UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática

Dissertação

Simulação transiente unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera considerando o fechamento não local da turbulência

Lucas Tadeo

Pelotas, 2022

Lucas Tadeo

Simulação transiente unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera considerando o fechamento não local da turbulência

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática.

Orientador: Dra. Daniela Buske
Coorientador: Dr. Viliam Cardoso da Silveira

Pelotas, 2022

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

T121s Tadeo, Lucas

Simulação transiente unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera considerando o fechamento não local da turbulência / Lucas Tadeo ; Daniela Buske, orientadora ; Viliam da Silveira Cardoso, coorientador. — Pelotas, 2022.

51 f.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2022.

1. Equação de advecção-difusão. 2. Método GILTT. 3. Fechamento não local. 4. Dispersão de poluentes. I. Buske, Daniela, orient. II. Cardoso, Viliam da Silveira, coorient. III. Título.

CDD : 614.71

Elaborada por Ubirajara Buddin Cruz CRB: 10/901

Lucas Tadeo

Simulação transiente unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera considerando o fechamento não local da turbulência

Dissertação apresentada, como requisito, para obtenção do grau de Mestre em Modelagem Matemática, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

Data da Dissertação: 13 de dezembro de 2021

Banca Examinadora:

Dra. Daniela Buske (Orientadora)
UFPel

Dr. Viliam Cardoso da Silveira (Coorientador)
UFPel

Dr. Jonas da Costa Carvalho
UFPel

Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart
FURG

Dr. Guilherme Jahnecke Weymar
UFPel

RESUMO

TADEO, Lucas. **Simulação transiente unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera considerando o fechamento não local da turbulência**. Orientador: Daniela Buske. 2022. 51 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2022.

O objetivo desse trabalho é avaliar a dispersão de poluentes na atmosfera considerando a equação da difusão, o termo de fechamento não local da turbulência e a componente w do vento médio. Para resolver a equação de advecção-difusão será utilizada a técnica da transformada integral generalizada com solução analítica do problema transformado por transformada de Laplace (GILTT). Os resultados estão de acordo com a literatura e a concentração apresenta um pico no tempo inicial e depois diminui e fica homogênea. A inclusão do termo w provoca um comportamento ascendente ou descendente da pluma de poluentes, dependendo se for positivo ou negativo. O presente modelo apresenta o comportamento esperado da pluma de poluentes e pode ser usado para aplicações regulatórias da qualidade do ar.

Palavras-chave: Equação de advecção-difusão. Método GILTT. Fechamento não local. Dispersão de poluentes.

ABSTRACT

TADEO, Lucas. **One-dimensional transient simulation of the dispersion of pollutants in the atmosphere considering the non-local closing of turbulence**. Advisor: Daniela Buske. 2022. 51 f. Dissertation (Masters in Modelagem Matemática) – Instituto de Física e Matemática, Federal University of Pelotas, Pelotas, 2022.

The objective of this work is to evaluate the dispersion of pollutants in the atmosphere considering the diffusion equation, the non-local closing term of the turbulence and the w component of the average wind. To solve the advection-diffusion equation, the generalized integral transform technique with analytical solution of the problem transformed by Laplace transform (GILTT) will be used. The results are in accordance with the literature and the concentration shows a peaks in the initial time and then decreases and becomes homogeneous. The inclusion of the term w causes an upward or downward behavior of the pollutant plume, depending on whether it is positive or negative. The present model presents the expected behavior of the pollutant plume and can be used for regulatory applications of air quality.

Keywords: Advection-diffusion equation. GILTT method. Non-local closure. Pollutant dispersion.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

CLP	Camada Limite Planetária
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
ADMM	*Advection Diffusion Multilayer Model*
GITT	*Generalized Integral transform Technique*
GIADMT	*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*
GILTT	*Generalized Integral Laplace transform Technique*
LES	*Large Eddy Simulation*
$\overline{c}$	concentração média de um contaminante passivo
$\overline{w'c'}$	fluxo turbulento do contaminante na direção vertical
S_k	assimetria (*skewness*)
σ_w	desvio padrão da velocidade turbulenta vertical
T_{lw}	escala de tempo lagrangeana
τ	tempo de relaxação
β	termos adicionais no contragradiente
K_z	coeficiente de difusão na direção z
Ψ	função estabilidade
λ_n	autovalor do problema de Sturm-Liouville
$Y(t)$	vetor de incógnitas do problema transformado de segunda ordem
F	matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $F = C^{-1}B$
G	matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $G = C^{-1}A$
$Z(t)$	vetor de incógnitas do problema transformado de primeira ordem
I	matriz identidade
H	matriz bloco do problema transformado de primeira ordem
X	matriz dos autovetores do problema transformado de primeira ordem

d_n	autovalores da matriz H
$G(t)$	matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem após inversão de Laplace analítica em t
ξ	vetor representado por $X^{-1}Z(0)$
x	distância longitudinal da fonte
z	altura acima da superfície
ψ	taxa de dissipação molecular da velocidade turbulenta
$(f_m^*)_w$	frequência normalizada do pico espectral
$(\lambda_m)_w$	comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical turbulento
w_*	escala de velocidade convectiva
h	altura da camada limite convectiva
H_s	altura da fonte
Q	taxa de emissão do poluente
w	componente vertical do vento
α_1	constante que depende da evolução da CLE
α_2	constante que depende da evolução da CLE
γ	representa o termo de contragradiente

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica é um fenômeno recorrente no nosso dia a dia, seja ela ocasionada por efeitos naturais (por exemplo, emissão de gás metano) ou antropogênicos (por exemplo, pela queima de combustíveis fósseis). Os poluentes emitidos em um determinado local podem causar diversos problemas ao meio ambiente e atingir regiões distantes de onde foram emitidos, por isso a importância de estudar o comportamento dos poluentes nas mais diversas situações que podem ocorrer na atmosfera. A atividade antropogênica traz inúmeros problemas com a emissão de gases, gerando um desequilíbrio ecológico. Os gases e poeiras esquecidos na atmosfera provocam problemas nas proximidades das fontes, reduzindo a qualidade do ar em regiões urbanas, causam chuva ácida a médias e longas distâncias e buracos na camada de ozônio em escala global.

Os movimentos atmosféricos são classificados de acordo com suas dimensões horizontais em três amplas categorias: macroescala (escala horizontal da ordem de 1000 km), mesoescala (escala horizontal da ordem de 100 km) e microescala (escala horizontal da ordem de 10 km ou menos) (ARYA, 1999).

Encontram-se vários trabalhos disponíveis na literatura que focam no estudo da dinâmica da camada limite planetária (CLP), em que são considerados diversos modelos para fechamento das equações dos fluxos turbulentos, por exemplo: modelos de primeira ordem ou teoria K, segunda ordem ou superior.

A hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) é uma das maneiras mais utilizadas para resolver o problema de fechamento da equação advecção-difusão que assume que o fluxo turbulento da concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. Ao considerar o fechamento da turbulência não-Fickiano pode ser levada em conta a assimetria no processo da dispersão de poluentes atmosféricos. Assim pode ser utilizada uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio fazendo com que apareça um termo adicional na equação que é associado ao termo de contragradiente (WYNGAARD; WEIL, 1991)(VAN DOP; VERVER, 2001).

Existem dois modelos matemáticos para simular numericamente a concentração de poluentes na atmosfera: Lagrangiano e Euleriano. O modelo Lagrangiano segue a velocidade instantânea do fluido, e o Euleriano é fixo em relação à terra (ANFOSSI, 2005). O esquema principal dos modelos Eulerianos de dispersão é a solução da equação de advecção-difusão, que é expressa através da parametrização dos fluxos turbulentos. Sob condições específicas consegue-se expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão de pluma.

Diversos estudos já foram desenvolvidos para estudar a dispersão de poluentes na atmosfera considerando a equação da advecção-difusão em diversas condições de estabilidade atmosférica e utilizando a técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). A inovação desse trabalho é considerar a equação da difusão na sua forma mais simples, uma vez que o problema unidimensional com fechamento não local da turbulência ainda não foi resolvido pela técnica GILTT.

Assim, neste trabalho será avaliada a dispersão de poluentes na atmosfera, considerando a equação da difusão transiente unidimensional, o termo de fechamento não local da turbulência e a componente w da velocidade vertical. Essa equação será resolvida pela técnica GILTT. Para validar a metodologia serão consideradas condições atmosféricas instáveis para avaliar o termo de variação não local da turbulência.

A dissertação está estruturada em 6 capítulos. No capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica sobre o tema. O modelo matemático é apresentado no capítulo 3. Já no capítulo 4, apresentam-se as parametrizações da turbulência e os experimentos utilizados no trabalho. Finalmente no capítulo 5 encontram-se os resultados numéricos obtidos e no capítulo 6 a conclusão.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo será apresentada uma revisão sobre os temas desta dissertação. Inicialmente serão apresentadas as definições sobre a Camada Limite Planetária e a evolução temporal desta. Ainda, para motivar a realização deste trabalho, é apresentada uma revisão bibliográfica sobre as soluções analíticas da equação de advecção-difusao aplicadas à dispersão de poluentes encontradas na literatura. Finalmente apresenta-se a revisão sobre os trabalhos que utilizaram o fechamento não local da turbulência na solução da equação de advecção-difusão.

2.1 Camada Limite Planetária

A superfície da terra é um limite de domínio da atmosfera. Processos de transporte neste domínio modificam uma região da atmosfera que se estende de 100 a 3000 m, criando a CLP. O restante da troposfera é denominado atmosfera livre.

A troposfera se estende da superfície até aproximadamente a altitude de 11 km, mas somente os primeiros quilômetros são influenciados pela superfície da terra. Pode-se definir a camada limite como aquela parte da atmosfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra e responde pelos forçantes da superfície com uma escala de tempo na ordem de 1 hora ou menos (STULL, 1988). Entre estes forçantes estão incluídos: arrasto friccional, evaporação e transpiração, transferência de calor, emissão de poluentes e modificações do escoamento induzidas pelo terreno. A espessura da CLP sofre mudanças no tempo e no espaço, variando alguns metros a poucos quilômetros. A CLP pode ainda ser definida como a camada de ar acima da superfície da Terra, na qual os efeitos da superfície são sentidos diretamente numa escala de tempo menor do que um dia, e na qual fluxos de momentum, calor e massa são transferidos pelos movimentos turbulentos numa escala da ordem da profundidade da CLP ou menor.

A CLP se subdivide de acordo com os processos físicos envolvidos (turbulência térmica durante o dia e turbulência mecânica durante a noite), em camada limite superficial, camada de mistura, camada limite estável noturna e camada residual.

O escoamento de ar na CLP pode ser dividido em três categorias: vento médio, turbulência e ondas. Cada um pode existir separadamente ou na presença de qualquer um dos outros. Todos podem existir na CLP, onde o transporte de quantidades tais como umidade, calor, *momentum* e poluentes é dominada pelo vento médio na horizontal e pela turbulência na vertical.

2.1.1 Evolução temporal da CLP

2.1.1.1 Camada superficial

É definida como aquela região acima da superfície da terra, na qual a variação vertical dos fluxos turbulentos de calor e *momentum* é negligenciada. A profundidade da camada superficial varia de 10 m até 100 m. O perfil de temperatura na camada superficial é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura, durante o dia, e por um aumento da temperatura com a altura a noite;

2.1.1.2 Camada de mistura

É a região central da camada de limite convectiva (CLC). O perfis verticais de velocidade do vento e temperatura são aproximadamente constantes, uma consequência da forte mistura produzida pela convecção. A altura da camada de mistura pode alcançar de 1000 a 3000 m.

Quando a camada de mistura está formada, o processo de dispersão na CLP ocorre principalmente devido às circulações convectivas que formam regiões de fluxos de ar ascendente (áreas de *updrafts*) e regiões de fluxos de ar descendente (área de *downdrafts*). Enquanto as áreas de *updrafts* apresentam menor extensão espacial e fluxo de ar mais intenso, as áreas de *downdrafts* apresentam maior extensão espacial e fluxo de ar menos intenso. Esta configuração gera uma distribuição assimétrica positiva para a flutuação de velocidade vertical, determinando uma condição de turbulência não-Gaussiana. Neste caso, os poluentes emitidos na camada de mistura encontrarão as áreas de *updrafts* e *downdrafts* e exibirão uma característica de *looping*. Devido a forte mistura presente na CLC, o resultado final consiste em uma distribuição uniforme dos poluentes, independente da altura da emissão.

2.1.1.3 Camada Estável

É comum sobre o continente durante a noite e a turbulência é gerada pelo cisalhamento do vento. Sob estas condições a altura da camada limite estável (CLE) pode variar a partir de poucas dezenas de metros, em baixas velocidades do vento, até várias centenas de metros, em altas velocidades do vento;

2.1.1.4 Camada de Entranhamento

Se localiza no topo da CLC. É a região que realiza a interface entre a camada de mistura e a atmosfera livre e é caracterizada por uma inversão de temperatura. Constitui uma espécie de cobertura, limitando os movimentos verticais que ocorrem na camada de mistura;

2.1.1.5 Camada Residual

Pouco antes do por do sol as circulações convectivas cessam, permitindo o decaimento da turbulência na camada de mistura. A camada resultante é chamada de camada residual, pois suas características são as mesmas da camada de mistura existente durante o dia.

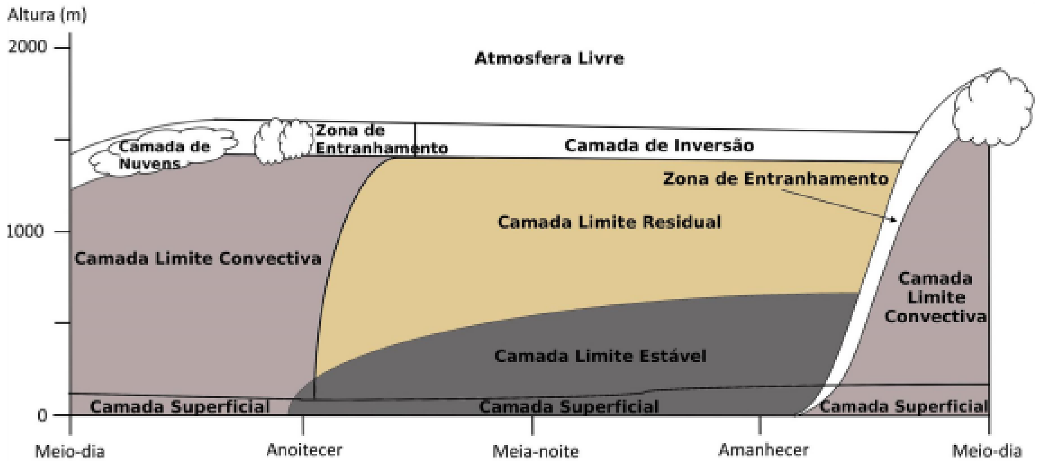

Figura 1 – Evolução temporal da CLP. Adaptada de (STULL, 1988).

A assimetria ou *skewness* é o grau de desvio ou afastamento da simetria de uma distribuição. Se a curva de frequência de uma distribuição tem uma "cauda" mais longa à direita da ordenada máxima do que a esquerda, diz-se que a distribuição é desviada para a direita, ou que ela tem assimetria positiva. Se é o inverso que ocorre, diz-se que ela é desviada para a esquerda, ou que tem assimetria negativa. Além disso, esse tipo de curva é chamado unimodal por possuir um único máximo. O acréscimo da assimetria em modelos de difusão leva em conta o efeito do transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes, considerando a estrutura da turbulência na CLP.

2.2 Solução analítica da equação de Advecção-Difusão

Um esforço contínuo e progressivo tem sido feito ao longo dos anos para se obter soluções analíticas para a equação de advecção-difusão. A solução dessa equação, oriunda de abordagens analíticas, é fundamental para entender e descrever os fenômenos físicos envolvidos na dispersão de poluentes, visto que considera explicitamente todos os parâmetros envolvidos no problema. Assim sendo, a influência dentro dessa solução, de cada um dos parâmetros pode ser investigada (BUSKE et al., 2012b).

Fick obteve a primeira solução da equação de advecção-difusão na metade do século XIX, a conhecida solução Gaussiana. O modelo derivado de tal solução continua sendo bastante utilizado em estudos de poluição atmosférica. Nessa solução o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura e possuindo as seguintes condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0 \quad e \quad z \rightarrow \infty \tag{1}$$

e correspondem ao fluxo nulo de poluentes na parte inferior e superior da CLP.

(ROBERTS, 1923) apresentou uma solução bidimensional para a equação de advecção-difusão, considerando a fonte ao nível do solo, na qual a velocidade do vento U e o coeficiente difusivo K_z seguem uma lei de potência em função da altura z. Isto é:

$$U = U_1 \left(\frac{z}{z_1}\right)^m \quad ; \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1}\right)^n \tag{2}$$

onde z_1 é altura na qual os parâmetros U e K_z são avaliados com m e n variando entre 0 e 1.

(ROUNDS, 1955) obteve uma solução bidimensional válida para fontes elevadas com o perfil de velocidade média do vento apresentada acima, mas considerou os perfis de K_z lineares.

(SMITH, 1957) apresentou a solução no caso U constante, mas com K_z da seguinte forma:

$$K_z = K_0 Z^{\alpha} \left(z_1 - z\right)^{\beta} \tag{3}$$

(SCRIVEN R.AND FISHER, 1975) propuseram uma solução para transporte de poluentes à longas distâncias, largamente utilizada no Reino Unido. Nessa proposta, o vento médio é constante e o coeficiente de difusão foi determinado por:

$$K_z = z \quad para \quad 0 \leq z \leq z_t \quad e \quad K_z = K_z\left(z_t\right) \quad para \quad z_t \leq z \leq z_i \tag{4}$$

onde z_t é uma altura predeterminada.

(YEH; HUANG, 1975; BERLYAND, 1975) publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com U e K_z, seguindo perfis de potência. (DEMUTH, 1978) avançou na solução com as mesmas condições, mas para uma camada verticalmente limitada.

(ULDEN, 1978) aplicando a teoria de similaridade de Monin-Obukhov, derivou a solução para difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, somente com a hipótese que U e K_z seguem perfis de potência. Seus resultados são similares aos de Roberts, mas ele obteve um modelo para fontes não superficiais, mas aplicável para fontes dentro da camada superficial. Um modelo que utiliza esta solução é o SPM (TIRABASSI; RIZZA, 1995).

(NIEUWSTADT, 1980) apresentou uma solução dependente do tempo e o coeficiente de difusão dado por:

$$K_z = G u_* z \left(1 - \frac{z}{z_1}\right) \tag{5}$$

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

(NIEUWSTADT; HAAN, 1981) estenderam esta solução para o caso de crescimento da altura da camada limite.

(KOCK, 1989) desenvolveu uma solução analítica bidimensional para o nível do solo com perfis de potência da velocidade do vento e coeficiente de difusão incluindo os efeitos de absorção ao nível do solo.

(CHRYSIKOPOULOS; HILDEMANN; ROBERTS, 1992) apresentaram uma solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo de uma fonte área contínua ao nível do solo para os mesmos perfis de U e K_z dados pela equação (2), porém incluindo deposição como um mecanismo de remoção.

(MOURA, 1995) e (PIRES, 1996) obtiveram a solução analítica da equação de difusão unidimensional dependente do tempo, sem vento, utilizando o coeficiente de difusão K_z de Degrazia et al. Para o caso estável e convectivo, respectivamente.

(LIN; HILDEMANN, 1997) estenderam as soluções de (YEH; HUANG, 1975) e (BERLYAND, 1975) para o caso de deposição para o solo.

2.3 Soluções da equação de advecção-difusão por transformadas integrais

Todas as soluções citadas anteriormente são puramente analíticas. A equação de advecção-difusão pode ser resolvida numericamente (como em (NIEUWSTADT; VAN ULDEN, 1978);(LAMB, 1978);(CARVALHO, 1996)) ou por métodos analíticos e por métodos semi-analíticos. Nos métodos analíticos não há nenhuma aproximação ao longo da derivação de uma determinada solução, já os métodos semi-analíticos resolvem uma parte do problema analiticamente e outra numericamente.

Nas últimas décadas surgiram modelos analíticos/semi-analíticos não Gaussianos e com coeficientes de difusão arbitrários. Dentre estes, destacam-se principalmente: ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Model*, Modelo de Multicamada Advectivo Difusivo), GITT (*Generalized Integral Transform Technique*, Técnica da Transformada Integral Generalizada), GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer*

Technique) e o método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) e suas variações.

O método ADMM vem sendo utilizado na resolução da equação de advecção-difusão para simular a dispersão de poluentes na atmosfera desde a década de 90 ((MOURA; VILHENA; DEGRAZIA, 1995); (VILHENA et al., 1998); (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001); (FERREIRA NETO, 2003); (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2004); (MOREIRA et al., 2004); (MOREIRA; CARVALHO; TIRABASSI, 2005); (MOREIRA; FERREIRA NETO; CARVALHO, 2005); (MOREIRA et al., 2005); (MOREIRA et al., 2006); (BULIGON; MOREIRA; VILHENA, 2006); (RUI, 2016)). No método ADMM a equação de advecção-difusão é resolvida de forma semi-analítica. O método consiste na divisão da CLP em diferentes camadas ou subcamadas. A solução da equação, em cada uma das camadas, é obtida pela técnica da transformada de Laplace com inversão numérica, considerando ventos e coeficientes de difusão turbulenta constantes com a altura da camada. A divisão em subcamadas permite que um valor médio da velocidade do vento e do coeficiente de difusão turbulenta seja utilizado em cada uma delas (MOREIRA et al., 2006). Dessa forma, o problema original com coeficientes variáveis passa a ter coeficientes constantes em cada camada, de acordo com a continuidade de concentração e o fluxo de contaminante nas interfaces. Esse método é amplamente utilizado na dispersão de poluentes na atmosfera.

O método GITT é analítico-numérico (COTTA, 1993), (COTTA; MIKHAYLOV, 1997) derivado da transformação integral clássica (MIKHAYLOV; OZISIK, 1984) e pode ser descrito como uma transformação integral associada a uma expansão em série, usado para resolver equações diferenciais parciais. Suas principais etapas incluem a elaboração do problema auxiliar de Sturm-Liouville associado ao problema original, a determinação de uma série através da técnica de transformada integral usando como base as autofunções que constituem a solução do problema de Sturm-Liouville e a substituição dessa série no problema original. Esse procedimento resulta em uma equação diferencial ordinária, que é resolvida numericamente. A técnica GITT vem sendo utilizada na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e advecção-difusão ((CATALDI et al., 2000); (RIBEIRO et al., 2000); (STORCH; PIMENTEL, 2003); (VELLOSO et al., 2004); (COTTA; BARROS, 2007); (GUERRERO et al., 2012)).

Através da combinação dos métodos ADMM e GITT ((COSTA et al., 2006); (VILHENA et al., 2008); (COSTA; TIRABASSI; VILHENA, 2010); (COSTA et al., 2012)) obtem-se o método conhecido como GIADMT. Ou seja, o problema tridimensional é transformado em um problema bidimensional utilizando a técnica GITT e é então resolvido pelo método ADMM.

O método GILTT é obtido pela aplicação da técnica GITT em problemas de poluição atmosférica de forma totalmente analítica. Muitos estudos são apresentados na literatura a respeito da dispersão de poluentes utilizando o método GILTT na equação de advecção-difusão bidimensional ((WORTMANN et al., 2005); (MOREIRA et al., 2006); (BUSKE et al., 2008); (BUSKE et al., 2007a); (BUSKE et al., 2007b); (TIRABASSI et al., 2008); (TIRABASSI et al., 2009); (MOREIRA; VILHENA; BUSKE, 2009); (MOREIRA et al., 2009); (BUSKE et al., 2010)). Seguindo o mesmo procedimento adotado no método GITT, esta técnica resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), que é resolvido analiticamente aplicando-se a transformada de Laplace (resolvida numericamente com o método GITT). A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após a diagonalização, essa matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico. Esta inversão é analítica e sem custo computacional por ser uma matriz diagonalizada. Assim, a solução analítica do problema transformado é finalmente encontrada. O método GILTT é analítico no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, a não ser o truncamento de um somatório infinito. (MOREIRA et al., 2009) apresentaram uma revisão do método GILTT para problemas de dispersão atmosférica unidimensionais e bidimensionais da equação advecção-difusão.

Mais recentemente uma solução da equação de advecção-difusão combinando o método de separação de variáveis e o método GILTT foi obtida pelos autores ((WEYMAR et al., 2018); (GONCALVES et al., 2018); (FAVERO et al., 2020); (BUSKE et al., 2020)). Através dessa metodologia é encontrada uma solução analítica sem a necessidade de inversão numérica no tempo (os problemas transientes que utilizam somente a GILTT possuem uma inversão numérica no tempo).

O método GILTT pode ser usado para a solução de problemas em três dimensões utilizando os métodos conhecidos como GILTTG ou 3D-GILTT. Pelo método GILTTG ((BUSKE et al., 2007a); (BUSKE et al., 2008); (MOREIRA et al., 2009); (BUSKE et al., 2010)), o problema é resolvido com o uso do método GILTT, e de forma a se obter a solução tridimensional aproximada, assume-se que a pluma de poluentes tem distribuição gaussiana na direção y. O método 3D-GILTT surgiu em 2009 ((BUSKE et al., 2009); (BUSKE; VILHENA; MOREIRA, 2009); (BUSKE et al., 2011), (BUSKE et al., 2011), (BUSKE et al., 2012b), (VILHENA et al., 2012);) e resolve a equação tridimensional de advecção-difusão de forma totalmente analítica, ou seja, a técnica GITT é aplicada na variável y de forma a se obter um problema bidimensional cuja solução é conhecida e obtida pelo método GILTT bidimensional.

2.4 Soluções da equação de advecção-difusão por transformadas integrais considerando o termo de contragradiente

Utilizando as técnicas descritas acima, podemos encontrar trabalhos na literatura que levam em conta o termo de contragradiente na equação de advecção-difusão.

Em 2003 foi apresentado um modelo bidimensional, onde foi considerada a equação de advecção-difusão com duas dimensões em estado estacionário, utilizando fechamento não Fickiano da turbulência e o método ADMM para a resolução desta equação (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2003). Um ano depois (MOREIRA et al., 2004) deram seguimento a esse trabalho, no qual uma comparação com o experimento de Copenhagen foi realizada. O problema foi retomado no trabalho de (VENZKE, 2015).

No ano de 2004 foi apresentada uma solução da equação de difusão unidimensional transiente para modelar a dispersão de poluentes, utilizando o método ADMM e fechamento não local na dispersão (BULIGON et al., 2004).

Ainda em 2004 foi realizado um estudo completo sobre a modelagem bidimensional considerando efeitos do contragradiente, levando em conta o caráter não local da dispersão utilizando o método ADMM (COSTA, 2004); (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2004); (MOREIRA et al., 2004).

Em 2007 foi apresentado um modelo bidimensional estacionário com fechamento não Fickiano, cuja solução foi obtida aplicando-se a técnica GILTT (BUSKE et al., 2007a).

Através da técnica GILTTG, (BUSKE et al., 2007b) apresentaram uma solução tridimensional estacionária considerando o caráter não local da dispersão, resolvendo a equação advecção-difusão com duas dimensões e a terceira dimensão foi obtida ao multiplicar uma gaussiana em y.

Em 2008 foi utilizado o método GIADMT para obter uma solução semi-analítica para a equação advecção-difusão tridimensional estacionária considerando o fechamento não local da turbulência (VILHENA et al., 2008).

No ano de 2012 foi desenvolvido um modelo tridimensional com fechamento não Fickiano, obtendo uma solução para a equação de advecção-difusão tridimensional transiente ao utilizarem o método GIADMT e a transformada de Laplace (COSTA et al., 2012).

Em 2012 foi apresentada uma solução tridimensional não Fickiana para a equação de advecção-difusão tridimensional em estado estacionário, via método GILTT (BUSKE et al., 2012a). Este trabalho foi extendido em 2015, apresentando uma solução para o problema 3D transiente (BUSKE et al., 2015).

Conforme pode-se verificar acima, utilizando o método ADMM foram encontradas soluções da equação de advecção-difusão, incluindo o termo de contragradiente, para problemas 1D e 2D, e para resolver os problemas 3D, foi utilizado o método GIADMT. Já com o método GILTT, foram encontradas soluções para os problema 2D e 3D (usando GILTTG e 3D-GILTT), mas o problema 1D não foi abordado por esta metodologia. Assim justifica-se esta abordagem neste trabalho.

3 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO UNIDIMENSIONAL CONSIDERANDO O TERMO DE CONTRAGRADIENTE

Toda substância emitida na atmosfera se dispersa através da difusão turbulenta causada pela variação de temperatura e do vento na camada limite. Esta variação é provocada pelo aquecimento e/ou resfriamento da superfície da terra, fazendo com que o transporte das partículas seja dominado na horizontal pelo vento médio (advecção) e na vertical pela turbulência. Como consequência, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera é, geralmente, descrito pela equação de advecção-difusão. A estimativa da concentração de poluentes atmosféricos é determinada pela elaboração de modelos de dispersão. Um modelo de dispersão é uma expressão matemática que representa os efeitos da atmosfera sobre os poluentes atmosféricos. De acordo com os problemas ocasionados pela poluição do ar é necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes para prever as possíveis consequências do impacto da poluição sobre os diversos ecossistemas (BUSKE, 2008).

Neste capítulo, apresentam-se a formulação matemática de um modelo unidimensional para a dispersão de poluentes e a sua solução. O equacionamento matemático é dado pela equação de difusão.

3.1 O modelo físico-matemático

A equação transiente da difusão unidimensional pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \overline{c}\,(z,t)}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \tag{6}$$

na qual $\overline{c}$ denota a concentração média do contaminante passivo (g/m^3) e o termo $\overline{w'c'}$ representa o fluxo turbulento do contaminante (g/sm^2) na direção vertical.

Porém a equação (6) apresenta duas variáveis desconhecidas (o fluxo turbulento e a concentração) e, dessa forma, não pode ser resolvida diretamente levando-nos ao chamado problema de fechamento da turbulência (STULL, 1988).

3.1.1 O problema de fechamento da turbulência

Uma das maneiras mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de difusão (6) é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K ou fechamento de primeira ordem) que, em analogia com a lei de Fick da difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média (SEINFELD; PANDIS, 1997). Assim,

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} \tag{7}$$

em que K_z é o coeficiente de difusão turbulenta (m^2/s) na direção z. No fechamento de primeira ordem, toda a informação da complexidade da turbulência está contida nesses coeficientes de difusão.

A simplicidade da teoria K de difusão turbulenta conduziu ao uso difundido desta teoria como base matemática para simular a dispersão de poluentes (poluição em campo aberto, urbano, fotoquímico, etc). A teoria K funciona bem quando a difusão do material dispersado é muito maior que o tamanho dos turbilhões envolvidos no processo difusivo, ou seja, para grandes tempos de viagem (MANGIA et al., 2002). Mas o fechamento K tem seus próprios limites (ARYA, 1999). Em contraste com a difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente da escala. Isto significa que a taxa de difusão de uma pluma de material geralmente depende das dimensões da pluma e da intensidade da turbulência. Conforme a pluma cresce, turbilhões maiores são incorporados no processo de expansão, de modo que uma fração progressivamente maior da energia cinética turbulenta está disponível para a expansão da pluma (ARYA, 1999).

Outro problema é que a hipótese de transporte por gradiente é inconsistente com as características da difusão turbulenta na parte superior da camada de mistura, em casos convectivos em que ocorrem fluxos de material contragradiente (DEARDOFF; WILLIS, 1975). Há algumas décadas, já se percebeu que na parte superior da CLC o fluxo de temperatura potencial é ao contrário do gradiente de perfil de temperatura potencial do meio ((ERTEL, 1942), (PRIESTLY; SWINBANK, 1947), (DEARDOFF, 1966)). O gradiente de temperatura potencial do meio e o fluxo trocam de sinal em diferentes níveis introduzindo uma certa região na CLC. Isto entra em contraste com o fechamento da turbulência tradicional de primeira ordem, pois ele não leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência da CLC.

Para descrever e caracterizar a difusão nesta região, (ERTEL, 1942), (DEARDOFF, 1966) e (DEARDOFF, 1972) propuseram modificar a aplicação usual do fluxo-gradiente na aproximação da teoria K da seguinte forma:

$$\overline{w'c'} = -K_z \left(\frac{\partial \overline{c}}{\partial z} - \gamma \right) \tag{8}$$

na qual γ representa o termo de contragradiente e é uma constante.

Muitos esquemas e parametrizações para o termo de contragradiente têm sido desenvolvidos ((WYNGAARD; BROST, 1984), (FIEDLER; MOENG, 1985), (HOLTSLAG; MOENG, 1991), (WYNGAARD; WEIL, 1991), (HOLTSLAG; BOVILLE, 1993), (HAMBA, 1993), (ROBSON; MAYOCCHI, 1994), (ZILITINKEVICH et al., 1999), (RODE et al., 2004)). Neste trabalho utilizamos as parametrizações propostas por (VAN DOP; VERVER, 2001) que são baseadas no trabalho de (WYNGAARD; WEIL, 1991). O problema de fechamento da turbulência na equação de difusão foi modificado considerando-se uma equação genérica para a difusão turbulenta de forma que o fluxo vertical turbulento de concentração mais a sua derivada é proporcional ao gradiente médio.

A equação do fluxo turbulento como sugerida por Van Dop e Verver (2001), dependente do tempo, é escrita como:

$$\left(1+\left(\frac{S_k\sigma_w T_{l_w}}{2}\right)\frac{\partial}{\partial z}+\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)\overline{w'c'}=-K_z\frac{\partial\overline{c}\left(z,t\right)}{\partial z} \tag{9}$$

em que S_k é a assimetria (*skewness*), σ_w é o desvio padrão da velocidade turbulenta vertical (m/s), T_{l_w} é a escala de tempo Lagrangeana (s) e τ é o tempo de relaxação (s).

Desta forma o problema de fechamento da turbulência é solucionado sem obedecer à lei de Fick, sendo chamado de fechamento não-Fickiano. Este fechamento nos permite investigar o efeito dos turbilhões mais energéticos em diferentes alturas e o efeito do transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes considerando de um modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta. Agora, a turbulência não é mais modelada apenas no coeficiente de difusão K_z.

O segundo termo do lado esquerdo da equação (9) leva em conta o caráter não-local da dispersão. O caráter local indica que apenas partículas de ar vizinhas se relacionam, enquanto que no não-local quaisquer partículas podem se relacionar entre si. O fato de o caráter não-local da dispersão ser considerado faz com que os modelos não-Fickianos também sejam chamados de modelos com fechamento não-local.

A equação (9) pode ser escrita como:

$$\left(1+\beta\frac{\partial}{\partial z}+\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)\overline{w'c'}=-K_z\frac{\partial\overline{c}\left(z,t\right)}{\partial z} \tag{10}$$

em que β é escrito como:

$$\beta=\frac{S_k\sigma_w T_{l_w}}{2}$$

ou ainda, efetuando as operações algébricas na equação (10):

$$\overline{w'c'} + \beta\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial z} + \tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t} = -K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z}$$

$$\beta\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial z} = -K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z} - \tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t} - \overline{w'c'}$$

$$\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial z} = -\frac{1}{\beta}\left[K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z} + \tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t} + \overline{w'c'}\right] \tag{11}$$

3.1.2 A equação de difusão unidimensional com fechamento não Fickiano

Consideremos um experimento de dispersão de poluentes na atmosfera, no qual uma fonte aérea libera um traçador químico. Este é abandonado sem empuxo, a partir de uma torre com altura H_s, que emite poluentes com intensidade Q a uma taxa constante.

Substituindo a equação (11) na equação (6), tem-se:

$$\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t} = \frac{1}{\beta}\left[K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z} + \tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t} + \overline{w'c'}\right]$$

$$\beta\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t} = K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z} + \tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t} + \overline{w'c'}$$

$$\overline{w'c'} = \beta\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t} - K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z} - \tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t} \tag{12}$$

Substituindo a equação (12) na equação (6):

$$\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}\left[\beta\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t} - K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z} - \tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t}\right]$$

$$\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t}\right) \tag{13}$$

Pelo teorema de Cauchy-Euler:

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t}\right) = \tau\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial z}\right)$$

e pela equação (6), obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t}\right)=-\tau\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\tau\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial t}\right)=-\tau\frac{\partial^2\overline{c}\,(z,t)}{\partial t^2} \tag{14}$$

Substituindo a equação (14) na equação (13):

$$\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z}\right)-\tau\frac{\partial^2\overline{c}\,(z,t)}{\partial t^2} \tag{15}$$

$$\tau\frac{\partial^2\overline{c}\,(z,t)}{\partial t^2}+\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t}\right)=\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z}\right) \tag{16}$$

ou ainda,

$$\tau\frac{\partial^2\overline{c}\,(z,t)}{\partial t^2}+\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t}=K_z\frac{\partial^2\overline{c}\,(z,t)}{\partial z^2}+K_z'\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial z}-\beta\frac{\partial^2\overline{c}\,(z,t)}{\partial z\partial t}-\beta'\frac{\partial\overline{c}\,(z,t)}{\partial t} \tag{17}$$

na qual $\beta=0,5S_k\sigma_wT_{l_w}$.

Considerando que não há fluxo de poluentes no topo da CLP (h) e ao nível do solo (ou ao nível da rugosidade z_0) a equação (17) está sujeita às seguintes condições de contorno e inicial, respectivamente:

$$K_z\frac{\partial\overline{c}}{\partial z}=0 \qquad em\ z=z_0\ e\ z=h \tag{18}$$

$$\overline{c}(z,0)=Q\delta(z-H_s) \qquad em\ t=0 \tag{19}$$

em que $H_s(m)$ é a altura da fonte e $Q\ (g/m^2s)$ é a taxa de emissão do poluente e δ representa a função delta de Dirac.

Ainda, iremos considerar que:

$$\frac{\partial\overline{c}(z,L_t)}{\partial t}=0 \qquad em\ t=L_t \tag{20}$$

em que L_t é um tempo grande (s).

3.1.3 Solução da equação de difusão unidimensional

Para obter uma solução analítica para o modelo proposto, utilizou-se a técnica GILTT. Inicialmente aplicando a técnica da transformada integral na variável z, expande-se a concentração de poluentes como (BUSKE et al., 2012b):

$$\overline{c}(z,t)=\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i}(t)\Psi_i(z) \tag{21}$$

onde $\overline{c}$ é a concentração média de um contaminante passivo e Ψ é a função estabilidade.

Substituindo a equação (21) na equação (17) obtemos (BUSKE, 2008):

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{\infty}\tau\overline{c_i''}(t)\Psi_i(z)+\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i'}(t)\Psi_i(z)=\sum_{i=0}^{\infty}K_z\overline{c_i}(t)\Psi_i''(z)+\\ +\sum_{i=0}^{\infty}K_z'\overline{c_i}(t)\Psi_i'(z)-\sum_{i=0}^{\infty}\beta\overline{c_i'}(t)\Psi_i'(z)-\sum_{i=0}^{\infty}\beta'\overline{c_i'}(t)\Psi_i(z)\end{aligned} \tag{22}$$

Utilizando o problema auxiliar de Sturm-Liouville dado por:

$$\Psi_i''(z)+\lambda_i^2\Psi_i(z)=0 \quad em \quad 0<z<h \tag{23}$$

cuja solução é dada pelo conjunto de autofunções ortogonais $\Psi_i(z)$:

$$\Psi_i(z)=cos(\lambda_i z)$$

e λ_i é o conjunto de autovalores dados por

$$\lambda_i=\frac{i\pi}{h}(i=0,1,2,...)$$

Da equação (23) temos que:

$$\Psi_i''(z)=-\lambda_i^2\Psi_i(z) \tag{24}$$

e substituindo a equação (24) na equação (22) obtemos:

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{\infty}\tau\overline{c_i''}(t)\Psi_i(z)+\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i'}(t)\Psi_i(z)=-\sum_{i=0}^{\infty}K_z\overline{c_i}(t)\lambda_i^2\Psi_i(z)+\\ +\sum_{i=0}^{\infty}K_z'\overline{c_i}(t)\Psi_i'(z)-\sum_{i=0}^{\infty}\beta\overline{c_i'}(t)\Psi_i'(z)-\sum_{i=0}^{\infty}\beta'\overline{c_i'}(t)\Psi_i(z)\end{aligned} \tag{25}$$

Tomando momentos, ou seja, aplicando o operador integral:

$$\int_0^h (.)\Psi_j(z)\mathrm{d}z \tag{26}$$

na equação (25), pode-se escrever a equação da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i''}(t)\int_0^h \tau\Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z+\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i'}(t)\int_0^h \Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z= \\
&\quad -\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i}(t)\lambda_i^2\int_0^h K_z\Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z+\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i}(t)\int_0^h K_z'\Psi_i'(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z \\
&\quad -\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i'}(t)\int_0^h \beta\Psi_i'(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z-\sum_{i=0}^{\infty}\overline{c_i'}(t)\int_0^h \beta'\Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z
\end{aligned} \tag{27}$$

Reescrevendo a equação (27) em notação matricial, tem-se:

$$Y''(t)+FY'(t)+GY(t)=0 \tag{28}$$

onde $Y(t)$ é o vetor coluna cujas componentes são $\overline{c_i}(t)$. A matriz F é definida por:

$$F=C^{-1}.B$$

e a matriz G é definida por:

$$G=C^{-1}.A$$

Os elementos das matrizes C, B e A são calculados pelas expressões dadas a seguir:

$$c_{i,j}=\int_0^h \tau\Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z$$

$$b_{i,j}=\int_0^h \Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z+\int_0^h \beta\Psi_i'(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z+\int_0^h \beta'\Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z$$

$$a_{i,j}=\lambda_i^2\int_0^h K_z\Psi_i(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z-\int_0^h K_z'\Psi_i'(z)\Psi_j(z)\mathrm{d}z$$

O próximo passo é aplicar uma redução de ordem na equação (28), portanto, deve-se, definir novas variáveis:

$$Z_1(t)=Y(t) \tag{29}$$

$$Z_2(t)=Y'(t) \tag{30}$$

derivando as equações (29) e (30):

$$Z_1'(t) = Y'(t) \tag{31}$$

$$Z_2'(t) = Y''(t) \tag{32}$$

igualando as equações (30) e (31):

$$Z_1'(t) = Z_2(t) \tag{33}$$

reorganizando os termos da equação (33):

$$Z_1'(t) - Z_2(t) = 0 \tag{34}$$

e substituindo as equações (29), (30) e (32) na equação (28) pode-se escrever:

$$Z_2'(t) + F.Z_2(t) + G.Z_1(t) = 0 \tag{35}$$

as equações (34) e (35) constituem um sistema de equações matriciais de primeira ordem e podem serem escritas como:

$$\begin{cases} Z_1'(t) \; + \; 0Z_2'(t) \; + \; 0Z_1(t) \; - \; Z_2(t) = 0 \\ 0Z_1'(t) \; + \; Z_2'(t) \; + \; G.Z_1(t) \; + \; F.Z_2(t) = 0 \end{cases} \tag{36}$$

O sistema da equação (36) pode ser escrito em notação matricial da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} Z_1'(t) \\ Z_2'(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} Z_1(t) \\ Z_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{37}$$

Da equação (37) pode-se definir a seguinte EDO na forma matricial:

$$Z'(t) + H.Z(t) = 0 \tag{38}$$

em que o vetor $Z(t)$ é dado por:

$$Z(t) = \begin{bmatrix} Z_1(t) \\ Z_2(t) \end{bmatrix}$$

A matriz H tem a forma de bloco representada por:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix}$$

A equação (38) é resolvido pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização (BUSKE et al., 2007a)(BUSKE et al., 2012a)(MOREIRA et al., 2009):

$$s\overline{Z}(s) - Z(0) + H.\overline{Z}(s) = 0 \tag{39}$$

sendo que $\overline{Z}(s)$ denota a transformada de Laplace do vetor $Z(t)$. Assumindo que a matriz H é não-degenerada, pode-se escrever:

$$H = X\,D\,X^{-1} \tag{40}$$

no qual D é a matriz diagonal de autovalores da matriz H; X é a matriz dos respectivos autovetores e X^{-1} é a matriz inversa da matriz dos autovetores. Substituindo a equação (40) na equação (39):

$$s\overline{Z}(s) - Z(0) + X\,D\,X^{-1}\,.\,\overline{Z}(s) = 0 \tag{41}$$

Rearranjando os termos da equação (41) podemos escrever:

$$(s\,I + X\,D\,X^{-1})\,.\,\overline{Z}(s) = Z(0) \tag{42}$$

onde I é a matriz identidade, sendo que:

$$X\,X^{-1} = X^{-1}\,X \;=\; I \tag{43}$$

Substituindo a equação (43) na equação (42):

$$(s\,X\,X^{-1} \;+\; X\,D\,X^{-1})\,.\,\overline{Z}(s) = Z(0) \tag{44}$$

Rearranjando os termos na equação (44):

$$X(sI \;+\; D)X^{-1}\,.\,\overline{Z}(s) = Z(0) \tag{45}$$

cuja solução é:

$$\overline{Z}(s) = X(s\,I \;+\; D)^{-1}\,X^{-1}\,\overline{Z}(0) \tag{46}$$

Na sequência aplica-se a transformada Inversa de Laplace $(\mathcal{L})$ na equação (46):

$$Z(t) = X.\,\mathcal{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\}.X^{-1}.Z(0) \tag{47}$$

em que a matriz $(sI + D)$ é escrita como:

$$(sI + D) = \begin{bmatrix} s+d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s+d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s+d_n \end{bmatrix} \tag{48}$$

onde d_n são os autovalores da matriz H. Da álgebra matricial, sabe-se que a inversa de uma matriz diagonal é dada pela inversa dos seus elementos. Assim, a matriz inversa da matriz diagonal $(sI + D)$ é dada por:

$$(sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s+d_n} \end{bmatrix} \tag{49}$$

fazendo a transformada inversa de Laplace de $(sI + D)^{-1}$ obtemos:

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{(sI + D)^{-1}\right\} = G(t) = \begin{bmatrix} e^{-d_1 t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 t} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_n t} \end{bmatrix} \tag{50}$$

Finalmente, substituindo a equação (44) na equação (47), obtemos a solução para o problema da equação (38):

$$Z(t) = X. \begin{bmatrix} e^{-d_1 t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 t} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_n t} \end{bmatrix} .X^{-1}.Z(0) \tag{51}$$

ou ainda podemos escrever:

$$Z(t) = X \,.\, G(t) \,.\, X^{-1} \,.\, Z(0) \tag{52}$$

Definindo:

$$M(t) = X \,.\, G(t)$$

e:

$$\xi = X^{-1} \,.\, Z(0)$$

a equação (52) é escrita como:

$$Z(t) = M(t)\,\xi \tag{53}$$

ou na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} Z_1(t) \\ Z_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(t) & M_{12}(t) \\ M_{21}(t) & M_{22}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$$

Finalmente, para determinar o vetor desconhecido ξ precisamos resolver o seguinte sistema linear resultante da aplicação das condições de contorno da solução da equação (38):

$$\begin{pmatrix} M_{11}(0) & M_{12}(0) \\ M_{21}(L_t) & M_{22}(L_t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_1(0) \\ Z_2(L_t) \end{pmatrix}$$

sendo que $Z_1(0)$ e $Z_2(L_t)$ se referem a EDO de primeira ordem (38) aplicada na fonte e no limite para tempos grandes, respectivamente. Substituindo os resultados da equação (53) na equação (21), obtemos a solução do problema proposto.

$$\overline{c}(z,t) = \frac{1}{2\pi i}\sum_{i=0}^{\infty} \overline{c_i}(t)\Psi_i(z)e^{t}ds \tag{54}$$

4 DADOS PARA VALIDAÇÃO DO MODELO

Uma utilização correta dos modelos de transporte e difusão na atmosfera não pode prescindir de um estudo sobre suas capacidades de representarem corretamente situações reais. Quando possível, deve-se verificar a confiabilidade do modelo utilizado com os dados, cenários topográficos e meteorológicos próprios da área de seu emprego.

Assim, neste capítulo, apresentam-se os dados experimentais, parametrizações do coeficiente de difusão, perfis de vento e expressões para a parametrização do termo de contragradiente utilizados neste trabalho.

4.1 Coeficiente de difusão turbulenta e expressões do termo de contragradiente

A escolha de uma parametrização turbulenta adequada é imprescindível para prever a concentração de poluentes atmosféricos. Portanto, a precisão dos modelos de dispersão atmosférica está diretamente relacionada com os parâmetros turbulentos, que por sua vez, estão relacionados às propriedades dinâmicas e termodinâmicas da CLP. Do ponto de vista físico, a parametrização da turbulência é a aproximação da natureza que substitui um termo desconhecido.

Na literatura encontram-se diversas e variadas formulações para o coeficiente de difusão turbulento vertical (ULKE, 2000). Os coeficientes de difusão utilizados neste trabalho são apresentados a seguir.

4.1.1 Parametrizações para condições instáveis

Em condições instáveis, o coeficiente de difusão utilizado é descrito por (DEGRAZIA et al., 1997):

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

em que h é a altura da CLC.

Para a parametrização do termo de contragradiente é usada a variação da velocidade turbulenta Euleriana conforme descrita em (DEGRAZIA; VELHO; CARVALHO, 1997) e (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001) e representada por:

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

na qual h a altura da CLC, $\psi = 1,5 - 1,2(z/h)^{1/3}$ é a taxa de dissipação, $c_w = 0,36$ e w_* é a escala da velocidade convectiva.

A escala de tempo Lagrangiana é parametrizada pela seguinte expressão:

$$T_{Lw} = \frac{0,55}{4} \frac{1}{\sigma_w} \frac{z}{(f_m^*)_w}$$

em que $(f_m^*)_w = z/(\lambda_m)_w$ é a frequência normalizada do pico espectral vertical. A expressão utilizada para o valor do pico espectral do comprimento de onda vertical $(\lambda_m)_w$ foi:

$$(\lambda_m)_w = 1,8h[1 - e^{\frac{-4z}{h}} - 0,0003e^{\frac{8z}{h}}]$$

4.2 Dados Experimentais

Qualquer estudo de modelagem é incompleto se não é apropriadamente e adequadamente validado com observações relevantes. A seguir são apresentados os experimentos utilizados neste trabalho para validar o presente modelo.

Cabe ressaltar que o modelo aqui apresentado é unidimensional com fechamento não Fickiano da turbulência. Na literatura, os experimentos com dados de concentração unidimensionais foram realizados em condições estáveis, condição esta em que o termo de contragradiente terá pouca ou nenhuma efetividade.

4.2.1 Experimento de Copenhagen

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning (GRYNING, 1981) e Gryning e Lyck (GRYNING; LYCK, 1984), consistiram na liberação do traçador SF_6 (hexafluoreto de enxofre) ao norte de Copenhagen. É um experimento de fonte alta e fortemente convectivo.

O traçador foi abandonado sem empuxo a partir de uma torre com altura de $115m$, sendo coletado ao nível do solo ($z = 1m$), em unidade de amostragem localizadas em três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância entre 2 a $6km$, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente (Domínio: $6km$ de distância da fonte).

As liberações de SF_6 começaram uma hora antes do início da amostragem. O tempo médio das medidas foi de $1h$ e suas imprecisões são de 10%. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de $z_0 = 0,6m$ (é a altura em que o vento é zero).

A Tabela 1 mostra os dados meteorológicos do experimento 8 de Copenhagen a serem utilizados no modelo, onde h é a altura (m) da CLC, L é o comprimento de Monin-Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s), u_* é a velocidade de fricção (m/s) e U é o vento médio em $10m$ (m/s). Estes dados meteorológicos são médias horárias.

Tabela 1 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen.

Parâmetro	Valor
$h\,(m)$	810
$L\,(m)$	-56
$w_*\,(m/s)$	2,2
$u_*\,(m/s)$	0,69
$U\,(m/s)$	4,2

4.2.2 Experimento de Tanque

Com o objetivo de validar a nova solução analítica, na obtenção dos resultados numéricos a concentração integrada lateralmente foi confrontada com os dados de laboratório do experimento de Tanque de (WILLIS; DEARDORFF, 1978). O experimento foi realizado em um tanque com camadas estratificadas de água, no qual a convecção foi inicialmente mantida pela aplicação de uma taxa de aquecimento elevada no limite inferior do tanque (resultando uma forte convecção). Para se estudar os processos de dispersão turbulenta no interior deste tanque foram liberadas gotas de óleo sem empuxo e uma determinada altura ao longo de uma linha estendendo-se no comprimento do tanque.

Tabela 2 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Tanque.

Parâmetro	Valor
$h\,(m)$	1000
$L\,(m)$	-9,4
$w_*\,(m/s)$	2
$u_*\,(m/s)$	0,31
$u\,(m/s)$	3

A Tabela 2 mostra os dados meteorológicos do experimento de Tanque a serem utilizados no modelo, onde h é a altura (m) da CLC, w_* é a velocidade convectiva (m/s), z_0 é a rugosidade do terreno, u_* é a velocidade de fricção (m/s), u é a velocidade de vento médio (m/s), L é o comprimento de Monin-Obukhov (m) e H_s é a altura da fonte (m).

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta seção, através do modelo representado pela equação (21), investigou-se o problema da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente. Para tanto, foram utilizados os dados micrometeorológicos dos experimentos de Copenhagen e Tanque e as parametrizações apresentadas no capítulo 4. Para a obtenção dos resultados numéricos foram utilizados 100 autovalores na solução em série.

O modelo de dispersão foi escrito na linguagem Fortran e executado no sistema operacional Windows 10.0.

Para analisar a influência do termo de contragradiente na simulação do transporte turbulento utilizou-se diferentes valores para o termo da assimetria (S_k). O valor de $S_k = 1$ é sugerido por (VAN DOP; VERVER, 2001). Outros valores são encontrados na literatura como $S_k = 0,6$ e inclusive negativos como utilizado em (BUSKE et al., 2007b) (BUSKE, 2008). Neste trabalho analisaremos os resultados utilizando assimetrias positivas e negativas ($S_k = -1; -0,5; 0,5; 1$).

Os valores assumidos para a assimetria representam, respectivamente:

- uma assimetria moderada a elevada e negativa, isto representa que ocorre mais *updrafts* do que *downdrafts*;

- uma assimetria moderada e negativa, isto representa que ocorre mais *updrafts* do que *downdrafts*;

- simétrico;

- uma assimetria moderada e positiva, isto representa que ocorre mais *downdrafts* do que *updrafts*;

- uma assimetria moderada a elevada e positiva, isto representa que ocorre mais *downdrafts* do que *updrafts*.

5.1 Resultados para o experimento de Copenhagen

Para validar o modelo, foram utilizados dados do experimento 8 de Copenhagen. A altura da CLC é $h = 810m$, a velocidade convectiva é $w_* = 2,2m$. As simulações foram aplicadas para o período de tempo de 1h. O tempo de relaxação considerado é $\tau = 0,5s$ (conforme sugerido por (VAN DOP; VERVER, 2001)) e a taxa de emissão da fonte de $Q = 100g/s$.

Relembrando que o modelo aqui apresentado é unidimensional com fechamento não Fickiano da turbulência. Foram utilizados dados experimentais bidimensionais realizados em condições instáveis porque os experimentos com dados de concentração unidimensionais foram realizados em condições estáveis, condição esta em que o termo de contragradiente terá pouca ou nenhuma efetividade.

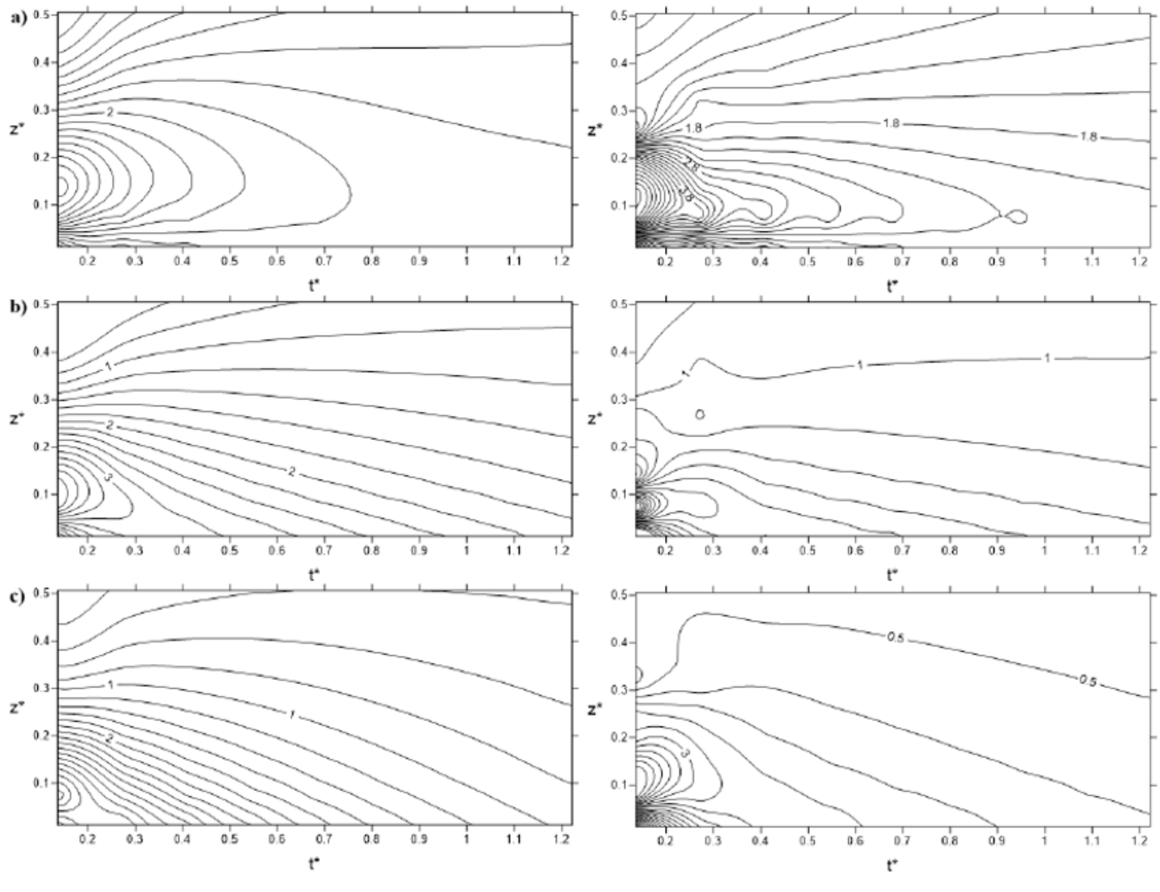

Figura 2 – Concentrações preditas pelo presente modelo não considerando o termo de assimetria (figuras da esquerda) e considerando o termo de assimetria $S_k = 1,0$ (figuras da direira), a) $w = 0,5m/s$, b)$w = 0m/s$ e c)$w = -0,5m/s$, considerando os dados do experimento de Copenhagen.

Inicialmente foi analisado o comportamento da pluma de poluentes devido a influência da velocidade vertical w no modelo. A Figura 2 mostra a concentração no tempo adimensional versus a altura adimensional, quando o termo de assimetria não é considerado $(S_k = 0)$ (figuras da esquerda) e quando é considerado $(S_k = 1)$ (figuras da direita). A concentração adimensional é dada por $C^* = Ch/Q$, o tempo adimensional é dado por $t^* = tw_*/h$, a altura da fonte adimensional é dada por $H_s^* = H_s/h$.

Nas figuras da esquerda, considerando a velocidade vertical positiva (Figura 2a) observa-se que a pluma tem um comportamento ascendente, quando a velocidade vertical é nula (Figura 2b) observa-se a simetria da pluma de poluentes próximo a fonte e quando a velocidade vertical é negativa (Figura 2c), a pluma tem um comportamento descendente.

Quando o termo de assimetria é considerado (Figuras da direita), o pico de concentração é deslocado da fonte e até mesmo tem-se núcleos de concentração desprendidos da pluma de poluentes, conforme figura b, mostrando o efeito do termo de contragradiente.

Na sequência foram realizadas simulações nas alturas z = 1 e 750 m para três alturas de fonte H_s^* = 0,03; 0,14 e 0,37 e verificada a influência da assimetria. Foi considerada velocidade vertical nula ($w = 0$).

A Figura 3 mostra as simulações da concentração de poluentes em função do tempo nas alturas z= 1m (gráficos a esquerda) e z= 750m (gráficos a direita) para diferentes valores do coeficiente de assimetria.

Observa-se que para alturas próximas do solo (gráficos a esquerda), a concentração de poluentes para pequenos tempos de viagem é maior à medida que a altura da fonte é diminuida e os intervalos onde ocorrem os valores máximos de concentração também diminuem. A concentração de poluentes mais elevada foi obtida para fonte mais baixa e é onde foi observada a menor influência do coeficiente de assimetria. Para as três alturas de fontes analisadas, a concentração de poluentes tende a homogeneizar-se conforme o tempo passa. Para alturas próximas do topo da CLC (gráficos a direta), o coeficiente de assimetria não influenciou nos valores máximos de concentração como para o caso de alturas próximas do solo. A concentração de poluentes tende a homogeneizar-se na concentração máxima. Quanto mais alta é a fonte, mais rápido ocorre a homogeneização da concentração. Conforme a altura da fonte diminui, aumenta a influência do coeficiente de assimetria.

5.2 Resultados para o experimento de Tanque

Para simular o experimento de tanque foram utilizados dados meteorológicos gerado por LES (*Large Eddy Simulation*) descritos em (WEIL; SULLIVAN; MOENG, 2004). Os dados utilizados foram: altura da CLC h= 1000m; velocidade convectiva w_*= 2m; rugosidade do terreno z_0= 0,16m; velocidade de fricção u_*= 0,31m/s; velocidade de vento médio u= 3m/s; comprimento de Monin-Obukhov L= -9,4m e altura da fonte h_s= 70m. O valor utilizado para a velocidade vertical do vento foi w= -0,2m/s para X >0,4, onde X é a distância adimensional da fonte e X= xw_*/uh.

Para a obtenção dos resultados com a precisão desejada utiizamos 50 autovalores na solução em série. Para analisar a influência do termo de contragradiente na simulação do transporte turbulento utilizou-se o valor de S_k= 1.0 como sugerido por (VAN DOP; VERVER, 2001). A Figura 4 mostra a concentração adimensional ao nível do solo, como função da distância adimensional, comparada com os dados do experimento de Tanque de (WILLIS; DEARDORFF, 1978).

Na Figura 4 a diferença entre os resultados com e sem o termo de S_k podem ser observados. A concentração superfícial alcança dois picos de máximos localizados na mesma posição de distância X da fonte. A diferença entre as duas curvas é devido ao acréscimo do termo de contragradiente no fechamento da turbulência. Além disso, é possível ver que a influência do termo de cotragradiente é confinada na região perto da fonte.

A Figura 5 mostra a concentração no tempo adimensional versus a altura adimensional, quando o termo de assimetria não é considerado $(S_k = 0)$ (figuras da esquerda) e quando é considerado $(S_k = 1)$ (figuras da direita). A concentração adimensional é dada por $C^* = Ch/Q$, o tempo adimensional é dado por $t^* = tw_*/h$, a altura da fonte adimensional é dada por $H_s^* = H_s/h$.

Podemos verificar a influência da velocidade vertical na Figura 5. Apesar de considerar velocidades verticais constantes, podemos verificar que quando a velocidade vertical é positiva, a pluma tem um comportamento ascendente. Já quando a velocidade é negativa, a pluma tem um comportamento descendente.

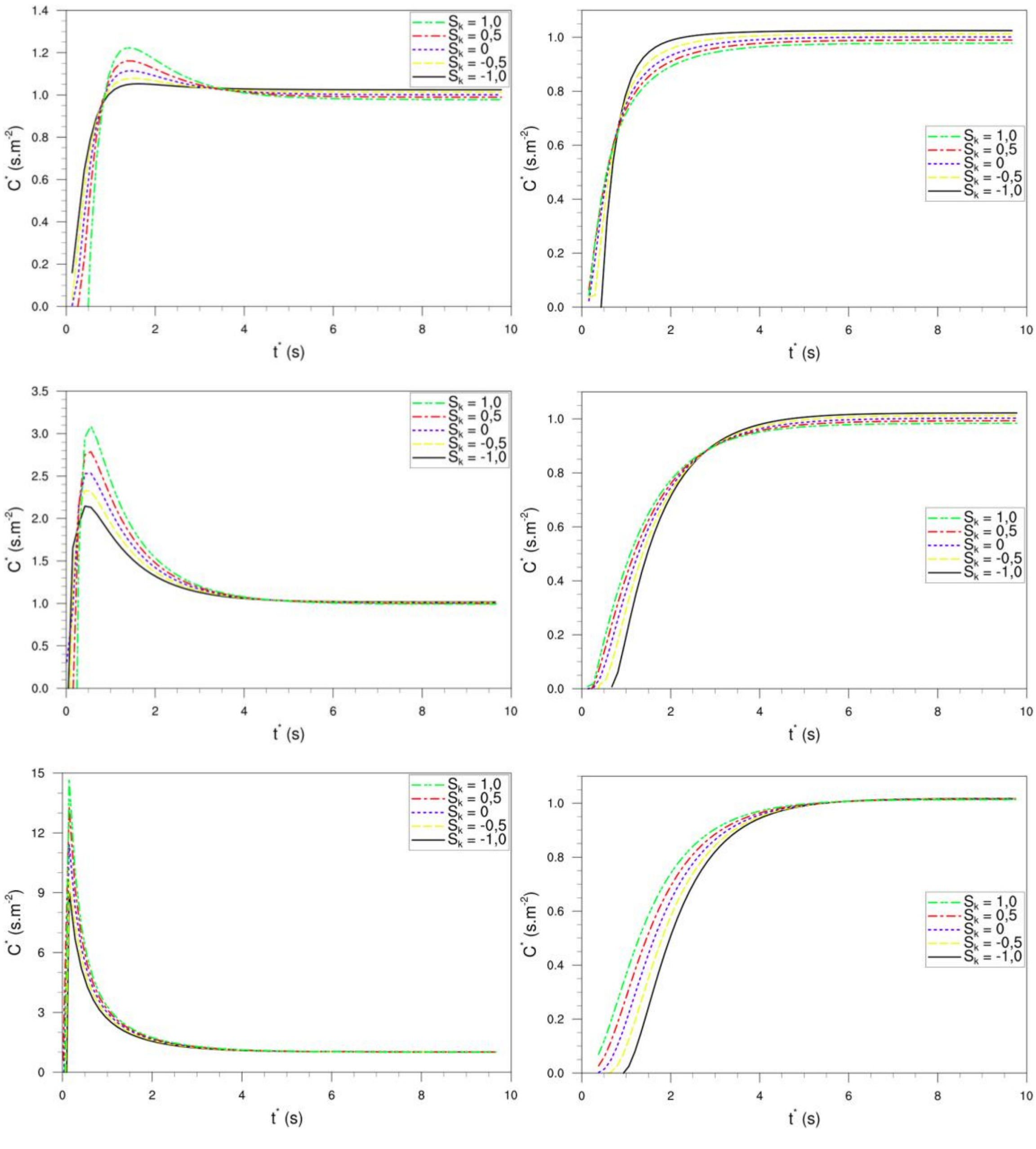

Figura 3 – Concentrações em função do tempo para diferentes assimetrias em $z^* = 0,001$ (gráficos a esquerda) e $z^* = 0,925$ (gráficos a direita) considerando as alturas de fonte $H_s^* = 0,37$; $H_s^* = 0,14$ e $H_s^* = 0,03$, respectivamente, considerando os dados do experimento de Copenhagen.

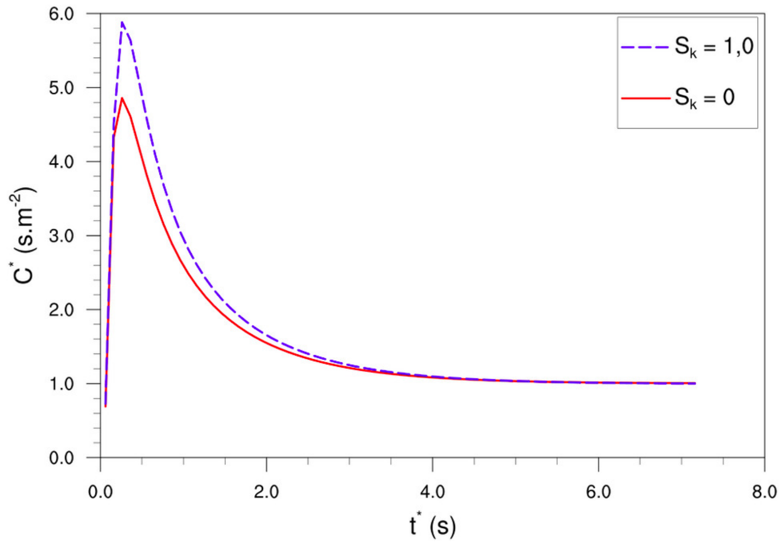

Figura 4 – Concentração de poluente adimensional superfícial em função da distância adimensional comparando os resultados obtidos com a GILTT com dados do experimento de Tanque.

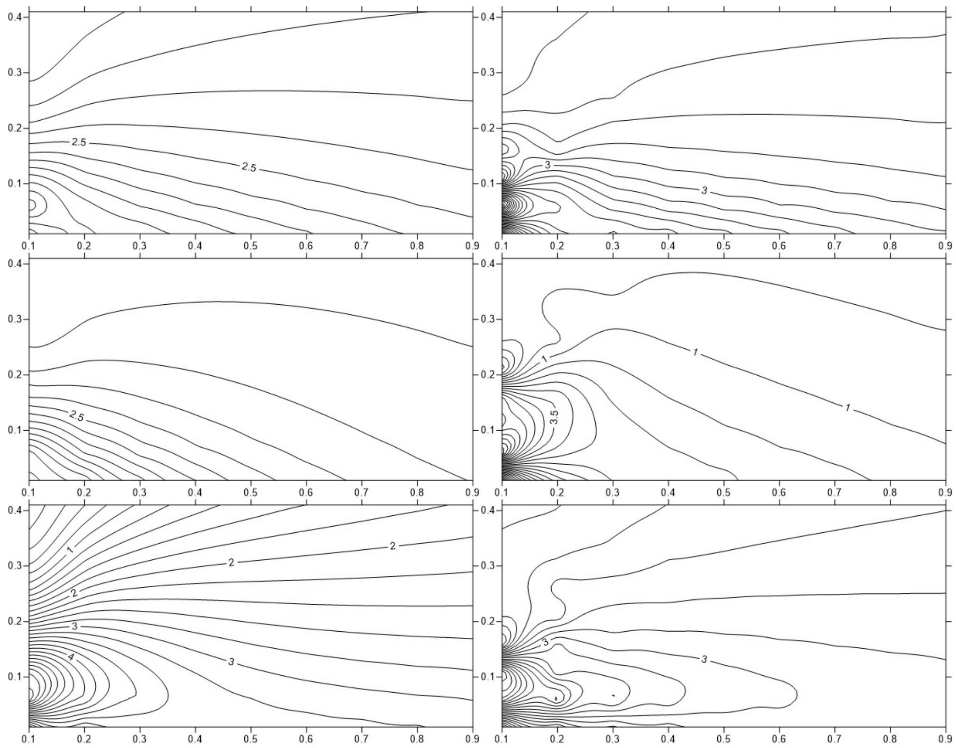

Figura 5 – Concentrações preditas pelo presente modelo não considerando o termo de assimetria (figuras da esquerda) e considerando o termo de assimetria (figuras da direita), com w= 0,5; 0 e -0,5 respectivamente, considerando os dados do experimento de Tanque.

6 CONCLUSÃO

A concentração de poluentes é simulada de forma satisfatória considerando e não considerando o termo de fechamento não local da turbulência. A concentração de poluentes apresenta um pico no tempo inicial e depois diminui e fica homogênea. O modelo simula o pico da concentração de poluentes conforme descrito na literatura.

Observou-se um comportamento ascendente na pluma de poluentes quando a componente w do vento é positiva e um comportamento descendente quando a componente w do vento é negativa. O efeito do termo de fechamento não local é deslocar o pico de concentração da fonte e até mesmo deslocar núcleos de concentração da pluma de poluentes.

O resultado das simulações mostraram uma pequena influência do termo de contragradiente na determinação da concentração de poluentes, observada de forma mais expressiva na CLC.

Para as três alturas da fonte área analisadas, a concentração tendeu a se homogeneizar com o passar do tempo. Para alturas próximas do topo da CLC a influência da assimetria aumenta à medida que a altura da fonte diminui e, quanto mais alta é a fonte, mais rápido ocorre a homogeneização da concentração.

O objetivo deste trabalho foi atingido, uma vez que o método apresentou solução analítica para o problema de dispersão de poluentes em uma dimensão. Assim, se completou o conjunto multidimensional de soluções obtidas pelo método GILTT considerando o termo de contragradiente.

REFERÊNCIAS

ANFOSSI, D. **Dispersão lagrangeana na camada limite planetária**. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2005.

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

BERLYAND, M. **Contemporary problems of atmospheric diffusion and polution of the atmosphere.** Raleigh, NC, USA: translated version by NERC, USEPA, 1975.

BULIGON, L.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Uma solução semi-analítica da dispersão de poluentes com a equação do telégrafo e fluxo contra-gradiente. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.21, p.77–85, 2006.

BULIGON, L.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; DEGRAZIA, G. solução da Equação de Difusão Unidimensional Transiente para o estudo da Dispersão de Poluente na Camada Limite Planetária. **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2004.

BUSKE, D. **Solução GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana.** 2008. Tese de Doutorado — Universidade Federal do Rio Grande do Sul., Porto Alegre.

BUSKE, D. et al. Modelo analítico tridimensional de dispersão de poluentes na camada limite atmosférica. **Ciência e Natura**, v.1, p.115–118, 2011.

BUSKE, D. et al. **A closed form solution for pollutant dispersion in atmosphere considering nonlocal closure of the turbulent diffusion.** WIT Press: Air Pollution XX, Editors: J.W.S. Longhurst and C.A. Brebbia, 2012a. p.59–69.

BUSKE, D. et al. **Pollutant Dispersion in the Atmosphere**: A Solution Considering Nonlocal Closure of Turbulent Diffusion. Birkhauser, Basel: Integral Methods in Science and Engineering: Theoretical and Computational Advances. Organized by: C.Constanda, A.Kirsch., 2015. p.99–110.

BUSKE, D. et al. A new segmented plume approach for pollutant dispersion modelling. **International Journal of Development Research**, v.10, p.42644–42653, 2020.

BUSKE, D.; QUADROS, R.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Simulação analítica da dispersão de poluentes atmosféricos tridimensional. **Ciência e Natura**, v.1, p.29–32, 2009.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D. A 3d analytical solution of the advection-diffusion equation applied to pollutant dispersion in atmosphere. **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 2009.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; BODMANN, B. **An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach.** Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; S. Potapenko., 2008. p.27–36.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.41, p.5496–5501, 2007a.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. An analytical solution of the advection-diffusion equation considering nolocal turbulence closure. **Environmental Fluid Mechanics(Dordrecht)**, v.7, p.43–54, 2007b.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. **An Analytical Solution for the Transient Two-dimensional Advective-Diffusion Equation with Non-Fickian Closure in Cartesian Geometry by the General Integral Transform Technique.** Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; M.E. Pèrez., 2010. v.2, p.33–40.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; SEGATTO, C.; QUADROS, R. **A general analytical solution of the advection-diffusion equation for fickian closure.** Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; P. Harris, 2011. p.25–34.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; TIRABASSI, T.; BODMANN, B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. **Journal of Environmental Protection**, v.3, p.1124–1134, 2012b.

CARVALHO, J. **Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva**. 1996. Mestrado em Meteorologia — Universidade de São Paulo, São Paulo.

CATALDI, M.; MARGALHO, M.; VELLOSO, M.; PIMENTEL, L. Estudo do transporte de poluentes na regão da camada de superfície sob diversas condições de estabilidade atmosférica. **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2000.

CHRYSIKOPOULOS, C.; HILDEMANN, L.; ROBERTS, P. A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.747–757, 1992.

COSTA, C. **Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**. 2004. Mestrado em Matemática Aplicada Ambiental — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

COSTA, C.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Solução da equação de difusão-advecção com o termo de contra-gradiente no fechamento da turbulência para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. **Ciência e Natura**, v.1, p.111–114, 2003.

COSTA, C.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na camada limite convectiva. **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2004.

COSTA, C.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. **A closed-form formulation for pollutant dispersion in the atmosphere.** Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: computational Methods, Organized by: C. Constanda; M.E. Pèrez., 2010. v.2, p.141–150.

COSTA, C.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M.; MOREIRA, D. A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere. **Journal of Engineering Mathematics**, v.74, p.159–173, 2012.

COSTA, C.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.40, p.5659–5669, 2006.

COTTA, R. **Integral transforms in computational heat and fluid flow.** Boca Raton, Flórida: CRC Press, 1993.

COTTA, R.; BARROS, F. Integral transforms for three-dimensional steady turbulent dispersion in rivers and channels. **Applied Mathematical Modelling**, v.31, p.2719–2732, 2007.

COTTA, R.; MIKHAYLOV, M. **Heat conduction Lumped Analysis, Integral Trandforms, Symbolic Computation.** England: Baffins Lane, Chinchester, England: John Wiley Sons, 1997.

DEARDOFF, J. The countergradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. **journal of the Atmospheric Sciences**, v.23, p.503–506, 1966.

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

DEARDOFF, J.; WILLIS, G. A parameterization of diffusion into the mixed layer. **Journal of Applied Meteorology**, v.14, p.1451–1458, 1975.

DEGRAZIA, G.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, v.40(7), p.1233–1240, 2001.

DEGRAZIA, G.; RIZZA, U.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T. Validation of a New Turbulent Parameterization for Dispersion Models in Convective Conditions. **Boundary layer Meteorology**, v.85, p.243–254, 1997.

DEGRAZIA, G.; VELHO, H.; CARVALHO, J. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contributions to Atmospheric Physics**, p.57–64, 1997.

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

ERTEL, H. Der vertikale turbulenz-wärmestrom in der atmosphäre. **Meteorologische Zeitschrift**, v.59, p.250–253, 1942.

FAVERO, C. et al. Modelo de pluma segmento com velocidades estocásticas para dispersão atmosférica em condições de vento fraco. **Ciência e Natura**, v.42, p.e11, 2020.

FERREIRA NETO, P. **Desenvolvimento de um modelo de dispersão de poluentes para o estudo de impacto ambiental em fontes isoladas.** 2003. Mestrado em Engenharia Ambiental — Universidade Luterana do Brasil, Canoas.

FIEDLER, B.; MOENG, C. A practical integral closure model for mean vertical transport of a scalar in a convective boundary layer. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.42(4), p.359–363, 1985.

GONCALVES, G.; BUSKE, D.; QUADROS, R.; WEYMAR, G. A new approach to solve the time-dependent three-dimensional advection-diffusion equation applied to model air pollution dispersion in the planetary boundary layer. **International Journal of Development research**, v.8, p.20535–20543, 2018.

GRYNING, S. **Elevated source SF6 - tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**. Roskilde, Denmark: Risoe National Laboratory, 1981. (RISOE-R-446).

GRYNING, S.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, v.23(4), p.651–660, 1984.

GUERRERO, J. et al. A unified analytical solution of the steady- state atmospheric diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.55, p.201–212, 2012.

HAMBA, F. A modified K model for chemically reactive species in the planetary boundary layer. **Journal of Geophysical Research**, v.98(3), p.5173–5182, 1993.

HOLTSLAG, A.; BOVILLE, B. Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model. **Journal of Climate**, v.6, p.1825–1842, 1993.

HOLTSLAG, A.; MOENG, C. Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.48, p.1690–1698, 1991.

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.

LAMB, R. A numerical study of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1297–1304, 1978.

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

MANGIA, C. et al. Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.67–76, 2002.

MIKHAYLOV, M.; OZISIK. **Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**. New York: New York: John Wiley Sons, 1984.

MOREIRA, D.; CARVALHO, J.; TIRABASSI, T. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. **Atmospheric Environment**, v.39(20), p.3643–3650, 2005.

MOREIRA, D. et al. Simulation of the dispersion of pollutants considering nonlocal effects in the solution of the advection-diffusion equation. **27th NATO/CCMS - International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application**, 2004.

MOREIRA, D. et al. Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. **Water, Air and Soil Pollution**, v.177, p.411–439, 2006.

MOREIRA, D.; FERREIRA NETO, P.; CARVALHO, J. Analytical solution of the Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation. **Environmental Modelling and Software**, v.20, p.1159–1165, 2005.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; BUSKE, D. **On the GILTT formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer.** Boca Raton, Flórida: Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications, Organized by: D.Moreira; M.T.Vilhena, CRC Press., 2009. p.179–202.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL. **Atmospheric Environment**, v.40, p.3186–3194, 2006.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, p.1–17, 2009.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; CARVALHO, J.; DEGRAZIA, G. Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion. **Environmental Modelling and Software**, v.20 (10), p.1347–1351, 2004.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, C. 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, 2005.

MOURA, A. **Solução analítica para dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável.** 1995. Mestrado em Engenharia Mecânica — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

MOURA, A.; VILHENA, M.; DEGRAZIA, G. Solução analítica para a dispersão vertial turbulenta em uma camada limite estável. **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 1995.

NIEUWSTADT, F. An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. , v.14, p.1361–1364, 1980.

NIEUWSTADT, F.; HAAN, B. 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.

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

PIRES, C. **Um estudo analítico da dispersão de contaminantes abandonados por fontes aéreas em uma camada limite convectiva.** 1996. Mestrado em Sensoriamento Remoto — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

PRIESTLY, C.; SWINBANK, W. Vertical transport of heat by turbulence in the atmosphere. **Proceedings of the Royal Society of London**, p.543–561, 1947.

RIBEIRO, M.; CATALDI, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Estudo da dispersão de poluentes na atmosfera via transformação integral. **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2000.

ROBERTS, O. The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. **Proceedings of the Royal Society of London**, v.104, p.640–648, 1923.

ROBSON, R.; MAYOCCHI, C. A simple model of coutergradient flow. **Physics of Fluids**, v.6, p.1952–1964, 1994.

ROODE, S. de; JONKER, H.; DUYNKERKE, P.; STEVENS, B. Countergradient fluxes of conserved variables in the clear convective and stratocumulus-topped boundary-layer: the role of the entrainment flux. **Boundary-Layer Meteorology**, v.112, p.179–196, 2004.

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

RUI, K. **Influência da Velocidade de Deposição no Solo na Modelagem Multidimensional da Dispersão de Poluentes Atmosféricos.** 2016. Mestrado em Modelagem Matemática — Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

SCRIVEN R.AND FISHER, B. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout-ii. the effect of turbulent diffusion. **Atmospheric Environment**, v.9, p.59–65, 1975.

SEINFELD, J.; PANDIS, S. **Atmospheric chemistry and physics of air pollution.** New York: John Wiley Sons., 1997.

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

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo eulariano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos. **Ciência e Natura**, v.1, p.103–106, 2003.

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

TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. 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.

TIRABASSI, T. et al. 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.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. A practical model for the dispersion of skewed. **Journal of Applied Meteorology**, v.34, p.989–993, 1995.

ULDEN, A. van. simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2125–2129, 1978.

ULKE, A. G. New turbulent parameterisation for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.34, p.1029–1042, 2000.

VAN DOP, H.; VERVER, G. Countergradient transport revisited. **Journal of Atmospheric Science**, v.58, p.2240–2247, 2001.

VELLOSO, M.; STORCH, R.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Estudo do transporte de poluentes na camada limite atmosférica a partir de dois modelos algébricos para o coeficiente de difusão turbulenta e transformação integral. **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2004.

VENZKE, C. **Simulação da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente na CLC.** 2015. Mestrado em Modelagem Matemática — Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

VILHENA, M.; BUSKE, D.; DEGRAZIA, G.; QUADROS, R. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. **Physics A: Statistical Mechanics and its Applications**, v.391, p.2576–2584, 2012.

VILHENA, M.; COSTA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. A semi-analytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Atmospheric Research**, v.90, p.63–69, 2008.

VILHENA, M. et al. An analytical air pollution model: Development and evalution. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315–320, 1998.

WEIL, J.; SULLIVAN, P.; MOENG, C. The use of large-eddy simulations in Lagrangian particle dispersion models. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.61, p.2877–2887, 2004.

WEYMAR, G.; BUSKE, D.; QUADROS, R.; GONCALVES, G. Application of a new approach in an analytical model to simulate the dispersion of a radioactive pollutant. **International Journal of Development Research**, v.8, p.24738–24738, 2018.

WILLIS, G.; DEARDORFF, J. A laboratory study of dispersion from an elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1305–1312, 1978.

WORTMANN, S.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, p.2171–2178, 2005.

WYNGAARD, J.; BROST, R. Top-down botton-up diffusion of a scalar in the convective boundary layer. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.41, p.102–112, 1984.

WYNGAARD, J. C.; WEIL, J. C. Transport asymmetry in skewed turbulence. **Phys.Fluids A**, v.3, p.155–162, 1991.

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

ZILITINKEVICH, S.; GRYANIK, V.; LYKOSSOV, V.; MIRONOV, D. Third-order transport and nonlocal turbulence closures for convective boundary layers. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.56, p.3463–3477, 1999.