.31) e os dados experimentais.

Após a análise dos resultados estatísticos mostradas nas tabelas 6.1, 6.3 e 6.5 juntamente com os gráficos representados nas figuras 6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6 e 6.7 respectivamente, para o modelo baseado nos coeficientes de difusão com dependência da distância longitudinal da fonte (equação 4.31); considerando os efeitos de convectivos e cisalhamento do vento para a camada superficial (equação 4.52) e considerando o coeficiente de difusão para grandes tempos de difusão (equação 3.31), todos estes aplicados na equação (4.26), conclui-se que:

- a) Todos os modelos apresentam resultados satisfatórios quanto ao grau de correlação;
- b) Os resultados dos modelos que utilizam as equações (4.31) e (4.52) são muito similares, com um desempenho mais satisfatório que o apresentado pelo modelo que utiliza a equação (3.31), o qual não considera o efeito da distância longitudinal da fonte para a variação do coeficiente de difusão.
- c) As figuras de espalhamento indicam que o modelo não reproduz satisfatoriamente as concentrações mais afastadas da fonte, com uma tendência dos resultados de concentração ser maiores que os observados. Isto é mais evidente para o coeficiente de difusão dependente somente de  $z$ . Isto pode ser explicado pelo processo de deposição de  $\text{SO}_2$  que ocorre neste experimento, mas que não é levado em consideração neste modelo.



## 7 CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentou-se uma solução analítica da equação da difusão-advecção bidimensional estacionária através do método da transformada integral, considerando o coeficiente de difusão dependente das variáveis  $x$  e  $z$ . O modelo é geral no sentido de que ele pode utilizar qualquer forma de parametrização da velocidade do vento  $U(z)$  como também qualquer coeficiente de difusão sendo uma função explícita das variáveis  $x$  e  $z$ . Observa-se que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação do modelo de dispersão de poluentes, exceto pela aproximação *stepwise* dos parâmetros e a inversão numérica da transformada de Laplace pelo esquema *Fixed Talbot*.

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 a 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, ameniza o erro relacionado à modelagem matemática, logo, os erros do modelo restringem-se ao erro da modelagem física.

Para avaliar o efeito de memória, o qual é consistente com a teoria de difusão estatística de Taylor, foi feita uma comparação entre duas parametrizações com dependência da distância da fonte (uma já existente na literatura e outra gerada por este trabalho) e uma dependente somente da altura vertical. Verificou-se que a inclusão da distância longitudinal no efeito de memória nos coeficientes de difusão melhoraram os resultados para o caso de uma fonte baixa em condições de forte convecção. Cabe ressaltar, que o novo coeficiente de difusão válido para a camada superficial, considerando o efeito térmico e mecânico na geração da turbulência, adota duas escalas distintas de tempo para avaliação: a primeira com  $z_i/w^*$  e a segunda com  $z/u^*$ . Os resultados foram muito satisfatórios usando escalas convectivas (altura da CLP e velocidade convectiva), porém os resultados não foram satisfatórios utilizando escalas superficiais (altura acima do solo e velocidade de atrito). Este resultado insatisfatório era esperado, tendo em vista que o experimento usado para confronto era fortemente convectivo.

Finalmente a análise dos resultados mostra que a metodologia de solução da equação de difusão-advecção proposta neste trabalho, juntamente com as novas parametrizações

obtidas, que retratam a física da turbulência não homogênea na vertical e dependente da distância da fonte, produziram uma boa concordância com as concentrações medidas experimentalmente e podem ser explorados em futuros trabalhos a serem desenvolvidos na área de poluição atmosférica.

## REFERÊNCIAS

- ABATE, J.; VALKÓ, P.P. Multi-precision Laplace transform inversion. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 60, p. 979–993, 2004.
- AHRENS, C.D. **Meteorology Today – An Introduction to Weather, Climate, and the Environment**. 6 ed. Brooks/Cole, 2000.
- ALVES, I.P. et al., Derivation of an eddy diffusivity coefficient depending on source distance for a shear dominated planetary boundary layer. **Physica A: Statistical Mechanics and Applications**, v.391, p.6577-6586, 2012.
- ANFOSSI, Domenico. **Dispersão Lagrangeana na camada limite planetária**. Tópicos em turbulência e modelagem de poluentes na camada limite planetária. Organizadores: D. M. Moreira, J.C. Carvalho e M. T. Vilhena, Porto Alegre: UFRGS, 2005.
- ARYA, S.P. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. **Journal of Applied Meteorology**, Boston, v.34, p.1112-1122, 1995.
- BARAD, M.L. Project Prairie Grass, a Field Program in Diffusion. **Geophysics Research Paper** n. 59, vols. 1-2 Geophysics Research Directorate, Air Force Cambridge Research Center, 1958.
- BATCHELOR, G.K. Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis. **Australian Journal of Sciences**, Victoria, v.2, p.437-450, 1949.
- BERKOWICZ, R.R., OLESEN, H.R. and TORP U. The Danish Gaussian air pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. **Air Pollution modeling and its application**. Edited by C. De Wispelaere, F.A. Schiermeier and N.V. Gillani, Plenum Publishing Corporation, p.453-480, 1986.
- BERLYAND, M.Y. **Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere**. Translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA, 1975.
- BROWN, M.J. ARYA, S.P., and SNYDER, W. Plume descriptors flow a non-Gaussian concentration model. **Atmospheric Environment**. Oxford v.31, p.183-189, 1997.

BULLIGON, Lidiane. **Solução da equação de advecção-difusão unidimensional transiente para o estudo da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária.** Dissertação de mestrado em Matemática Aplicada, UFRGS, 2004.

BURDEN, R.L. e FAIRES, J.D. **Análise Numérica.** São Paulo: Thomson, 2003.

BUSKE, Daniela et al. Simulação da dispersão de poluentes na CLE pelos métodos GILTT e ADMM. **Proceedings do IX Congresso Argentino de Meteorologia**, 2005.

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

\_\_\_\_\_.; MOREIRA, Davidson M., VILHENA, Marco T. Three-dimensional simulation of radioactive pollutant in the atmosphere from nuclear power plant. **In: 12th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, Belo Horizonte (MG). ENCIT2008, 2008.

\_\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T.; BODMANN, B.; SEGATTO, C. F.; TIRABASSI, Tiziano. A general advection-diffusion model for radioactive substance dispersion released from nuclear power plants. **In: International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering**, Rio de Janeiro (RJ). 2011a.

\_\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T.; MOREIRA, Davidson M.; TIRABASSI, Tiziano. An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Environmental Fluid Mechanics**, v.7, p.43-54, 2007b.

\_\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T., MOREIRA, Davidson M.; TIRABASSI, Tiziano. An Analytical Solution for the Transient Two-dimensional Advective-Diffusion Equation with Non-Fickian Closure in Cartesian Geometry by the General Integral Transform Technique. In: C. Constanda; M. E. Pèrez. **Integral Methods in Science and Engineering:Computational Methods.** Boston: Birkhäuser, v.2, p.33-40, 2010

\_\_\_\_\_.;VILHENA, Marco T.; MOREIRA, Davidson M.; TIRABASSI, Tirabasi. An analytical air pollution model for warm sources. **In: Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences**, Curitiba, PR. anais ENCIT, 2006.

\_\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T.; MOREIRA, Davidson M.; TIRABASSI, Tiziano. Simulation of pollutant dispersion for low Wind conditions in stable and convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.41, p.5496-5501, 2007a.

\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T.; SEGATTO, C. F.; QUADROS, Regis S. A General Analytical Solution of the Advection-Diffusion Equation for Fickian Closure. In: Christian Constanda; Paul Harris. **Integral Methods in Science and Engineering: Computational and Analytic Aspects**, v.1, p.1-10, 2011b.

\_\_\_\_.; WORTMANN, Sergio; VILHENA, Marco T. Solução Analítica para a Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária pelo Método GITT. **Revista Ciência e Natura**, p.83-86, 2003.

CARVALHO Jonas C. **Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva**. Dissertação de mestrado. Programa de pós-graduação em Meteorologia, Universidade de São Paulo, 1996.

CAUGHEY, S.J. Observed characteristics of the atmospheric boundary layer .In NIEUWSTADT, F.T.M., VAN DOP H., **Atmospheric turbulence and air pollution modeling**. Dordrecht: Reidel, 1982.

\_\_\_\_.; PALMER, S.G. Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, Oxford, v.105, p.811-827, 1979.

CHAMPAGNE, F.H. et al. Flux measurements, flux estimation techniques, and find-scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land. **Journal of Atmospheric Sciences**, Boston v.34, p.515-530, 1977.

CHRYSIKOPOULOS, C.V., HILDEMANN, L.M. and ROBERTS, P.V. A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model of emission from a ground-level area source. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.747-757, 1992.

CIRILO, M.C. and POLI, A.A. An inter comparison of semi empirical diffusion models under low wind speed, stable conditions. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.765-774, 1992.

COSTA, Camila P. **Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**. Dissertação de mestrado. Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, 2004.

\_\_\_\_.; MOREIRA, Davidson M.; VILHENA, Marco T. Contaminant dispersion simulation by solving the three-dimensional advection-diffusion equation combining the GILTT and ADMM methods. **Proceedings do 18<sup>th</sup> Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 2005.

\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T.; MOREIRA, Davidson M.; TIRABASSI, Tiziano. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.40, p.5659-5669, 2006.

COTTA, R.M.; MIKHAYLOV, M. **Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. Chinch-ester, England: John Wiley & Baffins Lane, 1997.

\_\_\_\_. **Integral transforms in computational heat and fluid flow**. Florida: CRC Press, Boca Raton, 1993.

CRANK, John. **The Mathematics of Diffusion**. Oxford: University Press, 414 pp, 1979.

DEARDORFF, J.M. Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.29, p.91-115, 1972.

DEGRAZIA, Gervásio A.; ANFOSSI, Domenico. Estimation of the Kolmogorov constant  $C_0$  from classical statistical diffusion theory. **Atmospheric Environment**, Oxford, v.32, p.3611-3614, 1998.

\_\_\_\_., CAMPOS VELHO, H.F.; CARVALHO, Jonas C. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contributions to Atmospheric Physic**, Wiesbaden, v.70, n.1, p.57-64, 1997.

\_\_\_\_.; MOREIRA, Davidson M.; VILHENA, Marco T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Journal Applied Meteorology**, Boston, v.40, p.257-264, 2001.

DEMUTH, C. A contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. **Atmospheric Environment**. v.12, p.1255-1258, 1978.

DRUILLET, A. et al. Experimental Studies of the Turbulence Structure Parameters of the Convective Boundary Layer. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, Boston, v.22, p.594-608, 1983.

FERREIRA NETO, Paulo V. **Desenvolvimento de um modelo de dispersão de poluentes para o estudo do impacto ambiental em fontes isoladas**. Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Ambiental, ULBRA, 2003.

GARRAT, John R. **The atmospheric boundary layer**. Cambridge: University Press, 1992.

HØSTRUP, Jørgen. A simple model for the adjustment of velocity spectra in unstable conditions downstream of an abrupt change in roughness and heat flux. **Boundary-Layer Meteorology**, Boston, v.21, p.341-356, 1981.

\_\_\_\_\_. Velocity spectra in the unstable boundary layer. **Journal of Atmospheric Sciences**, Boston, v.39, p. 2239-2248, 1982.

HANNA, S.R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1385-1395, 1989.

KAIMAL, J.C.; WINGAARD, J.C.; HAGEN D.A. Turbulence structure in the convective boundary layer. **Journal Atmospheric Sciences**, Boston, v.33, p.2152-2169, 1976.

KOCK, W. A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1729-1732, 1989.

KREIDER, D. et al. **Introdução à Análise Linear: Equações Diferenciais Lineares**. vol. 3. Rio de Janeiro: Ao livro técnico S/A, 1972.

KUMAR, Pramod; SHARAN, Maithili. An analytical model for dispersion of pollutants from a continuous source in the atmospheric boundary layer. **Proceedings Research Society Atmospheric**, v.466, p.383-406, 2010.

LAMB, R.G. A numerical simulation of the dispersion from an elevated point source in the convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1297-1304, 1978.

\_\_\_\_\_. **Diffusion in the convective boundary layer**. Atmospheric Turbulence and air Pollution Modeling, NIEUWSTAD F.T.M., and VAN DOP H. Eds., Reidel, p. 159-229, 1982.

LIN, J.S.; HILDEMANN, L.M. A generalised mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. **Atmospheric Environment**, v.31, p.59-71, 1997.

MACEDO, L. F. K.; RIBES, J. L. B.; WEYMAR, G. J.; SANTOS, R. L.; BUSKE, Daniela. Uma nova solução analítica para a equação de advecção-difusão-deposição. **Ciência e Natura**, v.1, p.49-52, 2009.

MONIN, A.S.; OBUKHOV, A.M. Basic layer of turbulent mix in the atmosphere near the ground. Tr., Akad. Nauk SSSR **Geofizical Institute**, n.24, p.16-187, 1954.

MOREIRA, Davidson. M. **Comparação entre um modelo gaussiano atualizado e a equação de difusão no cálculo da concentração convectiva: o caso de fontes pontuais contínuas elevadas**. Dissertação de mestrado, Mestrado em Física, UFSM, 1996.

\_\_\_\_. **Modelo euleriano semi-analítico de difusão turbulenta de contaminantes**. Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia, UFRGS, 2000.

\_\_\_\_.; TIRABASSI, Tiziano; CARVALHO, Jonas C. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. **Atmospheric Environment**, v.39, p.3643-3650, 2005b.

\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T.; TIRABASSI, Tiziano; BUSKE, Daniela; COSTA, Camila P. Comparison between analytical models to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Institute Journal Environment and Waste Management**. v.6, n.3, p.327-344, 2010.

\_\_\_\_.; VILHENA Marco T. Modelagem matemática da dispersão de poluentes atmosféricos: o modelo ADMM. **In: Tópicos em Turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**. Porto Alegre, RS: Ed. da UFRGS, 2005c. p.117-144.

\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T.; BUSKE, Daniela; TIRABASSI, Tiziano. The GILTT solution of the advection-diffusion equation for na inhomogeneous and nonstationary PBL. **Atmospheric Environment**, v.40, p.3186-3194, 2006.

\_\_\_\_.; VILHENA, Marco T. **Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications**. 1. ed. Boca Raton: CRC Press, 354pp, 2009.

\_\_\_\_. et al. A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant, **Ecological Modelling**, v. 189(3-4), p. 413-424, 2005a.

\_\_\_\_. et al. Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. **Water, Air and Soil Pollution**, n.177, p.411-439, 2006 b.

\_\_\_\_. et al. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant disperison in the atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, p.1-17, 2009.

MOURA A.; VILHENA, Marco T.; DEGRAZIA, Gervásio A. Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável. **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 1995.

MR. KILBERT; TARBELL E.N. **A river scene: Monongahela River**, Pittsburgh, Pennsylvania. 1 fotografia, 1857.

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

\_\_\_.; DE 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**, v.15, p.845-851, 1981.

\_\_\_.; VAN ULDEN, A.P. A numerical study on the vertical dispersion of the passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2119-2124, 1978.

OLESEN, H.R. Datasets and protocol for model validation. **International Journal of Environment and Pollution**, v.5, p.693-701, 1995.

PANOFSKY, Hans A. and DUTTON, John A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1984, 397 pp.

PAULSON, C.A. The mathematical representation of wind and temperature profiles atmospheric surface. **Journal of Applied Meteorology**, v.9, p.857-861, 1975.

PIRES, C.S. **Um estudo analítico de dispersão de contaminantes abandonados por fontes aéreas em uma camada limite convectiva**. Dissertação de mestrado, Curso de Pós Graduação em Sensoriamento Remoto, Centro Estadual em Pesquisas em Sensoriamento Remoto e Meteorologia, UFRGS, 1996.

RIBEIRO, M. et al. Estudo da dispersão de poluentes na atmosfera via transformação integral. **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, n.1, p.2969-2975, 2000.

ROBERTS, O.F.T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. **Proceedings of Royal Meteorological Society**, , London, v.104, p.640-654, 1923.

ROUNDS, W. Solutions of the two-dimensional diffusion equation. **Transaction American Geophysical Union**, Washington, D.C., v.36, p.395-405, 1955.

SAGENDORF, J.F.; DICKSON, C.R. Diffusion under low wind-speed, inversion conditions, **Technical Memorandum ERL-52, U. S. National Oceanics and Atmospheric Administration**, 1974.

SCHUCH, Daniel; BUSKE, Daniela; QUADROS, Régis S. Simulação da dispersão de poluentes na camada limite atmosférica considerando a deposição seca de poluentes. **In: IV Encontro Sul-Brasileiro de Meteorologia**, Pelotas (RS). IV ESBMET, 2011

SCRIVEN, R.A. and FISHER, B.A. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout-II. The effect of turbulent diffusion, **Atmospheric Environment**, Oxford, v.9, p.59-69, 1975.

SHARAN, Maithili et al. A mathematical model for the atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear function of downwind distance. **Atmospheric Environment**, v.30, p.1137-1145, 1996.

\_\_\_.; KUMAR, Pramod. An analytical model for crosswind integrated concentrations released from a continuous source in a finite atmospheric boundary layer, **Atmospheric Environment**, v.43, p.2268-2277, 2009

\_\_\_.; MODANI, M. A two-dimensional analytical model for the dispersion of air pollutants in the atmosphere with a capping inversion. **Atmospheric Environment**, v.40, p.3469-3489, 2006.

\_\_\_.; YADAV, A.K. Simulation of experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model. **Atmospheric Environment**, v.32, p.3481-3492, 1998.

SMITH F.B. The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere, **Journal Fluid Mechanics**, v.2, p.49-76, 1957.

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo euleriano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos. **Revista Ciência e Natura**, p.103-106, 2003.

STULL, Roland. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht, Holanda: Kluwer Academic Publishers, 1988.

TAYLOR, G.I. Diffusion by continuous movements. **Proceedings of the London Mathematical Society**, New York, v.20, p.196-212, 1921.

TIRABASSI, Tiziano; RIZZA, Umberto. A practical model for the dispersion of skewed puffs, **Journal of Applied Meteorology**, v.34, p.989-993, 1995.

\_\_\_\_.; BUSKE, Daniela; MOREIRA, Davidson M.; VILHENA, Marco T. A two-dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v.47, p.2096-2104, 2008.

\_\_\_\_.; TAGLIAZUCCA, M.; ZANNETTI, P. A non-Gaussian plume dispersion model: description and evolution against tracer measurements. **JAPCA**, v.36, p.592-596, 1986

\_\_\_\_.; TIESI, A.; BUSKE, Daniela; VILHENA, Marco T.; MOREIRA, Davidson M. Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection-diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.43, p.2221-2227, 2009.

\_\_\_\_.; TIESI, A.; VILHENA, M. T.; BODMANN, B.; BUSKE, Daniela. An analytical simple formula for the ground level concentration from a point source. **Atmospheric Environment**, v.2, p.21-35, 2011.

VAN ULDEN, A.P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near the ground. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2125-2129, 1978.

VELLOSO, M. et al. Desenvolvimento de um modelo computacional para estudo do efeito do mecanismo de deposição sobre a dispersão de poluentes atmosféricos. **Revista Ciência e Natura**, p.25-28, 2003.

VILHENA, Marco T.; BUSKE, Daniela; DEGRAZIA, Gervásio A. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v.391, p.2576-2584, 2012.

\_\_\_\_ et al. An analytical air pollution model: Development and evolution. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315-320, 1998.

\_\_\_\_ et al. A semi-analytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Atmospheric Research**, v.90, p 63-69, 2008.

WEIL, J.C.; BROWER, R.P. An update Gaussian plume model for tall stacks. **JAPCA**. Pittsburg, v.34, p.818-827, 1984.

WILLIS, G.E.; DEARDORFF, J.W. A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer, **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.102, p.427-445, 1976.

WORTMANN, Sergio et al. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, p.2171–2178, 2005.

\_\_\_\_. ; MOURA, A.; VILHENA, Marco T. Solução analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável. **Proceedings of the Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences**, 2000.

YEH, G.T.; HUANG, C.H. Three-dimensional air pollutant modeling in the lower atmosphere, **Boundary-Layer Meteorology**, v.9, p.381-390, 1975.