

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS

Centro de Pesquisas e Previsões Meteorológicas -

CPPMet

Programa de Pós-Graduação em Meteorologia



Dissertação

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes na
atmosfera em condições de vento fraco**

VILIAM CARDOSO DA SILVEIRA

Pelotas, 2013

VILIAM CARDOSO DA SILVEIRA

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes na
atmosfera em condições de vento fraco**

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em Meteorolo-
gia da Universidade Federal de Pelotas, como
requisito parcial para a obtenção do grau de
Mestre em Meteorologia

Orientador: Prof^a. Dr^a. Daniela Buske

Pelotas, 2013

Dados de catalogação na fonte:
Ubirajara Buddin Cruz – CRB-10/901
Biblioteca de Ciência & Tecnologia – UFPel

S587s Silveira, Viliam Cardoso da

Simulação tridimensional da dispersão de poluentes na atmosfera em condições de vento fraco / Viliam Cardoso da Silveira. – Pelotas, 2013. – 66 f. ; il. – Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Meteorologia. Universidade Federal de Pelotas. Centro de Pesquisas e Previsões Meteorológicas - CPPMet. Pelotas, 2013. – Orientador Daniela Buske.

1. Poluição do ar. 2. Dispersão de poluentes. 3. Transformadas integrais. 4. Solução analítica. 5. Equação de advecção-difusão. I. Buske, Daniela. II. Título.

CDD: 551.518

Banca examinadora:

Prof. Dr. Claudio Zen Petersen

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, o qual me possibilitou estar vivo, para assim eu concluir este trabalho;

A todos que de uma forma ou outra contribuíram para a realização dessa dissertação, em especial aos meus pais, Viturino e Dalmarcia, minha vó, Leda e minha tia (madrinha) e tio, Mara e João, que me acolheram desde o início da faculdade;

A minha orientadora Daniela Buske pela ótima orientação e conhecimento transmitido ao longo da faculdade e mestrado. Ao professor Jonas Carvalho pela orientação ao longo da graduação e ao professor Régis de Quadros pelo apoio ao longo da realização desta dissertação;

Por fim, agradeço a CAPES pelo suporte financeiro, sem ele se tornaria mais difícil o desenvolvimento desse trabalho.

RESUMO

SILVEIRA, Viliam Cardoso da. **Simulação tridimensional da dispersão de poluentes na atmosfera em condições de vento fraco**. 2013. 66 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Meteorologia. Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

A importância da modelagem da dispersão de poluentes em condições de vento fraco se deve ao fato de que tais condições ocorrem frequentemente e são cruciais para episódios de poluição do ar. Em tais condições, os poluentes não são capazes de viajarem para longe da fonte e assim as áreas mais próximas da fonte são as mais afetadas. A abordagem clássica baseada em modelos convencionais, tais como *puff/pluma* gaussianos ou teoria-K com suposições razoáveis, são conhecidos por trabalharem razoavelmente bem durante a maioria dos regimes meteorológicos, exceto para condições de vento fraco e variável. As razões para isso são: a difusão na direção do vento é negligenciada com relação a advecção; a concentração é inversamente proporcional a velocidade do vento; as condições médias são estacionárias e há uma falta de estimativas apropriadas dos parâmetros de dispersão em condições de vento fraco. O presente estudo propõe um modelo matemático para a dispersão de contaminantes sob condições de vento fraco que leva em conta a difusão ao longo do vento. A solução da equação de advecção-difusão para essas condições é obtida aplicando o método 3D-GILTT (*Three-Dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique*). O estudo sugere que a inclusão da difusão longitudinal, importante para a difusão de curta distância de uma fonte pontual contínua em condições de vento fraco, pode fornecer uma melhor descrição do transporte turbulento dos contaminantes atmosféricos.

Palavras-chave: Poluição do ar, Dispersão de poluentes, Transformadas integrais, Solução analítica, Equação de advecção-difusão.

ABSTRACT

SILVEIRA, Viliam Cardoso da. **Tridimensional simulation of pollutant dispersion in atmosphere under low wind conditions**. 2013. 66 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Meteorologia. Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

The importance of dispersion modeling in low wind conditions lies in the fact that such conditions occur frequently and are crucial for air pollution episodes. In such conditions, the pollutants are not able to travel far and thus the near-source areas are affected the most. The classical approach based on conventional models, such as Gaussian puff/plume or the K-theory with suitable assumptions, are known to work reasonably well during most meteorological regimes, except for weak and variable wind conditions. The reasons for that are: the down-wind diffusion is neglected with respect to advection; the concentration is inversely proportional to wind speed; the average conditions are stationary and there is a lack of appropriate estimates of dispersion parameters in low wind conditions. The present study proposes a mathematical model for dispersion of contaminants in low winds that takes into account the along-wind diffusion. The solution of the advection-diffusion equation for these conditions is obtained applying the 3D-GILTT method (Three-Dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique). The study suggests that the inclusion of the longitudinal diffusion, important at short distance diffusion from a continuous point source in low wind conditions, can improve the description of the turbulent transport of atmospheric contaminants.

Keywords: Air pollution, pollutants dispersion, integral transforms, analytical solution, advection-diffusion equation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Divisão da troposfera (STULL, 1988)	23
Figura 2	Evolução temporal da CLP (STULL, 1988)	23
Figura 3	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento IIT Delhi utilizando perfil de vento potência	46
Figura 4	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento IIT Delhi utilizando perfil de vento similaridade	47
Figura 5	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL utilizando perfil de vento potência	50
Figura 6	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL com $u < 1m/s$ utilizando perfil de vento potência	51
Figura 7	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL utilizando perfil de vento similaridade	51
Figura 8	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL com $u < 1m/s$ utilizando perfil de vento similaridade	52
Figura 9	Isolinhas de concentrações bidimensionais adimensionais ($C^* = \bar{c}\bar{u}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) para diferentes velocidades verticais do vento e condições estacionárias: a) $\bar{w}=-0,5$; b) $\bar{w}=0$; c) $\bar{w}=0,5$	54
Figura 10	Isolinhas de concentrações tridimensionais adimensionais preditas pelo presente modelo ($C^* = \bar{c}\bar{u}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) para diferentes velocidades verticais do vento e condições estacionárias: a) $\bar{w}=-0,5$; b) $\bar{w}=0$; c) $\bar{w}=0,5$	55

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Parâmetros meteorológicos observados no experimento IIT Delhi.	43
Tabela 2	Parâmetros meteorológicos observado e previstos no experimento INEL.	44
Tabela 3	Concentrações observadas e preditas pelo método 3D-GILTT, utilizando perfil de vento potência e similaridade para o experimento instável IIT Delhi.	47
Tabela 4	Concentrações observadas e preditas pelo método 3D-GILTT, utilizando perfil de vento potência e similaridade para o experimento estável INEL.	48
Tabela 5	Comparação estatística entre os resultados do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento IIT Delhi sob condições atmosféricas instáveis, utilizando perfil de vento potência, com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação e perfil de vento similaridade, com outros modelos encontrados na literatura.	50
Tabela 6	Comparação estatística entre os resultados do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento INEL sob condições atmosféricas estáveis, utilizando perfil de vento potência, com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação e perfil de vento similaridade, com outros modelos encontrados na literatura.	53
Tabela 7	Comparação estatística entre os resultados do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento INEL com $u < 1m/s$ sob condições atmosféricas estáveis, utilizando perfil de vento potência, com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação e perfil de vento similaridade, com outros modelos encontrados na literatura.	56

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>CLA</i>	Camada Limite Atmosférica
<i>CLP</i>	Camada Limite Planetária
<i>CLE</i>	Camada Limite Estável
<i>CLC</i>	Camada Limite Convectiva
<i>GITT</i>	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>
<i>GILTT</i>	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
<i>ADMM</i>	<i>Advection Diffusion Multilayer Method</i>
<i>GIADMT</i>	<i>Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique</i>
<i>NMSE</i>	erro quadrático médio normalizado
<i>COR</i>	Coefficiente de correlação
<i>FA2</i>	fator de dois
<i>FB</i>	fração de inclinação
<i>FS</i>	desvio fracional padrão
<i>B, R, S</i>	matrizes de coeficientes do problema transformado de segunda ordem
<i>C</i>	concentração de um contaminante passivo
$\bar{c}$	concentração média de um contaminante passivo
$\bar{c}_n$	variável dependente da expansão em série do problema tridimensional
$\bar{c}_{n,i}$	variável dependente da expansão em série do problema bidimensional
c_o	concentrações observadas experimentalmente
c_p	concentrações preditas pelo modelo
<i>D</i>	matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem
<i>X</i>	matriz diagonal dos autovetores do problema transformado de primeira ordem
X^{-1}	matriz diagonal inversa dos autovetores do problema transformado de primeira ordem
<i>F</i>	matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $F = B^{-1}D$

G	matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $G = B^{-1}E$
$(f_m^*)_i$	frequência normalizada do pico espectral
h	altura da camada limite planetária
H	matriz bloco do problema transformado de primeira ordem
H_s	altura da fonte
I	matriz identidade
k	constante de Von-Kármán
K_α	coeficiente de difusão
α	indica as direções x , y e z
K_x	coeficiente de difusão na direção x
K_y	coeficiente de difusão na direção y
K_z	coeficiente de difusão na direção z
L	comprimento de Monin-Obukov
L_x	distância para longe da fonte no eixo x
L_y	distância para longe da fonte no eixo y
N	número de autovalores no somatório da fórmula da inversa da GILTT
Q	intensidade da fonte
SF_6	hexafluoreto de enxofre
U	velocidade instantânea do vento na direção x (m/s)
$\bar{u}$	componente do vento médio orientado na direção x (m/s)
u'	componente turbulenta do vento na direção x (m/s)
u_*	velocidade de fricção (m/s)
V	velocidade instantânea do vento na direção y (m/s)
$\bar{v}$	componente do vento médio orientado na direção y (m/s)
v'	componente turbulenta do vento na direção y (m/s)
W	velocidade instantânea do vento na direção z (m/s)
$\bar{w}$	componente do vento médio orientado na direção z (m/s)
w'	componente turbulenta do vento na direção z (m/s)
w_*	velocidade convectiva (m/s)
$\overline{u'c'}$	fluxo turbulento do contaminante nas direções longitudinal (g/sm^2)
$\overline{v'c'}$	fluxo turbulento do contaminante nas direções lateral (g/sm^2)
$\overline{w'c'}$	fluxo turbulento do contaminante nas direções vertical (g/sm^2)
x	distância longitudinal da fonte (m)

y	distância lateral da fonte (m)
X^*	distância adimensional da fonte
$Y(x)$	vetor de incógnitas do problema transformado de segunda ordem
$Z(x)$	vetor de incógnitas do problema transformado de primeira ordem
$G(x)$	matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem após inversão de Laplace analítica
z	altura acima da superfície (m)
δ	função delta de Dirac
λ_n	autovalor do problema de Sturm-Liouville
γ_i	autovalor do problema de Sturm-Liouville
ψ	taxa de dissipação molecular da velocidade turbulenta
σ_y	parâmetro de dispersão lateral
σ_o	desvio padrão observado
σ_p	desvio padrão predito
ξ	vetor representado por $X^{-1}Z(0)$
ζ_n	autofunção do problema de Sturm-Liouville
ζ_i	autofunção do problema de Sturm-Liouville

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
3	METEOROLOGIA DA CAMADA LIMITE	22
3.1	Introdução	22
3.2	Energia Cinética turbulenta	24
3.3	Velocidade de fricção	25
3.4	Velocidade Convectiva	25
3.5	Comprimento de Monin-Obukhov	26
3.6	Meandro do vento	26
4	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	28
4.1	Solução da equação de advecção-difusão tridimensional pelo método 3D-GILTT	28
5	DADOS PARA VALIDAÇÃO DO MODELO	40
5.1	Parametrizações da turbulência	40
5.2	Perfis do vento	42
5.3	Dados experimentais	43
5.3.1	Experimento IIT Delhi (Índia)	43
5.3.2	Experimento INEL (USA)	43
5.4	Índices estatísticos	44
6	RESULTADOS	46
7	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	57
	REFERÊNCIAS	59

1 INTRODUÇÃO

Sempre que estamos interessados em trabalhar e estudar modelos de poluição do ar e dispersão de poluentes, temos que antes de tudo levar em conta a atmosfera em que o transporte e difusão de poluentes, bem como seus processos de remoção e transformação química ocorrem. Precisamos inicialmente entender um pouco de meteorologia, ou seja, a meteorologia pode ser entendida como o estudo da estrutura, termodinâmica e dinâmica da atmosfera, particularmente das partes mais baixas da atmosfera em que a maioria dos fenômenos e processos do tempo ocorrem. Como a dispersão de poluentes na atmosfera está intimamente ligada a meteorologia, devemos sempre ter em mente alguns conceitos fundamentais de meteorologia, tais como: estrutura e composição química da atmosfera, termodinâmica básica e variáveis de estado, conceito de estabilidade estática, equações fundamentais de conservação de energia, massa e *momentum*, sendo que sem esses conceitos o entendimento da modelagem da dispersão de poluentes se torna mais difícil.

Tradicionalmente, os movimentos atmosféricos e fenômenos relacionados foram 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). O transporte e difusão atmosférica são governados pelos movimentos atmosféricos cobrindo todo o intervalo de escalas. Os poluentes liberados da exaustão de carros ou de chaminé de uma fábrica são primeiro dispersados pelos movimentos de microescala na camada limite atmosférica, subsequentemente, seu transporte e difusão são influenciados pela circulação de mesoescala associado com ilhas de calor urbano, brisa do continente o do mar, brisa de vale e montanha, tempestades e outros sistemas de mesoescala. A micrometeorologia que é o estudo de fenômenos de pequena escala como já mencionado, é o foco principal desse trabalho.

A dispersão de poluentes de curto intervalo de fontes perto da superfície é essencialmente determinada pelos movimentos e processos de pequena escala ocorrendo nas camadas mais baixas da atmosfera, chamada camada limite planetária (CLP) ou camada limite atmosférica (CLA). As propriedades físicas e térmicas da superfície subjacente, juntamente com a dinâmica e termodinâmica da baixa atmosfera, determina a estrutura da CLP, ou seja, profundidade, distribuições de vento e temperatura, transporte, mistura, propriedades de difusão e dissipação de energia. Variações na profundidade e estrutura da camada limite frequentemente ocorrem como resultado da evolução e passagem de sistemas de mesoescala e sistemas de escala sinótica. Geralmente, a

camada limite torna-se mais fina sobre a influência da subsidência em grande escala e divergência horizontal em baixos níveis associados com a passagem de um sistema de alta pressão (anticiclone). Por outro lado, a CLP pode crescer para grandes profundidades e fundir-se com nuvens profundas em condições perturbadas do tempo que estão associadas com sistemas de baixa pressão.

Existem duas abordagens para representar o fluxo e difusão em um fluido (ambiente atmosférico, por exemplo), ou seja, a abordagem Euleriana e a Lagrangeana. Medidas de instrumentos ou amostradores localizados em locais fixos no solo, mastros ou torres são alguns dos exemplos de medidas Eulerianas (referencial fixo), enquanto aquelas de veículos, barcos e aeronaves são exemplos de medidas Lagrangeanas (referencial movel). A abordagem Euleriana é melhor para descrever o fluxo, usando modelos teóricos e numéricos, porque as equações do movimento Euleriano são muito mais simples do que aquelas do movimento Lagrangeano. Na presente dissertação usaremos a abordagem Euleriana.

Historicamente a poluição do ar veio a ser tratada como um sério problema para grandes cidades e centros comerciais. Com o advento da revolução industrial e depois com a chegada dos automóveis, a qualidade do ar da maioria das grandes áreas urbanas e industriais caíram expressivamente. Os esforços iniciais no controle da poluição do ar foram principalmente direcionados para a melhoria da qualidade do ar nas grandes áreas urbanas e industriais.

A poluição atmosférica é ocasionada por efeitos naturais (por exemplo, emissão de SO₂ por um vulcão) ou antropogênicos (por exemplo, emissões industriais e automotivas). Enquanto os níveis de poluição natural podem ser considerados constantes no tempo, os níveis de poluição ocasionada pelo homem estão em contínuo aumento. Enquanto que sobre poluição natural não existe em geral, nenhum controle, a poluição antropogênica pode ser controlada. São muitos os problemas que a poluição do ar, produzida por atividades antropogênicas, ocasiona para o equilíbrio ecológico. Os gases e poeiras abandonados na atmosfera provocam efeitos negativos nas proximidades das fontes (deteriorando a qualidade do ar em regiões urbanas, agrícolas e industriais), a média ou longa distância (chuva ácida, transporte transfronteiriço) e em escala global (buraco na camada de ozônio). Se as fontes poluidoras são numerosas ou de longo tempo de emissão ou, ainda se os poluentes são suficientemente tóxicos, os prejuízos ocasionados ao equilíbrio ecológico serão certamente consideráveis. Devido aos problemas ocasionados pela poluição do ar, é necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes para prever as possíveis consequências do impacto ambiental sobre os diversos ecossistemas.

Na década de cinquenta foram realizadas as primeiras medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e parâmetros meteorológicos na tentativa de encontrar relações empíricas entre difusão e fatores meteorológicos, onde destacamos os descritos em (BARAD, 1958a)(BARAD, 1958b)(GRYNING, 1981). Ambos os experimentos determinaram o campo de concentração na superfície terrestre a uma distância de cinquenta a seis mil metros a partir da fonte. Atualmente os estudos se expandiram e muitos estão relacionados a dispersão de poluentes baseados em experimentos de campo (Copenhague (GRYNING et al., 1987), Kinkaid (HANNA; PAINE, 1989), Prairie-Grass (BARAD, 1958a)(BARAD, 1958b), Hanford (DORAN; HORST, 1985), IIT Delhi

(SHARAN; SINGH; YADAV, 1996)(SHARAN et al., 1996)(SHARAN; YADAV; MODANI, 2002), INEL (SAGENDORF; DICKSON, 1974), Lilleström (SIVERSTEN; BÖHLER, 1985), entre outros), mesmo assim esta é uma área que ainda precisa ser bastante estudada, para assim podermos simular cenários mais realísticos de poluição do ar. As observações de campo são muitas vezes dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos.

Os modelos matemáticos são um instrumento particularmente útil no entendimento dos fenômenos que controlam o transporte, a dispersão e a transformação físico-química dos poluentes imersos na atmosfera. Estes modelos que permitem uma validação do nível observado de poluentes e a causa efeito das emissões podem ser utilizados para evitar eventos críticos de poluição, discriminar os efeitos de várias fontes e de vários poluentes, estimar o impacto de novas fontes, e da mesma forma validar o estado da qualidade do ar em um determinado lugar.

Os modelos de difusão mais conhecidos são os modelos Gaussianos, sendo extensivamente usados na avaliação de fontes de poluição do ar locais e qualidade do ar urbano, particularmente para aplicações regulatórias. A principal justificativa para o uso de modelos Gaussianos de difusão em aplicações regulatórias vem de sua avaliação e validação com dados de difusão experimentais. Outras razões para utilização dos modelos Gaussianos de difusão em aplicações regulatórias são que esses modelos são consistentes com a natureza aleatória da turbulência e são computacionalmente mais baratos. Esses modelos são analíticos mas com coeficientes constantes.

Atualmente muitos estudos sobre a dispersão de poluentes são realizados tendo como base a condição de vento forte ou moderado, mas uma das situações mais críticas e que ocorrem frequentemente é a condição de vento fraco ($< 2 \text{ m/s}$). Sob este aspecto alguns trabalhos já foram produzidos dando considerável ênfase a processos atmosféricos tais como turbulência, dispersão e estrutura da camada limite atmosférica em situações de vento fraco. Existem dois aspectos fundamentais para o interesse em tal estudo (SHARAN; YADAV, 1998). O primeiro é a grande ocorrência das condições de vento fraco no mundo inteiro e o segundo faz referência a irregularidade com que ocorre a dispersão de poluentes no ar em tal condição.

A estrutura da Camada Limite Planetária não é adequadamente determinada nas condições de ventos fracos devido aos limitados dados observados existentes. A complexidade da camada limite cresce com a diminuição dos ventos e aumenta o grau de instabilidade atmosférica. Além disso, instrumentos de medidas convencionais não funcionam adequadamente abaixo de algumas velocidades críticas e as tradicionais técnicas de modelagem são inadequadas para trabalhar em condições de ventos fracos (ZANNETTI, 1990). Nesta situação, a pluma de poluentes não é transportada a longas distâncias e, assim, as áreas próximas às fontes são as mais afetadas. Por esta razão, na modelagem da dispersão em condições de vento fraco, o domínio de interesse permanece próximo a fonte. Desta forma, durante a ocorrência de ventos fracos o mecanismo de difusão longitudinal precisa ser considerado.

Motivados pela modelagem da dispersão de poluentes em condições de vento fraco ($< 2 \text{ m/s}$) (BUSKE et al., 2007b), iremos aplicar o método 3D-GILTT para avaliar a concentração de poluentes na atmosfera, levando em conta a difusão

longitudinal que não pode ser negligenciada em tais condições. Este será um modelo mais realístico, pois é, tridimensional, totalmente analítico e considera a difusão longitudinal, geralmente desconsiderada nas soluções desse tipo de problema. Do nosso conhecimento, um modelo com estas características e que considera perfil de vento e coeficientes de difusão variáveis não existe na literatura.

Essa dissertação encontra-se estruturada em sete capítulos. No capítulo 2 apresentaremos a revisão bibliográfica, onde falaremos dos principais métodos, de nosso conhecimento, utilizados em problemas de poluição atmosférica. No capítulo 3, fazemos uma descrição da camada limite planetária, apresentaremos a divisão da troposfera e da CLP e faremos uma descrição de cada camada da CLP. No capítulo 4 apresentaremos a formulação matemática para resolver o problema tridimensional da equação de advecção-difusão. No capítulo 5 é apresentada a validação do modelo, apresentaremos as formulações para a parametrização da turbulência, perfis de vento e índices estatísticos, faremos uma descrição dos experimentos utilizados na presente dissertação (IIT Delhi e INEL). No capítulo 6, apresentaremos os resultados numéricos e estatísticos obtidos com o presente modelo, além disso, faremos comparações dos resultados obtidos com o modelo e aqueles observados nos experimentos. Por fim, no último capítulo são apresentadas as conclusões e perspectivas futuras.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A busca de soluções analíticas para solucionar problemas de dispersão é uma linha de pesquisa muito importante, pois todos os parâmetros aparecem explicitamente na solução de tais problemas, facilitando a investigação de suas influências. A seguir apresentam-se algumas soluções analíticas encontradas na literatura da equação de advecção-difusão.

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

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \text{ e } z = \infty \quad (1)$$

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

(ROBERTS, 1923) apresentou uma solução bidimensional para fontes superficiais, onde a velocidade do vento U e o coeficiente difusivo K_z seguem uma lei de potência em função da altura z , ou seja:

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

sendo que m e n variam entre 0 e 1.

(SMITH, 1957) apresentou uma solução para o caso de U constante, mas com o seguinte K_z :

$$K_z = K_o z^\alpha (z_i - z)^\beta \quad (3)$$

(SCRIVEN; FISHER, 1975) também apresentaram uma solução com U constante e K_z dado por:

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

onde z_t é uma altura predeterminada, geralmente a altura da camada limite superficial.

(YEH; HUANG, 1975) e (BERLYAND, 1975) publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com U e K_z seguindo os perfis de potência, para uma atmosfera sem contorno superior, sendo as soluções obtidas em termos das funções de Green. (DEMUTH, 1978) avançou com a solução, dada em termos da

função de Bessel, para uma camada verticalmente limitada. (LIN; HILDEMAN, 1997) estenderam as soluções de (YEH; HUANG, 1975) e (BERLYAND, 1975) para o caso de deposição seca no solo, cujas soluções foram apresentadas em termos de funções de Bessel modificadas.

(VAN ULDEN, 1978) derivou a solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, supondo que U e K_z seguem os perfis de potência.

(NIEUWSTADT, 1980) apresentou uma solução para um problema unidimensional dependente do tempo, utilizando os polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado por:

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

onde G é uma constante.

(KOCH, 1989) apresentou uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, na qual o vento e as difusividades ainda seguem os perfis de potência, incluindo os efeitos de absorção de contaminante pelo solo.

(CHRYSIKOPOULOS; HILDEMAN; ROBERTS, 1992) desenvolveram uma solução tridimensional para uma fonte aérea contínua ao nível do solo com U e K_z dados pela equação (19), incluindo o termo de deposição seca.

A equação de advecção-difusão pode ser resolvida por métodos analíticos e por métodos semi-analíticos. Em 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 parte numericamente.

No nosso conhecimento, os principais métodos utilizados em problemas de poluição atmosférica são: 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), GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique).

O método ADMM vem sendo amplamente utilizado na resolução da equação de advecção-difusão para simular a dispersão de poluentes na atmosfera ((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)) com destaque para (MOREIRA et al., 2006) que faz uma revisão completa desse método. Este método é baseado, na discretização da camada limite planetária em N subcamadas. Em cada subcamada a equação de advecção-difusão é resolvida pela técnica da transformada de Laplace com inversão numérica (solução semi-analítica), sendo dada na forma integral e considerando-se valores médios para os coeficientes de difusão e perfil do vento. Com isso, o problema com coeficiente variável foi substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes (coeficientes médios) acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminante nas interfaces.

O método GITT é analítico-numérico (COTTA, 1993), (COTTA; MIKHAYLOV, 1997) derivado da transformação integral clássica (MIKHAYLOV; ÖZISIK, 1984) que combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão é utili-

zada 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 de equações diferenciais ordinárias (EDO) que depois de 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 numericamente com o auxílio de subrotinas numéricas.

A técnica GITT vem sendo utilizada com grande êxito na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e difusão-advecção ((CATALDI et al., 2000); (RIBEIRO et al., 2000); (STORCH; PIMENTEL, 2003); (VELLOSO et al., 2004); (COTTA; BARROS, 2007); (GUERRERO et al., 2012)). Com ela tem se obtido excelentes resultados não só do ponto de vista de precisão como também sob a ótica de custos computacionais. A principal diferença em resolver a equação de advecção-difusão utilizando a GITT em relação à solução obtida pelo método ADMM (MOREIRA et al., 2006) é que a técnica GITT não necessita de discretização do domínio.

O método GIADMT ((COSTA et al., 2006); (VILHENA et al., 2008); (COSTA; TIRABASSI; VILHENA, 2010); (COSTA et al., 2012)) consiste na transformação do problema tridimensional em um problema bidimensional pela aplicação da GITT na variável y . O problema bidimensional resultante é então resolvido pelo método ADMM (solução semi-analítica).

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 (no caso da GITT esta EDO é resolvida numericamente). 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 de advecção-difusão.

O método GILTT pode ser usado para a solução de problemas em três dimensões utilizando os métodos conhecidos como GILTTG ou 3D-GILTT. No caso do método GILTTG ((WORTMANN et al., 2005); (MOREIRA et al., 2006); (BUSKE et al., 2007a); (TIRABASSI et al., 2008); (BUSKE et al., 2008); (TIRABASSI et al., 2009); (MOREIRA; VILHENA; BUSKE, 2009); (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., 2012); (BUSKE et al., 2012); (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.

A importância do estudo da dispersão de poluentes sob condições de vento fraco vem do fato que tais condições ocorrem muito frequentemente e são de extrema importância para episódios de poluição. Nessas situações os poluentes não conseguem viajar para longe da fonte e as áreas mais próximas da fonte são as mais afetadas.

Vários modelos foram desenvolvidos para descrever os processos de dispersão em condições de vento fraco ((CIRILLO; POLI, 1992); (SHARAN; YADAV, 1998); (OETTL; ALMBAUER; STURM, 2001); (BUSKE et al., 2007b); (MOREIRA et al., 2009)).

(CIRILLO; POLI, 1992) fizeram uma intercomparação entre quatro modelos de difusão semi-empíricos em condições de vento fraco e estáveis. O modelo que considera a difusão ao longo do eixo da pluma a pequenas distâncias da fonte de emissão e o modelo de pluma de Gaussiana foram os que apresentaram os melhores resultados. (SHARAN; 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. Estes coeficientes de difusão foram considerados como uma função linear da distância da fonte. (OETTL; ALMBAUER; STURM, 2001) simularam concentrações ao nível do solo em condições de vento fraco, utilizando modelo de dispersão Lagrangeana com passos de tempo aleatórios e parâmetros de intercorrelação negativa para as componentes do vento horizontal. (BUSKE et al., 2007b) apresentaram um modelo Euleriano onde o problema foi resolvido analiticamente pelo método GILTT em condições de vento fraco. Nessas condições deve ser considerada a difusão longitudinal e coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte.

3 METEOROLOGIA DA CAMADA LIMITE

3.1 Introdução

Geralmente a turbulência consiste de turbilhões de tamanho muito diferentes sobrepostos uns aos outros. As forças relativas a cada um desses turbilhões de diferentes escalas definem o espectro da turbulência. A maioria da turbulência na camada limite é gerada por forçantes na superfície. O aquecimento solar da superfície durante dias ensolarados causa as termas de ar quente que ascendem na camada limite, essas termas são nada mais que grandes turbilhões. O arraste friccional do ar soprando sobre a superfície provoca o desenvolvimento do cisalhamento do vento, que frequentemente torna-se turbulento. A turbulência é que permite que a camada limite responda as mudanças nas forçantes de superfície. Essas forçantes podem incluir a emissão de poluentes, transferência de calor, arraste friccional, entre outros. No caso de ausência da turbulência acima da camada limite, o resto da atmosfera livre não responde as mudanças na superfície.

Entende-se por atmosfera a camada que vai desde a superfície até aproximadamente 120 km de altitude. A parte mais baixa dessa camada é chamada de troposfera e se estende da superfície até aproximadamente 11 km, onde praticamente todos os fenômenos e processos do tempo se desenvolvem e onde todos os poluentes são liberados e dispersados.

Só a parte mais baixa da troposfera, que vai da superfície até aproximadamente 1500 m é modificada pela superfície da Terra, sendo assim a parte mais importante da troposfera, sendo muito sensível as mudanças dos parâmetros micrometeorológicos, por exemplo, condição de estabilidade. Essa camada é chamada de camada limite atmosférica (CLA) ou camada limite planetária (CLP). A camada limite pode ser definida como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra e responde as forçantes de superfície na escala de tempo de uma hora ou menos (STULL, 1988). A camada acima desta é conhecida como atmosfera livre, isso é ilustrado na figura a seguir (Figura 1). Indiretamente, toda troposfera pode mudar em resposta as características da superfície, sendo que essa resposta pode ser lenta fora da camada limite.

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 (Figura 2).

A camada limite superficial é a região mais próxima da superfície onde os

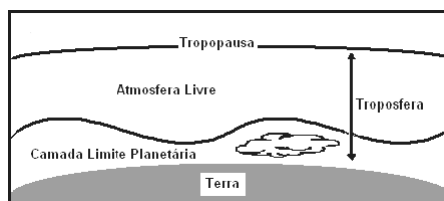


Figura 1: Divisão da troposfera (STULL, 1988)

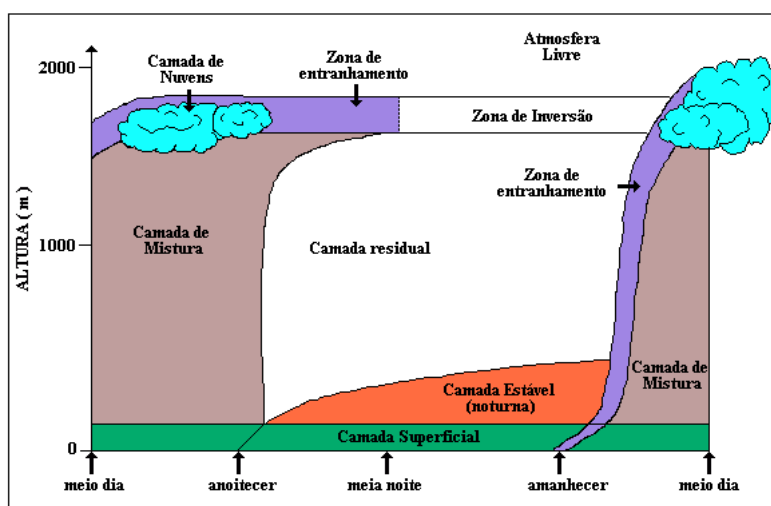


Figura 2: Evolução temporal da CLP (STULL, 1988)

fluxos turbulentos e tensores variam menos do que 10% de suas magnitudes, independente se essa camada é parte de uma camada de mistura ou de uma camada limite estável. Dentro dessa camada ainda pode ser identificada outra camada, chamada de camada interfacial, nos centímetros mais baixos da superfície, onde o transporte molecular domina sobre o transporte turbulento.

A camada de mistura é provocada pelo aquecimento diurno da superfície da terra devido a radiação de onda curta recebida do sol. Nesta camada predomina a turbulência térmica, provocada pelo aquecimento da superfície. Essa camada é caracterizada por uma intensa mistura (instável), onde as termas de ar quente ascendem da superfície. Ela cresce por entranhamento ou mistura do ar e atinge uma profundidade máxima no final da tarde. A turbulência resultante nessa camada tende a misturar uniformemente o calor, umidade e momento na vertical. Essa estrutura convectiva dura o dia todo e cessa com o pôr-do-sol. Por volta de meia hora antes do pôr-do-sol, as termas cessam (na ausência de advecção de ar frio), permitindo que a energia cinética turbulenta decaia.

A camada residual forma-se após o pôr do sol, mas suas características permanecem as mesmas da camada de mistura. Na ausência de advecção, os poluentes dispersados na camada de mistura diária vão permanecer na camada limite residual durante a noite. A camada residual dura até o início do nascer do sol, onde começa o surgimento de uma nova camada de mistura. A cada dia, mais umidade pode ser evaporada para a camada de mistura e essa umidade vai ficar sendo retida na camada residual. Durante dias sucessivos o entranhamento de ar úmido para a camada de mistura pode fazer surgir a formação de nuvens. Esta camada não tem contato com o solo, pois ela se encontra acima

da camada limite estável noturna. Assim, a camada limite residual não é afetada pelo transporte turbulento das propriedades relacionadas a superfície e portanto não tem uma definição de camada limite.

A camada limite estável noturna ocorre a noite, devido ao resfriamento causado pela perda radiativa da superfície da terra. Nesta camada predomina a turbulência mecânica causada pelo cisalhamento do vento. A noite só sobrevivem os pequenos turbilhões, portanto, a turbulência na camada limite estável noturna é menos intensa que na camada de mistura, conseqüentemente, os poluentes emitidos nessa camada não se dispersam para longe da fonte e relativamente pouco na vertical, e assim as áreas mais próximas são as mais afetadas. Um exemplo de poluição na camada limite estável noturna é sobre as grandes cidades, provocada pelo escapamento de veículos automotores.

A seguir serão apresentadas as principais variáveis micrometeorológicas que influenciam a remoção, o transporte e a transformação físico-químico dos poluentes imersos na CLA.

3.2 Energia Cinética turbulenta

A energia cinética turbulenta (ECT) representa uma medida da intensidade da turbulência, relacionada com o transporte de momento, calor e umidade. A energia cinética do fluxo pode ser dividida em uma parte associada com o vento médio e em uma parte associada com a turbulência (energia cinética turbulenta). Como estamos trabalhando em um fluido como o ar, é mais conveniente expressar a ECT por unidade de massa, ou seja:

$$e = \frac{1}{2}(u'^2 + v'^2 + w'^2) \quad (6)$$

Devido as rápidas mudanças do vento na CLP a ECT média é mais representativa do fluxo total, ou seja:

$$\bar{e} = \frac{1}{2}(\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad (7)$$

A ECT é uma das quantidades mais importante usada para estudar a turbulência na camada limite. Escrevendo a equação do balanço de energia cinética, podemos balançar os termos de produção pelos termos de perda para determinar se a camada limite vai tornar-se mais turbulenta ou se a turbulência vai decair na camada limite. Dias com vento forte e com forte aquecimento vão ser fontes de geração de turbulência (turbulência térmica). Durante a noite a estabilidade estática reprime a energia cinética turbulenta, causando a rápida diminuição da mesma com a altura. Nesse caso, a turbulência é produzida principalmente perto do solo pelo cisalhamento do vento (turbulência mecânica).

A partir da equação prognóstica para variância de velocidade turbulenta, dividida por 2 e assumindo que x é a direção do vento médio, homogeneidade horizontal e negligenciando a subsidência, podemos escrever a seguinte equação para o balanço de ECT (STULL, 1988):

$$\frac{\partial \bar{e}}{\partial t} = \frac{g}{\theta_v}(\overline{w'\theta'_v}) - \overline{u'w'}\frac{\partial \bar{U}}{\partial z} - \frac{\partial(\overline{w'e})}{\partial z} - \frac{1}{\bar{p}}\frac{\partial(\overline{w'p'})}{\partial z} - \epsilon \quad (8)$$

onde g é a aceleração da gravidade, θ_v é a temperatura potencial virtual, ρ é a densidade do ar e p é a pressão.

O primeiro termo do lado esquerdo da equação acima representa o armazenamento local ou tendência de ECT. O primeiro termo do lado direito da equação (8) é um termo de produção ou consumo de empuxo e isso depende do sinal do fluxo, o segundo termo representa a produção ou perda mecânica, o terceiro termo representa o transporte turbulento de ECT, o quarto termo representa o termo de correlação de pressão que descreve como a ECT é redistribuída pelas perturbações de pressão e o último termo representa a dissipação viscosa de ECT, isto é, conversão de ECT em calor.

Fisicamente o último termo da equação (8) diz que a turbulência vai tender a diminuir e desaparecer com o tempo. Sendo assim, a ECT não é uma quantidade conservativa. A camada limite pode ser turbulenta somente se há processos físicos específicos gerando a turbulência.

3.3 Velocidade de fricção

A escala de velocidade chamada de velocidade de fricção u_* é uma medida da turbulência mecânica provocada pelo atrito do vento na superfície. Durante situações onde a turbulência é gerada ou modulada pelo cisalhamento do vento próximo a superfície do solo, a magnitude do tensor de Reynolds demonstra ser uma importante variável de escala. O tensor de Reynolds existe somente quando o fluido está em movimento turbulento.

O fluxo vertical total de momento horizontal medido perto da superfície atua como um tensor e é chamado de *tensor de Reynolds* sendo dado por:

$$\tau_{xz} = -\overline{\rho u' w'_s} \quad (9)$$

e

$$\tau_{yz} = -\overline{\rho v' w'_s} \quad (10)$$

Assim, a norma do tensor de Reynolds é dada por:

$$|\tau_{Reynolds}| = [\tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2]^{1/2} \quad (11)$$

A velocidade de fricção é definida matematicamente pela raiz quadrada da norma do tensor de Reynolds dividido pela densidade média do ar, ou seja:

$$u_* = \sqrt{\frac{|\tau_{Reynolds}|}{\bar{\rho}}} \quad (12)$$

ou ainda:

$$u_* = \sqrt{[\overline{u' w'_s}^2 + \overline{v' w'_s}^2]^{1/2}} \quad (13)$$

3.4 Velocidade Convectiva

O forte ciclo diurno de aquecimento solar cria um forte fluxo de calor da superfície da terra para o ar. A flutuabilidade associada com esse fluxo alimenta as termas.

Mesmo que o fluxo flutuante na superfície poderia ser usado diretamente como uma variável de escala, é mais conveniente gerar uma escala de velocidade usando o fluxo flutuante na superfície e a altura da CLA (h). Com isso tem-se a escala de velocidade conhecida como escala de velocidade de convecção livre w_* , também chamada de escala de velocidade convectiva w_* :

$$w_* = \left[\frac{gz_i}{\overline{\theta_v}} (\overline{w'\theta'_v})_s \right]^{1/3} \quad (14)$$

Essa escala trabalha muito bem na CLC, onde a magnitude das flutuações da velocidade vertical nas termas é da mesma ordem de w_* .

3.5 Comprimento de Monin-Obukhov

O comprimento de Monin-Obukhov L é um parâmetro de escala da camada de superfície. A camada de superfície é aquela região onde os fluxos turbulentos variam menos do que 10% de suas magnitudes com a altura.

Para encontrarmos uma relação para o comprimento de Obukhov multiplica-se toda equação (8) por $(-kz/u_*^3)$ e assume-se todos fluxos turbulentos iguais aos seus respectivos valores na superfície e foca-se somente no primeiro termo do lado direito da equação (8).

A esse termo geralmente é atribuído o símbolo ζ que é definido como $\zeta \equiv z/L$, onde L é o comprimento de Obukhov. Com isso temos:

$$\zeta = \frac{z}{L} = \frac{-kzg(\overline{w'\theta'_v})_s}{\overline{\theta_v}u_*^3} \quad (15)$$

Assim o comprimento de Obukhov em função da velocidade de fricção é dado por:

$$L = \frac{-\overline{\theta_v}u_*^3}{kg(\overline{w'\theta'_v})_s} \quad (16)$$

Uma forma alternativa do comprimento de Obukhov é escrever o mesmo em função da velocidade convectiva, ou seja:

$$L = -\frac{z_i u_*^3}{k w_*^3} \quad (17)$$

Uma interpretação física do comprimento de Obukhov é que ele é proporcional a altura acima da superfície onde a produção de turbulência térmica predomina sobre a produção de turbulência mecânica.

Com base no comprimento de Obukhov é possível determinar a condição de estabilidade da atmosfera, ou seja, é possível saber se a atmosfera está instável ($L < 0$), neutra ($L = 0$) ou estável ($L > 0$).

3.6 Meandro do vento

Para condições de vento ($u > 2m/s$) a dispersão é principalmente governada pelo meandro do vento. Mesmo quando a estabilidade (durante a noite) reduz a dispersão vertical, o meandro do vento ainda dispersa a pluma. (SAGENDORF;

DICKSON, 1974) encontraram que sobre um terreno plano, a difusão horizontal é realçada pelo meandro do vento.

O meandro do vento está relacionado as oscilações de baixa frequência nas componentes horizontais do vento e é um fator importante em condições de vento fraco. Essas oscilações nas componentes u e v do vento são mais ou menos independentes das condições de estabilidade na atmosfera, características topográficas específicas e estação do ano. Também exibem um comportamento oscilatório para as funções de autocorrelação das componentes horizontais do vento, sendo que é difícil definir a direção do vento médio. Mesmo que o fenômeno de meandro do vento possa existir na maioria das condições de estabilidade atmosférica, seu efeito é mais evidente durante condições estáveis sob condições de vento fraco.

Não existe nenhuma teoria conclusiva disponível que ajuda a explicar o meandro do vento na atmosfera, em diferentes locais e diversas situações meteorológicas. No presente modelo o efeito de meandro do vento não será considerado. Será somente considerado no modelo os parâmetros velocidade de fricção, velocidade convectiva e comprimento de Monin-Obukhov descritos acima.

Não será fácil inserir o meandro do vento no presente modelo, sendo que uma das dificuldades para isso é que passaremos a trabalhar com matrizes cheias e não mais com matrizes diagonais e o custo computacional aumentará bastante. Além disso, a complexidade física e matemática do problema aumentará bastante.

4 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Quando estamos interessados em simular algo, temos que ter em mente que estamos a procura de uma formulação matemática para representar o fenômeno de interesse. Um modelo de dispersão de poluentes é uma expressão matemática capaz de simular o comportamento de um determinado poluente na atmosfera. A seguir apresenta-se a formulação matemática capaz de simular a dispersão de poluentes tridimensional totalmente analítica na atmosfera.

4.1 Solução da equação de advecção-difusão tridimensional pelo método 3D-GILTT

A advecção e difusão atmosférica podem ser modeladas aplicando-se a equação de conservação de massa (equação da continuidade). Considera-se uma espécie genérica C que se conserva na atmosfera e com isso tem-se:

$$U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (18)$$

onde, U , V e W representam as componentes das velocidades instantâneas do vento (m/s) nas direções x , y e z respectivamente.

Na modelagem matemática de difusão e turbulência, todas as variáveis são geralmente expressadas como somas de suas médias e flutuações.

$$U = \bar{u} + u'; \quad V = \bar{v} + v'; \quad W = \bar{w} + w'; \quad C = \bar{c} + c' \quad (19)$$

Substituindo a equação (19) na equação (18) e utilizando as regras da decomposição de Reynolds (ARYA, 2003), a equação de advecção-difusão tridimensional pode ser escrita como (STULL, 1988):

$$(\bar{u} + u') \frac{\partial \bar{c} + c'}{\partial x} + (\bar{v} + v') \frac{\partial \bar{c} + c'}{\partial y} + (\bar{w} + w') \frac{\partial \bar{c} + c'}{\partial z} = 0 \quad (20)$$

Efetuada as derivadas e multiplicações da equação acima (20) tem-se:

$$\begin{aligned} & \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial c'}{\partial x} + u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + u' \frac{\partial c'}{\partial x} + \\ & + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial c'}{\partial y} + v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + v' \frac{\partial c'}{\partial y} + \\ & + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w} \frac{\partial c'}{\partial z} + w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + w' \frac{\partial c'}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

Agora aplicando a média de Reynolds, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 & \overline{\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{\bar{u} \frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial c'}{\partial x}} + \\
 & + \overline{\bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{\bar{v} \frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial c'}{\partial y}} + \\
 & + \overline{\bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{\bar{w} \frac{\partial c'}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial c'}{\partial z}} = 0
 \end{aligned} \tag{22}$$

Sabe-se das regras de decomposição de Reynolds que:

$$\begin{aligned}
 \overline{\bar{u} \frac{\partial c'}{\partial x}} = 0; \quad \overline{u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} = 0; \quad \overline{\bar{v} \frac{\partial c'}{\partial y}} = 0 \\
 \overline{v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} = 0; \quad \overline{\bar{w} \frac{\partial c'}{\partial z}} = 0; \quad \overline{w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} = 0
 \end{aligned} \tag{23}$$

Substituindo a equação (23) na equação (22) tem-se:

$$\overline{\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{\bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{\bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} = -\frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \tag{24}$$

onde $\bar{c}$ denota a concentração média de um contaminante passivo e $\bar{u}$, $\bar{v}$ e $\bar{w}$ são as componentes cartesianas do vento médio (m/s). Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam respectivamente o fluxo turbulento do contaminante (g/sm^2) nas direções longitudinal, lateral e vertical.

A equação (24) apresenta quatro variáveis desconhecidas (os fluxos turbulentos e a concentração $\bar{c}$) e por isso essa equação não pode ser resolvida diretamente levando ao chamado problema de fechamento da turbulência (STULL, 1988).

Uma das maneiras mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de advecção-difusão tridimensional (24) é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) (SEINFELD; PANDIS, 1997), assim:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \tag{25}$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \tag{26}$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \tag{27}$$

A hipótese acima é válida para fluxos turbulentos laminares, onde não ocorrem fluxos de transporte contragradiente. Essa hipótese torna-se questionável sobre certas condições, principalmente quando os movimentos convectivos dominam os processos de transporte e difusão, por exemplo, na camada de mistura

convectiva. Substituindo as equações (25), (26) e (27) na equação (24), obtém-se a equação de advecção-difusão (BLACKADAR, 1997), ou seja:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (28)$$

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta longitudinal, lateral e vertical, respectivamente.

Os três termos do lado esquerdo da equação (28) representam o transporte devido à advecção. Já os termos do lado direito da equação (28) representam a difusão turbulenta. Como estamos trabalhando com vento fraco, os termos que representam a difusão turbulenta são mais importantes que os termos que representam a advecção.

A equação (28) está sujeita as seguintes condições de contorno, ou seja, condições de reflexão:

$$K_x \frac{\partial \bar{c}(x, y, z)}{\partial x} = 0 \quad \text{em } x = L_x \quad (28a)$$

$$K_y \frac{\partial \bar{c}(x, y, z)}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = 0 \quad \text{e } y = L_y \quad (28b)$$

$$K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, z)}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \quad \text{e } z = h \quad (28c)$$

E a condição de fonte:

$$\bar{u} \bar{c}(0, y, z) = Q \delta(y - y_o) \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \quad (28d)$$

em que Q é a intensidade da fonte g/s , h é a altura da CLP (m), H_s é a altura da fonte (m), L_x e L_y são os limites para longe da fonte no eixo x e y , respectivamente em (m) e δ é a função delta de Dirac.

Neste trabalho assumimos que as velocidades $\bar{v}$ e $\bar{w}$ são nulas e ainda que o coeficiente de difusão K_y tem dependência somente na direção z ($K'_y = 0$), assim a equação (28) é escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} -\bar{u} \frac{\partial \bar{c}(x, y, z)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}(x, y, z)}{\partial x} \right) + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}(x, y, z)}{\partial y^2} + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, z)}{\partial z} \right) = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

Para resolver o problema da equação (29) aplica-se a técnica da transformada integral na variável y , então, expande-se a concentração do poluente como:

$$\bar{c}(x, y, z) = \sum_{n=0}^N \frac{\bar{c}_n(x, z) \zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} \quad (30)$$

sendo que N_n é dado por:

$$N_n = \int_0^{L_y} \zeta_n^2(y) dy \quad (31)$$

Utiliza-se o problema auxiliar de Sturm-Liouville, dado pelo seguinte problema:

$$\zeta_n''(y) + \lambda_n^2 \zeta_n(y) = 0 \quad \text{em } 0 < y < L_y \quad (32)$$

onde $\zeta_n(y)$ é um conjunto de autofunções ortogonais dadas por:

$$\zeta_n(y) = \cos(\lambda_n y) \quad (33)$$

em que:

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{L_y} (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (34)$$

onde λ_n é um conjunto de autovalores.

Substituindo a equação (30) na (29) tem-se:

$$\begin{aligned} - \sum_{n=0}^N \frac{\bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \zeta_n(y) + \\ + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} K_y \bar{c}_n(x, z) \zeta_n''(y) + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} \right) \zeta_n(y) = 0 \end{aligned} \quad (35)$$

Da equação (32), conclui-se que:

$$\zeta_n''(y) = -\lambda_n^2 \zeta_n(y) = 0 \quad (36)$$

Agora substituindo a equação (36) na equação (35), tem-se:

$$\begin{aligned} - \sum_{n=0}^N \frac{\bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \zeta_n(y) - \\ - \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} K_y \bar{c}_n(x, z) \lambda_n^2 \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} \right) \zeta_n(y) = 0 \end{aligned} \quad (37)$$

O próximo passo é tomar momentos, ou seja, aplicar o operador integral (norma):

$$\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} () \zeta_m(y) dy \quad (38)$$

Substituindo o operador da equação (38) na equação (37) tem-se:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{n=0}^N \frac{\bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy - \\
& - \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \lambda_n^2 \bar{c}_n(x, z) \int_0^{L_y} K_y \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} \right) \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = 0
\end{aligned} \tag{39}$$

Define-se as integrais que aparecem na equação (39) por:

$$\alpha_{n,m} = \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy \tag{40}$$

$$\gamma_{n,m} = \int_0^{L_y} K_y \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy \tag{41}$$

Substituindo as equações (40) e (41) na equação (39), tem-se:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{n=0}^N \frac{\bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \alpha_{n,m} - \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \lambda_n^2 \gamma_{n,m} \bar{c}_n(x, z) + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \alpha_{n,m} + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} \right) \alpha_{n,m} = 0
\end{aligned} \tag{42}$$

As autofunções e autovalores possuem a propriedade de ortogonalidade que é definida da seguinte forma:

$$\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \tag{43}$$

A equação (42) é escrita na forma matricial da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \bar{u} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{c}_0}{\partial x} \\ \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{c}_N}{\partial x} \end{bmatrix} - K_x \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \bar{c}_0}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_N}{\partial x^2} \end{bmatrix} - \\
 K'_x \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{c}_0}{\partial x} \\ \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{c}_N}{\partial x} \end{bmatrix} - K_z \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \bar{c}_0}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial z^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 \bar{c}_N}{\partial z^2} \end{bmatrix} - \\
 K'_z \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{c}_0}{\partial z} \\ \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial z} \\ \vdots \\ \frac{\partial \bar{c}_N}{\partial z} \end{bmatrix} + \lambda_n^2 K_y \begin{bmatrix} \bar{c}_0 \\ \bar{c}_1 \\ \vdots \\ \bar{c}_N \end{bmatrix} = 0
 \end{aligned} \tag{44}$$

Após as suposições acima, o seguinte conjunto de $N + 1$ equações de advecção-difusão é obtido:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \right) - \lambda_n^2 K_y \bar{c}_n(x, z) \tag{45}$$

O problema da equação (45) é resolvido pelo método GILTT. Sabendo da bem conhecida solução para o problema estacionário com advecção na direção x , propõe-se que a solução do problema da equação (45) na seguinte forma:

$$\bar{c}_n(x, z) = \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i}(x) \varsigma_i(z) \tag{46}$$

onde $\varsigma_i(z)$ é um conjunto de autofunções ortogonais, dadas por:

$$\varsigma_i(z) = \cos(\gamma_i z) \tag{46a}$$

em que:

$$\gamma_i = \frac{i\pi}{h} (i = 0, 1, 2, \dots) \tag{46b}$$

onde γ_i é um conjunto de autovalores. Da equação (45) tem-se:

$$\begin{aligned}
 \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} &= K'_x \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} + \\
 &+ K'_z \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} - \lambda_n^2 K_y \bar{c}_n(x, z)
 \end{aligned} \tag{47}$$

Substituindo a equação (46) na equação (47), tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{u} \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) &= K'_x \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) + K_x \sum_{i=0}^I \overline{c''_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) + \\ &+ K'_z \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \varsigma'_i(z) + K_z \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \varsigma''_i(z) - \lambda_i^2 K_y \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) \end{aligned} \quad (48)$$

Utilizando o problema auxiliar de Sturm-Liouville, dado pelo seguinte problema:

$$\varsigma''_i(z) + \lambda_i^2 \varsigma_i(z) = 0 \quad em \quad 0 < z < h \quad (49)$$

Da equação (49), tem-se:

$$\varsigma''_i(z) = -\lambda_i^2 \varsigma_i(z) = 0 \quad (50)$$

Substituindo a equação (50) na equação (48), tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{u} \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) &= K'_x \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) + K_x \sum_{i=0}^I \overline{c''_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) + \\ &+ K'_z \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \varsigma'_i(z) - K_z \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) - \lambda_i^2 K_y \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \varsigma_i(z) \end{aligned} \quad (51)$$

O próximo passo é tomar momentos, ou seja, aplicar o operador integral (norma):

$$\int_0^h () \varsigma_j(z) dz \quad (52)$$

Substituindo a equação (52) na equação (51), tem-se:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \int_0^h \bar{u} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz &= \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \int_0^h K'_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\ &+ \sum_{i=0}^I \overline{c''_{n,i}}(x) \int_0^h K_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \int_0^h K'_z \varsigma'_i(z) \varsigma_j(z) dz - \\ &- \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \int_0^h K_z \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \int_0^h K_y \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \end{aligned} \quad (53)$$

ou

$$\begin{aligned}
& - \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \int_0^h \bar{u} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \sum_{i=0}^I \overline{c'_{n,i}}(x) \int_0^h K'_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& + \sum_{i=0}^I \overline{c''_{n,i}}(x) \int_0^h K_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \int_0^h K'_z \varsigma'_i(z) \varsigma_j(z) dz - \\
& - \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \int_0^h K_z \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}}(x) \int_0^h K_y \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz = 0
\end{aligned} \tag{54}$$

Reescrevendo a equação (54) em notação matricial, tem-se:

$$Y''(x) + F.Y'(x) + G.Y(x) = 0 \tag{55}$$

onde, $Y(x)$ é o vetor coluna cujas componentes são $\{\overline{c_{n,i}}(x)\}$. A matriz F é dada por:

$$F = B^{-1}.R \tag{55a}$$

e a matriz G é dada por:

$$G = B^{-1}.S \tag{55b}$$

As matrizes B, R e S são dadas respectivamente por:

$$b_{i,j} = \int_0^h K_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \tag{55c}$$

$$r_{i,j} = - \int_0^h \bar{u} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \int_0^h K'_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \tag{55d}$$

$$s_{i,j} = \int_0^h K'_z \varsigma'_i(z) \varsigma_j(z) dz - \lambda_i^2 \int_0^h K_z \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \lambda_i^2 \int_0^h K_y \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \tag{55e}$$

Pela condição de fonte, substituindo a equação (30) na (28d) e aplicando o operador da (38), tem-se:

$$\begin{aligned}
& \bar{u} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(0, z) \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy \\
& = Q \delta(z - H_s) \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \delta(y - y_o) \zeta_m(y) dy
\end{aligned} \tag{56}$$

Sabe-se da literatura que:

$$\int_a^b \delta(x - x_o) f(x) dx = f(x_o) \tag{57}$$

sendo $a < x_o < b$, $f(x)$ contínua em x_o . Portanto:

$$\int_0^{L_y} \delta(y - y_o) \zeta_m(y) dy = \zeta_m(y_o) \quad (58)$$

Substituindo a equação (46) e a equação (58) na equação (56), tem-se:

$$\bar{u} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i}(0) \varsigma_i(z) \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \frac{Q \zeta_i(y_o)}{N_m^{\frac{1}{2}}} \delta(z - H_s) \quad (59)$$

Substituindo a equação (52) na equação (59), tem-se:

$$\begin{aligned} \bar{u} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i}(0) \int_0^h \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy \\ = \frac{Q \zeta_i(y_o)}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^h \delta(z - H_s) \varsigma_j(z) dz \end{aligned} \quad (60)$$

Da equação (57) conclui-se que:

$$\int_0^h \delta(z - H_s) \varsigma_j(z) dz = \varsigma_j(H_s) \quad (60a)$$

Assim, executando-se as devidas substituições e integrações na equação (60), chega-se a seguinte condição de fonte:

$$Y(0) = \frac{Q \zeta_i(y_o) \varsigma_j(H_s)}{\bar{u} \sqrt{L_y h}} \quad \text{para } ((i = j) \text{ e } (m = n)) = 0 \quad (61)$$

$$Y(0) = \frac{Q \zeta_i(y_o) \varsigma_j(H_s)}{\bar{u} \sqrt{\frac{L_y}{2} \frac{h}{2}}} \quad \text{para } ((i = j) \text{ e } (m = n)) \neq 0 \quad (62)$$

onde, $Y(0)$ é o vetor coluna cujas componentes são $\{\bar{c}_{n,i}(0)\}$.

O próximo passo é aplicar a redução de ordem na equação (55), portanto, deve-se, definir novas variáveis como se segue:

$$Z_1(x) = Y(x) \quad (63)$$

$$Z_2(x) = Y'(x) \quad (64)$$

Tomando a derivada da equação (63) e da equação (64), tem-se:

$$Z_1'(x) = Y'(x) \quad (65)$$

$$Z_2'(x) = Y''(x) \quad (66)$$

Igualando a equação (64) a equação (65), tem-se:

$$Z_1'(x) = Z_2(x) \quad (67)$$

Reorganizando os termos da equação acima, tem-se:

$$Z_1'(x) - Z_2(x) = 0 \quad (68)$$

Substituindo as equações (63), (64) e (66) na equação (55), tem-se:

$$Z_2'(x) + F.Z_2(x) + G.Z_1(x) = 0 \quad (69)$$

As equações (68) e (69) constituem um sistema de equações matriciais de primeira ordem e podem ser escritas como:

$$\begin{cases} Z_1'(x) + 0Z_2'(x) + 0Z_1(x) - Z_2(x) = 0 \\ 0Z_1'(x) + Z_2'(x) + G.Z_1(x) + F.Z_2(x) = 0 \end{cases} \quad (70)$$

O sistema da equação (70) pode ser escrito em notação matricial da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} Z_1'(x) \\ Z_2'(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} Z_1(x) \\ Z_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (71)$$

Da equação (71) pode-se definir a seguinte EDO na forma matricial:

$$Z'(x) + H.Z(x) = 0 \quad (72)$$

onde o vetor $Z(x)$ é dado por:

$$Z(x) = \text{col}[Z_1(x), Z_2(x)] \quad (72a)$$

A matriz H tem a forma de bloco dada por:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix} \quad (72b)$$

O problema da equação (72) pode ser resolvido por transformada de Laplace e diagonalização. Aplicando a transformada de Laplace na equação (72) obtém-se:

$$s\bar{Z}(s) - Z(0) + H.\bar{Z}(s) = 0 \quad (73)$$

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

$$H = X D X^{-1} \quad (74)$$

onde: D é a matriz diagonal de autovalores da matriz H ; X é a matriz dos respectivos autovetores e X^{-1} é a matriz inversa de X .

Portanto, substituindo a equação (74) na equação (73) obtém-se:

$$s\bar{Z}(s) - Z(0) + X D X^{-1} . \bar{Z}(s) = 0 \quad (75)$$

Rearranjando os termos da equação (75) obtém-se:

$$(s I + X D X^{-1}) . \bar{Z}(s) = Z(0) \quad (76)$$

onde I é a matriz identidade e lembrando que:

$$X X^{-1} = X^{-1} X = I \quad (76a)$$

Substituindo a equação (76a) na equação (76) tem-se:

$$(s X X^{-1} + X D X^{-1}) \cdot \bar{Z}(s) = Z(0) \quad (77)$$

Rearranjando os termos na equação (77) tem-se:

$$X(sI + D)X^{-1} \cdot \bar{Z}(s) = Z(0) \quad (78)$$

A equação (78) tem a seguinte solução:

$$\bar{Z}(s) = X(sI + D)^{-1} X^{-1} \bar{Z}(0) \quad (79)$$

Fazendo a transformada Inversa de Laplace ($\mathfrak{L}$) na equação (79) tem-se:

$$Z(x) = X \cdot \mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} \cdot X^{-1} \cdot Z(0) \quad (80)$$

A matriz $(sI + D)$ é escrita como:

$$(sI + D) = \begin{bmatrix} s + d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s + d_n \end{bmatrix} \quad (81)$$

onde d_n são os autovalores da matriz H (equação (72b)). Da álgebra matricial, a inversa de uma matriz diagonal é a inversa dos seus elementos, então a matriz inversa da matriz diagonal $(sI + D)$ é escrita como:

$$(sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s+d_n} \end{bmatrix} \quad (82)$$

Fazendo a inversão da Transformada Laplace de $(sI + D)^{-1}$ (equação (82)) e usando os resultados padrões da teoria da transformada de Laplace, que podem ser encontrados tabelados em livros, obtém-se:

$$\mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} = G(x) = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_n x} \end{bmatrix} \quad (83)$$

Finalmente, substituindo a equação (83) na equação (80), tem-se a seguinte solução para o problema da equação (72), ou seja:

$$Z(x) = X \cdot \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_n x} \end{bmatrix} \cdot X^{-1} \cdot Z(0) \quad (84)$$

ou ainda:

$$Z(x) = X \cdot G(x) \cdot X^{-1} \cdot Z(0) \quad (85)$$

Definindo:

$$M(x) = X \cdot G(x) \quad (85b)$$

e

$$\xi = X^{-1} \cdot Z(0) \quad (85a)$$

Então, a equação (85) é escrita como:

$$Z(x) = M(x) \xi \quad (86)$$

Podemos reescrever a solução dada pela equação (86) como:

$$\begin{pmatrix} Z_1(x) \\ Z_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(x) & M_{12}(x) \\ M_{21}(x) & M_{22}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \quad (86a)$$

Finalmente para determinar o vetor desconhecido ξ precisamos resolver o seguinte sistema linear resultante da aplicação das condições de contorno da solução (72):

$$\begin{pmatrix} M_{11}(0) & M_{12}(0) \\ M_{21}(L_x) & M_{22}(L_x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_1(0) \\ Z_2(L_x) \end{pmatrix} \quad (86b)$$

Substituindo os resultados da equação (86) na equação (46), obtém-se a solução do problema bidimensional (2D). Desde que $\overline{c_n}(x, z)$ é conhecido da resolução da equação (46), se está a um passo de escrever a solução tridimensional (3D) do problema da equação (18), que é dado pela equação (30).

Finalmente substituindo os resultados da solução do problema 2D da equação (46) na equação (30), obtém-se a solução 3D-GILTT da equação de advecção-difusão.

Uma vez que a solução do problema proposto é obtida precisamos ainda, afim de obter resultados numéricos, conhecer o perfil do vento e os coeficientes de difusão. Para tanto na sequência serão introduzidas as parametrizações da turbulência. Também é preciso conhecer os dados experimentais que serão usados para validar o modelo e as formulações dos índices estatísticos que são usados para avaliar a performance do modelo.

5 DADOS PARA VALIDAÇÃO DO MODELO

Devido a complexidade da camada limite atmosférica é quase impossível desenvolver um modelo que represente ao mesmo tempo todos os fenômenos que acontecem nessa complexa camada da atmosfera. Em vista disso é de fundamental importância desenvolver modelos para condições atmosféricas específicas, no caso da presente dissertação, vento fraco. Deve-se levar em conta as características topográficas da região para a qual o modelo foi desenvolvido além da climatologia da região.

Nesta seção apresentam-se as parametrizações da turbulência, formulações do perfil do vento, os dados experimentais e as formulações dos índices estatísticos utilizados para modelar a dispersão tridimensional de poluentes.

5.1 Parametrizações da turbulência

Toda e qualquer parametrização deve ser feita com muito cuidado, pois dependendo do fenômeno que se quer modelar um parâmetro é mais importante do que outro e isso pode ser determinante no resultado final da modelagem.

Para representar a difusão perto da fonte em condições de vento fraco, os coeficientes de difusão devem ser considerados como funções não somente da turbulência (ou seja, do comprimento dos grandes turbilhões e escala de velocidade), mas também da distância da fonte (ARYA, 1995). Seguindo essa idéia, (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001)(DEGRAZIA et al., 2002) propuseram a seguinte formulação algébrica, em condições instáveis, para os coeficientes de difusão (K_α), onde α é para x , y e z :

$$K_\alpha = \frac{0,583w_*hc_i\psi^{2/3}(z/h)^{4/3}X^*[0,55(z/h)^{2/3} + 1,03c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_i^{2/3}X^*]}{[0,55(z/h)^{2/3}(f_m^*)_i^{1/3} + 2,06c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_iX^*]^2} \quad (87)$$

em que h é a altura da CLC, $c_{v,w} = 0,36$, $c_u = 0,3$, X^* é a distância adimensional dada pela seguinte equação:

$$X^* = \frac{xw_*}{\bar{u}h} \quad (88)$$

e $(f_m^*)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral dada por:

$$(f_m^*)_w = \frac{z}{(\lambda_m)_w} = 0,55 \left(\frac{z}{h} \right) \left[1 - \exp \left(-\frac{4z}{h} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{h} \right) \right]^{-1} \quad (89)$$

para a componente vertical, em que $(\lambda_m)_w$ é o valor do pico espectral do compri-

mento de onda vertical, dado por:

$$(\lambda_m)_w = 1,8h \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0,0003\exp\left(\frac{8z}{h}\right) \right] \quad (90)$$

A componente longitudinal obtida de (OLESEN; LARSEN; HOJSTRUP, 1984) é $(f_m^*)_u = 0,67$. A função dissipação usada aqui é o valor médio $\psi = 0,4$ (CAUGHEY, 1982).

Para condições estáveis, DEGRAZIA; VILHENA; MORAES (1996) propuseram a seguinte formulação algébrica para os coeficientes de difusão (K_α):

$$K_\alpha = \frac{2\sqrt{\pi}0.64u_*ha_i^2(1-z/h)^{\alpha_1}(z/h)X^*[2\sqrt{\pi}0.64a_i^2(z/h) + 8a_i(f_m)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X^*]}{[2\sqrt{\pi}0.64(z/h) + 16a_i(f_m)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X^*]^2} \quad (91)$$

em que $i = u, v, w$, X^* é a distância adimensional (mesma fórmula para o caso instável), h é a altura da CLE, α_1 é uma constante que depende da evolução da CLE, $(f_m)_i$ é a frequência do pico espectral dada por:

$$(f_m)_i = (f_m)_{n,i} \left(1 + 3.7 \frac{z}{\Lambda} \right) \quad (92)$$

onde $(f_m)_{n,i}$ é a frequência do pico espectral na estratificação neutra [$(f_m)_{n,w} = 0.33$; $(f_m)_{n,v} = 0.22$; $(f_m)_{n,u} = 0.045$], z é a altura acima do solo, Λ é o comprimento de Monin-Obukhov local dado pela seguinte formulação:

$$\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{(1.5\alpha_1 - \alpha_2)} \quad (93)$$

em que $[\alpha_1 = 1.5; \alpha_2 = 1]$ e a_i é dado por:

$$a_i = \frac{(2.7c_i)^{1/2}}{(f_m)_{n,i}^{1/3}} \quad (94)$$

sendo que $c_{v,w}$ e c_u são dados respectivamente por $[c_{v,w} = 0.4; c_u = 0.3]$.

Testamos outras formulações para o coeficiente de difusão vertical (K_z). Uma formulação utilizada é a proposta por Degrazia que é utilizada em toda CLP. Para condições instáveis (MANGIA et al., 2002) é dada pela seguinte expressão:

$$K_z = 0.22w_*h \left(\frac{z}{h} \right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{-\frac{4z}{h}} - 0.0003e^{\frac{8z}{h}} \right] \quad (95)$$

onde h é a altura da CLC.

Para condições estáveis (DEGRAZIA et al., 2000) é dada por:

$$K_z = \frac{0.3(1-z/h)u_*z}{1 + 3.7(z/\Lambda)} \quad (96)$$

onde h é a altura da CLE e Λ é dado pela seguinte expressão:

$$\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{\frac{5}{4}} \quad (97)$$

Outra formulação que utilizaremos são as fórmulas de similaridade, utilizadas somente na camada superficial (PANOFISKY; DUTTON, 1984):

$$K_z = \frac{ku_*z}{\Phi_h(z/L)} \quad (98)$$

onde k é a constante de von-Kámán ($k \cong 0.4$).

A função Φ_h para condições instáveis ($(z/L) < 0$) é dada por $\Phi_h = (1 - 16z/L)^{-1/2}$, para condições neutras ($(z/L) = 0$) é dada por $\Phi_h = 1$ e para condições estáveis ($(z/L) > 0$) é dada por $\Phi_h = 1 + 5z/L$ (DYER, 1974).

Por último analisaremos as fórmulas de Troen e Mahrt, utilizadas em toda a CLP (DYER, 1974).

Para condições instáveis ($h/L < -10$) temos:

$$K_z = kw_*z \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (99)$$

e para condições estáveis ou quase neutras ($h/L \geq -10$) temos:

$$K_z = \frac{ku_*z(1 - \frac{z}{h})^2}{\Phi_h(z/L)} \quad (100)$$

5.2 Perfis do vento

O perfil da velocidade do vento é descrita por uma lei de potência (PANOFISKY; DUTTON, 1984) e por uma lei similaridade (PANOFISKY; DUTTON, 1984).

Para a lei potência do vento utilizamos a seguinte expressão:

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^\alpha \quad (101)$$

na qual $\bar{u}$ e $\bar{u}_1$ são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas z e z_1 e α é uma constante, cujo valor é $\alpha = 0.1$.

Para a lei similaridade do vento utilizamos a formulação descrita pela seguinte formulação:

$$\bar{u} = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right], \quad z \leq z_b \quad (102)$$

e

$$\bar{u} = \bar{u}(z_b), \quad z > z_b \quad (103)$$

em que $z_b = \min[|L|, 0, 1h]$, k é a constante de von-kármán $k \cong 0,4$, z_0 é a rugosidade do terreno.

A função de estabilidade ψ_m é expressa em termos das relações de Businger, sendo que para condições estáveis e neutras é dada por:

$$\psi_m \left(\frac{z}{L} \right) = -4.7 \frac{z}{L}, \quad \frac{1}{L} \geq 0 \quad (104)$$

e para condições instáveis é dada por:

$$\psi_m \left(\frac{z}{L} \right) = \ln \left(\frac{1+x^2}{2} \right) + \ln \left(\frac{1+x}{2} \right)^2 - 2\arctan x + \frac{\pi}{2}, \quad \frac{1}{L} < 0 \quad (105)$$

sendo que x é dado por:

$$x = \left(1 - 15 \frac{z}{L}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (106)$$

Tabela 1: Parâmetros meteorológicos observados no experimento IIT Delhi.

Expt	$\bar{u}$ (15 m) (ms^{-1})	w_* (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	h (m)
1	2,21	2,37	0,34	-17,5	1570
2	1,09	2,26	0,21	-2,5	1240
6	2,22	2,04	0,34	-20	1070
7	2,43	2,28	0,37	-22	1240
8	1,77	1,09	0,25	-32	943
11	1,49	1,83	0,25	-13	1070
12	2,24	2,32	0,35	-24	1325
13	1,08	1,72	0,21	-2	1070

5.3 Dados experimentais

Todo estudo de modelagem na atmosfera necessita de dados observados confiáveis para validação do modelo, caso isso não seja possível não se consegue desenvolver um modelo que seja consistente com o fenômeno que se quer modelar. A seguir são descritos os dados experimentais utilizados para validar o modelo aqui descrito.

5.3.1 Experimento IIT Delhi (Índia)

Para validar o modelo sob condições atmosférica instáveis, foram utilizados dados de vento fraco reportados no experimento IIT Delhi (Índia) (SHARAN; SINGH; YADAV, 1996)(SHARAN; YADAV; MODANI, 2002).

Foram obtidas concentrações ao nível do solo do poluente hexafluoreto de enxofre (SF_6). O poluente foi liberado sem empuxo de uma altura de $1m$, sendo que as concentrações foram observadas próximo do solo ($0.5m$). O período de amostragem de SF_6 é de $30min$ a uma taxa de 30 a $50mlmin^{-1}$. As variáveis meteorológicas, vento e temperatura, foram obtidas em 4 alturas ($2, 4, 15$ e $30m$) de uma torre micrometeorológica de $15m$. Os amostradores foram colocados em arcos de 50 e $100m$ de raio. No total foram realizados 8 experimentos, sendo que foram medidos os seguintes parâmetros micrometeorológicos: vento em $15m$, velocidade convectiva (w_*), velocidade de fricção (u_*), comprimento de Obukhov (L) e altura da camada limite atmosférica (CLA) (h).

A tabela (1) mostra os dados meteorológicos desse experimento (SHARAN; YADAV; MODANI, 2002).

5.3.2 Experimento INEL (USA)

Para validar o modelo sob condições atmosférica estáveis, foram utilizados dados de vento fraco reportados no experimento INEL (USA) (SAGENDORF; DICKSON, 1974).

O experimento INEL consiste de uma série de testes difusivos, conduzidos em um terreno plano e uniforme. O poluente SF_6 foi coletado em arcos posicionados nos raios de $100, 200$ e $400m$ do ponto de emissão na altura de $0.76m$ do solo. O poluente foi liberado de uma altura de $1.5m$ acima do nível do solo. O parâmetro meteorológico vento em $2m$ foi obtido do experimento. A rugosidade na superfície

Tabela 2: Parâmetros meteorológicos observado e previstos no experimento INEL.

Expt	$\bar{u}$ (2 m) (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	h (m)
4	0,7	0,047	2,4	13
5	0,8	0,053	3,1	16
6	1,2	0,08	7,1	30
7	0,6	0,04	1,8	11
8	0,5	0,033	1,2	8
9	0,5	0,033	1,2	8
10	1,1	0,073	5,9	26
11	1,4	0,093	9,6	37
12	0,7	0,047	2,4	13
13	1,0	0,067	4,9	23
14	1,0	0,067	4,9	23

foi de $0.005m$.

Os parâmetros, comprimento de Monin-Obukhov, velocidade de fricção e altura da CLA, não foram medidos no experimento INEL (USA), mas foram calculados de formulações empíricas. O comprimento de Monin-Obukhov foi calculado seguindo a metodologia de (ZANNETTI, 1990), como:

$$L = 1100u_*^2 \quad (107)$$

Já a velocidade de fricção foi calculada da seguinte maneira:

$$u_* = k\bar{u}(z_r)/\ln(z_r/z_0) \quad (108)$$

onde $z_r = 2m$ (altura de referência) e k é a constante de von Karman (≈ 0.4). Para calcular h utilizamos a seguinte relação (ZILITINKEVITH, 1972):

$$h = 0.4(u_*L/f_c)^{1/2} \quad (109)$$

Os parâmetros meteorológicos do experimento de INEL (SAGENDORF; DICKSON, 1974) são apresentados na tabela (108).

5.4 Índices estatísticos

Os índices estatísticos descrevem a capacidade do modelo representar os dados observados. Estes índices estatísticos são recomendados para validação e comparação de modelos pela Agência de Proteção Ambiental Americana (USEPA).

As notações utilizadas para os índices o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas e previstas, c é a concentração de poluentes, e σ é o desvio padrão. São avaliados, respectivamente, os índices estatísticos, desvio quadrático médio normalizado (NMSE), coeficiente de correlação (COR), fator de 2 (FA2), fração de inclinação (FB) e desvio fracional padrão (FS).

O desvio quadrático médio normalizado (NMSE) informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. Deve ser o menor possível para um bom modelo.

$$NMSE = \frac{1}{N} \frac{\sum (c_o - c_p)^2}{\bar{c}_o \bar{c}_p} \quad (110)$$

sendo N o número de observações.

O coeficiente de correlação (COR) representa o grau de associação entre as variáveis. Para uma boa performance, o seu valor deve ser 1.

$$COR = \frac{(\sum c_o c_p) - N \bar{c}_o \bar{c}_p}{\sqrt{(\sum c_o^2 - N \bar{c}_o^2)(\sum c_p^2 - N \bar{c}_p^2)}} \quad (111)$$

O fator de 2 (FA2) representa a fração de dados (%) normalizados a 1). Quanto mais próximo de 1 este valor estiver, maior é a confiabilidade do modelo.

$$0,5 \leq \frac{\bar{c}_p}{\bar{c}_o} \leq 2 \quad (112)$$

A fração de inclinação (FB) representa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

$$FB = \frac{\bar{c}_o - \bar{c}_p}{0,5(\bar{c}_o + \bar{c}_p)} \quad (113)$$

O valor ótimo do desvio fracional padrão (FS) é zero.

$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)} \quad (114)$$

Os desvios padrões observado (σ_o) e previsto (σ_p) são dados, respectivamente, como:

$$\sigma_o = \frac{\sum (c_o - \bar{c}_o)^2}{N - 1} \quad (115)$$

$$\sigma_p = \frac{\sum (c_p - \bar{c}_p)^2}{N - 1} \quad (116)$$

6 RESULTADOS

Nas tabelas (3) (IIT Delhi) e (4) (INEL) mostra-se o comportamento dos resultados das concentrações observadas e simuladas utilizando perfil de vento potência e similaridade.

Na Figura (3) temos o diagrama de espalhamento dos dados observados e preditos pelo método 3D-GILTT utilizando o experimento IIT Delhi e perfil de vento potência. Podemos observar que as concentrações preditas pelo modelo reproduzem de forma razoável os resultados experimentais. Quanto mais próximos estiverem os resultados da linha central, melhor é o modelo. As outras linhas indicam o fator de dois (FA2), ou seja, se todos os dados obtidos estiverem entre estas linhas tem-se bons resultados.

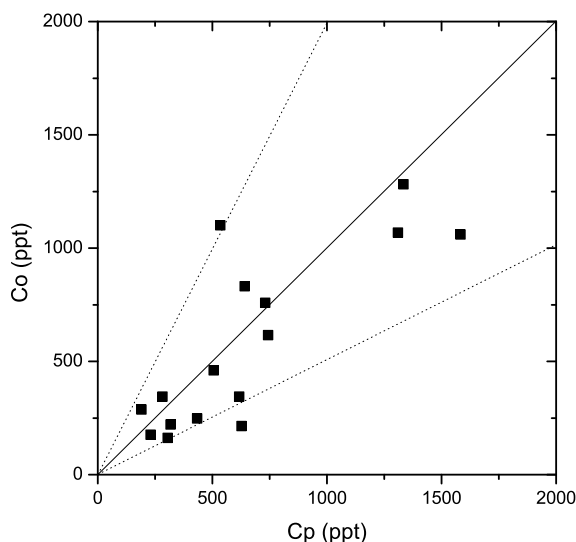


Figura 3: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento IIT Delhi utilizando perfil de vento potência

Na figura (4), apresentamos o gráfico de espalhamento das concentrações observadas experimentalmente e preditas pelo método 3D-GILTT utilizando perfil de vento similaridade para o experimento IIT Delhi.

A Tabela (5) mostra a performance do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento de vento fraco (IIT Delhi) sob condições atmosféricas instáveis, uti-

Tabela 3: Concentrações observadas e previstas pelo método 3D-GILTT, utilizando perfil de vento potência e similaridade para o experimento instável IIT Delhi.

Exp.	Dist. (m)	Co (ppt)	Cp (ppt) (Potência)	Cp (ppt) (Similaridade)
1	50	832	641,34	616,65
	100	345	282,20	254,52
2	50	1068	1310,01	1057,77
	100	460	505,21	350,01
6	50	1101	534,57	494,61
	100	176	230,81	190,12
7	50	248	433,62	409,36
	100	288	189,93	163,20
8	50	1282	1333,17	1254,52
	100	345	617,15	505,99
11	50	616	743,02	659,22
	100	162	305,10	237,94
12	50	759	730,40	686,87
	100	222	318,08	272,38
13	50	1060	1582,42	1266,85
	100	215	626,75	418,30

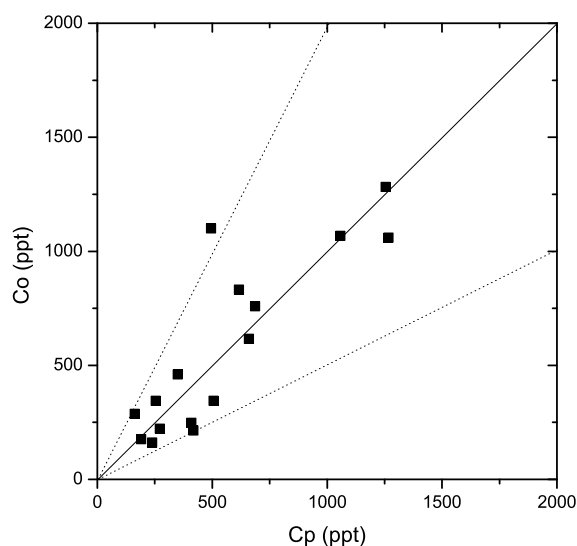


Figura 4: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento IIT Delhi utilizando perfil de vento similaridade

Tabela 4: Concentrações observadas e previstas pelo método 3D-GILTT, utilizando perfil de vento potência e similaridade para o experimento estável INEL.

Exp.	Dist. (m)	Co	Cp (Potência)	Cp (Similaridade)
4	100	5,81	6,10	6,99
	200	2,99	2,46	2,93
	400	1,47	0,94	1,11
5	100	1,36	0,74	0,83
	200	0,867	1,03	1,19
	400	0,304	0,39	0,44
6	100	2,61	2,92	3,21
	200	0,972	1,12	1,22
	400	0,293	0,41	0,44
7	100	1,26	1,48	1,70
	200	0,709	0,56	0,64
	400	1,01	1,11	1,37
8	100	0,586	0,82	1,02
	200	0,315	0,30	0,37
	400	0,328	0,29	0,34
9	100	1,09	2,17	2,72
	200	0,568	0,80	0,99
	400	0,392	0,29	0,34
10	100	2,41	3,25	3,51
	200	1,8	1,27	1,38
	400	0,708	0,47	0,50
11	100	2,32	2,53	2,84
	200	1,09	0,93	1,03
	400	1,1	0,34	0,36
12	100	2,0	3,05	3,49
	200	1,77	2,46	2,93
	400	0,944	0,94	1,11
13	100	3,16	3,71	3,97
	200	2,3	1,46	1,61
	400	1,37	0,54	0,59
14	100	2,81	3,71	3,97
	200	1,59	1,46	1,61
	400	0,302	0,54	0,59

lizando perfil de vento potência e similaridade, considerando e não considerando o coeficiente de difusão na direção x (K_x) na equação (45), em comparação com outros modelos, usando os índices estatísticos descritos na presente dissertação. Em condições instáveis o coeficiente de difusão na direção x pode ser desprezado, pois a difusão predomina no eixo z . Quando utilizamos perfil de vento potência, rodamos o modelo com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação.

A abordagem GILTTG (BUSKE, 2008) assume que a pluma de poluentes tem uma distribuição Gaussiana em y . O método ADMM (MOREIRA et al., 2006) resolve a equação de advecção-difusão bidimensional, discretizando a CLA em subcamadas e assumindo uma Gaussiana para a direção lateral. O método GIADMT (COSTA et al., 2009) é uma extensão dos trabalhos anteriores, mas novamente assume a discretização do domínio em subcamadas e considera coeficientes de difusão e perfil médio do vento. O modelo de Arya (1995) é obtido pela integração numérica da solução *puff* Gaussiana usando parâmetros de dispersão baseadas em similaridade de escala convectiva. Os resultados obtidos com essa abordagem revelam uma sub-predição comparados com a concentração. O mesmo acontece com o modelo de Sharan et al. (1996). Melhores resultados são obtidos em (SHARAN; YADAV; MODANI, 2002) que é uma melhoria do modelo anterior onde a velocidade de fricção é usada em vez da velocidade convectiva.

Os índices estatísticos da tabela (5) indicam que, comparado com outros modelos, uma boa concordância é obtida entre o modelo aqui descrito e as concentrações observadas próximas ao nível do solo. Pela análise das concentrações com e sem K_x fica provado que para condições instáveis a difusão é predominante na direção z . Os resultados são um pouco melhores quando utilizamos perfil de vento similaridade ao invés de perfil de vento potência, isso porque quando utilizamos perfil similaridade estamos levando em conta mais processos físicos, por exemplo, utilizamos o comprimento de Obukhov. Quando usamos o perfil potência estamos só avaliando a variação do vento entre dois níveis. Em condições de vento fraco devemos utilizar coeficientes que sejam considerados como função não somente da turbulência, mas também da distância da fonte, por isso, as formulações dadas pelas equações (95), (98) e (99) não devem ser usadas.

Na Figura (5) apresentamos o diagrama de espalhamento dos dados observados e preditos pelo método 3D-GILTT utilizando o experimento INEL e perfil de vento potência para todas as velocidade de vento, já a Figura (6) é para a condição de vento menor que $1m/s$. Podemos observar que as concentrações preditas pelo modelo tanto para todas as velocidades do vento como para a condição de vento menor que $1m/s$ reproduzem de forma razoável os resultados experimentais.

Nas figuras (7) e (8), apresentamos os gráficos de espalhamento das concentrações observadas experimentalmente e preditas pelo método 3D-GILTT utilizando perfil de vento similaridade para o experimento INEL e para o experimento INEL com $u < 1m/s$.

A Tabela (6) mostra a performance do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento de vento fraco (INEL) sob condições atmosféricas estáveis, utilizando perfil de vento potência e similaridade, em comparação com outros mode-

Tabela 5: Comparação estatística entre os resultados do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento IIT Delhi sob condições atmosféricas instáveis, utilizando perfil de vento potência, com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação e perfil de vento similaridade, com outros modelos encontrados na literatura.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
3D-GILTT - sm, c/Kx, Kz eq. (87)	0.12	0.86	0.94	0.04	0.08
3D-GILTT - sm, s/Kx, Kz eq. (87)	0.12	0.86	0.88	0.03	0.06
3D-GILTT - pt, c/Kx, Kz eq. (87)	0.17	0.81	0.88	-0.12	-0.08
3D-GILTT - pt, s/Kx, Kz eq. (87)	0.18	0.81	0.88	-0.13	-0.08
3D-GILTT - pt, c/Kx, Kz eq. (95)	1.28	0.87	0.25	0.83	0.82
3D-GILTT - pt, c/Kx, Kz eq. (98)	1.49	0.88	0.25	0.89	0.89
3D-GILTT - pt, c/Kx, Kz eq. (99)	2.76	0.87	0.13	1.13	1.12
GILTTG - pt, c/kx, Kz eq. (87)	0.14	0.83	0.88	-0.05	-0.04
ADMM	0.35	0.76	0.81	-0.01	-0.33
GIADMT	0.22	0.93	0.88	0.33	0.31
Arya(1995)	13.86	0.77	0.00	1.68	1.59
Sharan et al. (1996a)	7.11	0.76	0.00	1.49	1.32
Sharan et al. (2002)	0.37	0.91	0.75	0.45	0.40

sm = similaridade; pt = potência

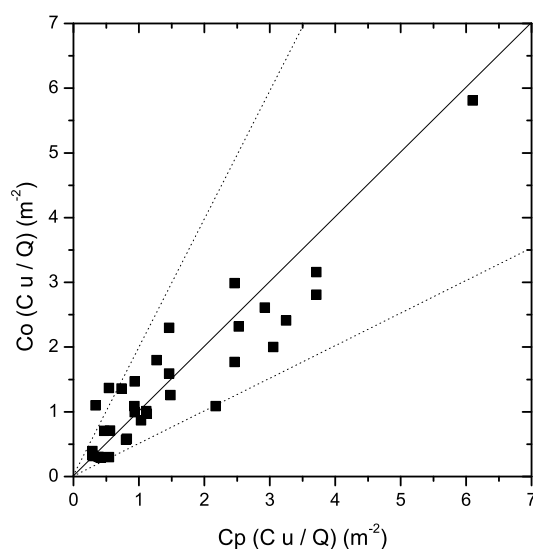


Figura 5: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL utilizando perfil de vento potência

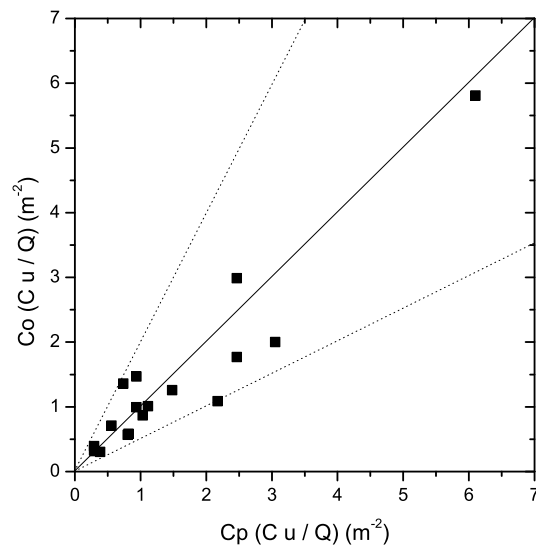


Figura 6: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL com $u < 1m/s$ utilizando perfil de vento potência

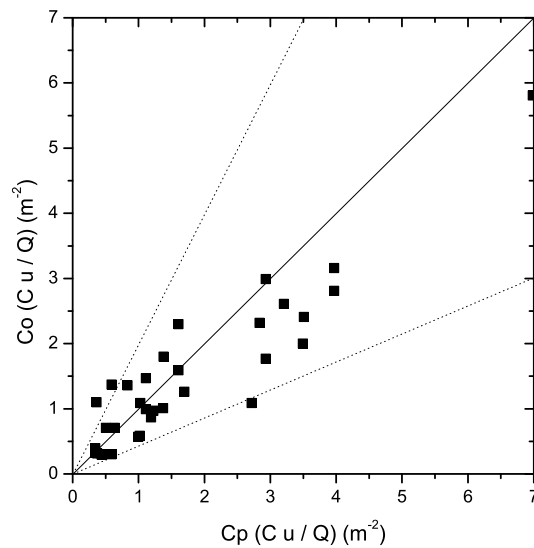


Figura 7: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e preditas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL utilizando perfil de vento similaridade

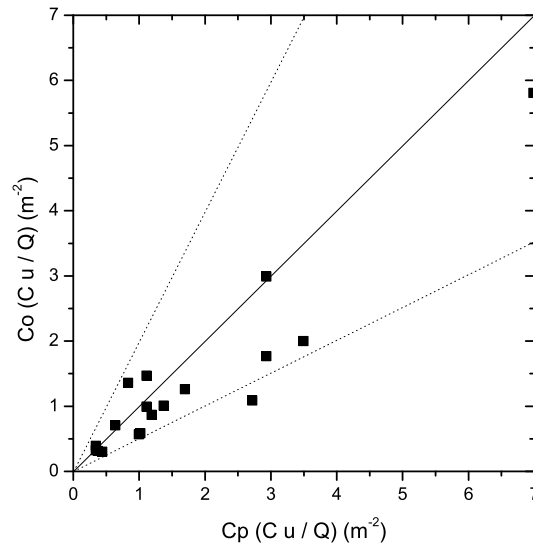


Figura 8: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo método 3D-GILTT (C_p) para o experimento INEL com $u < 1m/s$ utilizando perfil de vento similaridade

los. Quando utilizamos perfil de vento potência, rodamos o modelo com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação. Já a tabela (7) apresenta a performance do modelo utilizando dados do experimento INEL, só para condições de vento menor que ($u < 1m/s$).

O modelo GILTTG tem as mesmas características que no caso instável. Os modelos M1, M-2, M-3 e M-4 são baseados em abordagem Gaussiana descritos em (SAGENDORF; DICKSON, 1974). No modelo M-1 a classe de estabilidade é determinada pelo gradiente de temperatura média durante o período de teste. Ambos σ_y e σ_z são determinados de uma única classe de estabilidade usando as curvas de Turner (1970). O método M-2 é uma abordagem sigma split. Nesse método σ_z é determinado pelo gradiente de temperatura como no método padrão, mas σ_y é baseado em uma classe de estabilidade determinada pelo desvio padrão do ângulo de azimuth sobre o período de teste. O terceiro método M-3 é similar ao método padrão, exceto que os valores dos parâmetros de dispersão são desenvolvidos no experimento INEL. A última abordagem M-4 é baseada no método de segmentação da pluma (ZANNETTI, 1990), onde o meandro da pluma é dividido em cada teste em pequenos intervalos e o método faz os cálculos para cada intervalo.

Os índices estatísticos da tabela (6) e da tabela (7) indicam que, comparado com outros modelos, uma boa concordância é obtida entre o modelo 3D-GILTT sob condições estáveis e as concentrações observadas. Os resultados são um pouco melhores quando utilizamos perfil de vento potência ao invés de perfil de vento similaridade ao contrário do caso instável, isso por que praticamente os poluentes não se dispersam do local onde são liberados, tanto na direção x, como na direção z. Em condições de vento fraco e estáveis devemos utilizar coeficientes que sejam considerados como função não somente da turbulência,

Tabela 6: Comparação estatística entre os resultados do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento INEL sob condições atmosféricas estáveis, utilizando perfil de vento potência, com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação e perfil de vento similaridade, com outros modelos encontrados na literatura.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
3D-GILTT - sm, Kz eq. (87)	0.17	0.92	0.91	-0.16	-0.26
3D-GILTT - pt, Kz eq. (87)	0.11	0.93	0.94	-0.04	-0.15
3D-GILTT - pt, Kz eq. (95)	0.15	0.92	0.91	-0.13	-0.22
3D-GILTT - pt, Kz eq. (98)	0.12	0.92	0.94	0.00	-0.14
3D-GILTT - pt, Kz eq. (99)	0.14	0.93	0.91	-0.11	-0.21
GILTTG - pt, Kz eq. (87)	0.15	0.90	0.79	0.14	0.01
M-1	6.72	0.54	0.00	-1.51	-1.15
M-2	0.33	0.82	0.72	-0.25	-0.03
M-3	1.02	0.21	0.56	-0.16	0.29
M-4	0.72	0.53	0.67	0.06	0.59

sm = similaridade; pt = potência

mas também da distância da fonte, como no caso de condições de vento fraco e instáveis.

De modo a verificar o comportamento da pluma do poluente, consideraremos agora a velocidade vertical do vento w diferente de zero (equação 28) (cabe salientar que a derivação da solução da equação de advecção-difusão é análoga à solução apresentada no capítulo 4).

A seguir apresentamos as isolinhas de concentração para diferentes velocidades verticais do vento ($\bar{w} = -0,5; 0; 0,5$) em termos das variáveis adimensionais $X^* = xw_*/\bar{u}h$ e $Z^* = z/h$.

Apesar de considerar velocidades verticais constantes, podemos verificar que quando a velocidade vertical é negativa (Figura (9a)), a pluma tem um comportamento descendente, quando a velocidade vertical é nula (Figura (9b)) observamos a simetria da pluma de poluentes próximo a fonte e quando a velocidade vertical é positiva (Figura(9c)), a pluma tem um comportamento ascendente. O mesmo comportamento é observado para o caso tridimensional, como observamos na Figura (10).

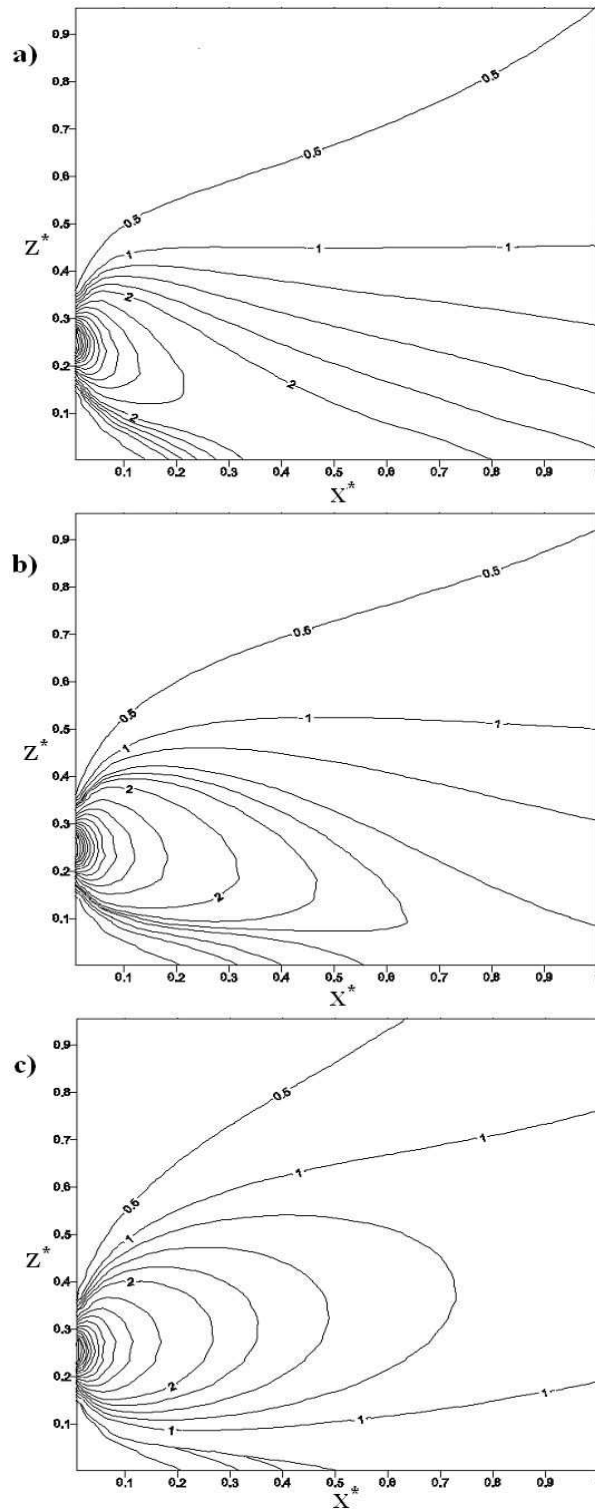


Figura 9: Isolinhas de concentrações bidimensionais adimensionais ($C^* = \bar{c}\bar{u}h/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) para diferentes velocidades verticais do vento e condições estacionárias: a) $\bar{w}=-0,5$; b) $\bar{w}=0$; c) $\bar{w}=0,5$

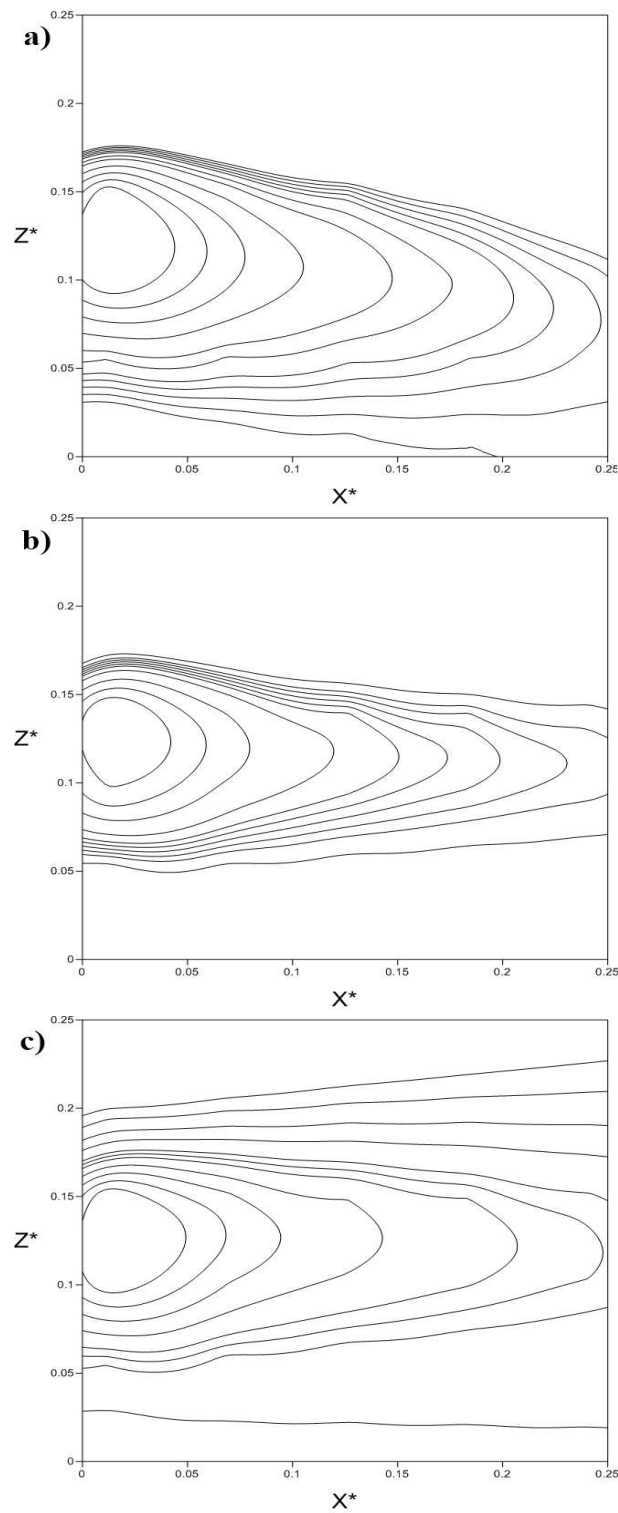


Figura 10: Isolinhas de concentrações tridimensionais adimensionais previstas pelo presente modelo ($C^* = \bar{c}uh/Q$, $X^* = xw_*/\bar{u}h$, $Z^* = z/h$ e $H_s = 0,25h$) para diferentes velocidades verticais do vento e condições estacionárias: a) $\overline{w} = -0,5$; b) $\overline{w} = 0$; c) $\overline{w} = 0,5$

Tabela 7: Comparação estatística entre os resultados do modelo 3D-GILTT utilizando dados do experimento INEL com $u < 1m/s$ sob condições atmosféricas estáveis, utilizando perfil de vento potência, com todos os coeficientes de difusão vertical (K_z) descritos na presente dissertação e perfil de vento similaridade, com outros modelos encontrados na literatura.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
3D-GILTT - sm, Kz eq. (87)	0.22	0.94	0.94	-0.25	-0.22
3D-GILTT - pt, Kz eq. (87)	0.12	0.94	1.00	-0.09	-0.08
3D-GILTT - pt, Kz eq. (95)	1.08	0.60	0.61	-0.27	-0.38
3D-GILTT - pt, Kz eq. (98)	1.02	0.60	0.56	-0.14	-0.31
3D-GILTT - pt, Kz eq. (99)	1.08	0.60	0.61	-0.26	-0.38
GILTTG - pt, Kz eq. (87)	0.09	0.96	0.94	0.03	0.08
M-1	6.72	0.54	0.00	-1.51	-1.15
M-2	0.33	0.82	0.72	-0.25	-0.03
M-3	1.02	0.21	0.56	-0.16	0.29
M-4	0.72	0.53	0.67	0.06	0.59

sm = similaridade; pt = potência

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Foi descrito um modelo matemático para a dispersão de poluentes na CLA, em condições de vento fraco. Além da advecção ao longo do vento médio, o modelo considera a difusão longitudinal. A solução analítica de forma fechada do problema proposto é obtida usando o método 3D-GILTT. O modelo proposto foi avaliado em condições instáveis e estáveis para a distribuição de concentração.

Apesar de algumas limitações do banco de dados experimentais IIT Delhi, obtém-se uma boa concordância entre as concentrações observadas e aquelas calculadas pelo modelo 3D-GILTT, indicando que o modelo representa o processo de difusão corretamente em condições de vento fraco.

No caso da simulação sob condições atmosféricas estáveis, melhores resultados são obtidos com velocidade do vento menores do que 1 m/s . O presente estudo demonstra que a inclusão da difusão longitudinal e coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte, importante em condições de vento fraco, fornece a descrição dos processos de transporte turbulento dos poluentes atmosféricos.

Em condições atmosféricas instáveis, o coeficiente de difusão longitudinal pode ser desprezado, pois a difusão predomina na direção z , sendo que os resultados são praticamente idênticos. Melhores resultados são obtidos quando utilizamos perfil de vento similaridade, ao invés de perfil potência do vento. O nosso modelo é o que melhor simula a dispersão de poluentes na atmosfera, comparando os resultados do nosso modelo com outros modelos tridimensionais disponíveis na literatura para condições instáveis. Devemos utilizar para condições instáveis coeficientes de difusão que sejam função da turbulência e da distância da fonte.

Em condições atmosféricas estáveis o coeficiente de difusão longitudinal não pode ser desprezado, pois o poluente praticamente não se dispersa, tanto na horizontal como na vertical, sendo que o mesmo afeta as áreas mais próximas a fonte. Melhores resultados são obtidos quando utilizamos perfil de vento potência em qualquer uma das condições de vento ($u < 2\text{ m/s}$ ou $u < 1\text{ m/s}$), ao contrário do caso instável, em que melhores resultados são obtidos quando utilizamos perfil de vento similaridade. Como no caso instável, o nosso modelo é o que melhor simula a dispersão de poluentes na atmosfera ($u < 2\text{ m/s}$ ou $u < 1\text{ m/s}$), comparando com outros modelos disponíveis na literatura sob condições estáveis e tridimensionais.

Quando consideramos a velocidade vertical, mesmo que constante, podemos ver o comportamento ascendente ($\overline{w} > 0$) da pluma de poluentes, o comportamento descendente ($\overline{w} < 0$) da pluma de poluentes e a simetria da pluma de

poluentes próximo da fonte ($\overline{w} = 0$).

Futuramente iremos incluir a parte do meandro do vento no presente modelo, iremos utilizar outros tipos de fechamento para a turbulência que não somente a teoria do transporte gradiente (ou teoria K) e ainda iremos levar em conta mais coeficientes de difusão, que levem em conta a física mais realista da camada que estamos interessados em simular a dispersão de poluentes.

REFERÊNCIAS

ARYA, P. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. **Journal Meteorological Applications**, v.34, p.1112–1122, 1995.

ARYA, P. A review of the theoretical bases of short-range atmospheric dispersion and air quality models. In **Indian National Science Academic**, v.69A, p.709–724, 2003.

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

BARAD, M. Project Prairie Grass, A Field Program In Diffusion. **Geophysical Research**, v.I (59), p.299, 1958.

BARAD, M. Project Prairie Grass, A Field Program In Diffusion. **Geophysical Research**, v.II (59), p.218, 1958.

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

BLACKADAR, A. K. **Turbulence and diffusion in the atmosphere**: lectures in Environmental Sciences. [S.l.]: Springer-Verlag, 1997.

BULIGON, L.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. 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.

BUSKE, D. **SOLUÇÃO GILT BIDIMENSIONAL EM GEOMETRIA CARTESIANA: SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA**. 2008. Tese de Doutorado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

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

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; BODMANN, B.; TIRABASSI, T. **Analytical Model for Air Pollution in the Atmospheric Boundary Layer**. [S.l.]: Air Pollution - Book 1, Organized by: M. Khare, 2012. v.1, p.39–58.

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

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

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

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; 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. T.; SEGATTO, C. F.; QUADROS, R. S. **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. v.1, p.25–34.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BODMANN, B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. **Journal of Environmental Protection**, v.4, p.1–10, 2012.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; QUADROS, R. S.; SEGATTO, C. F. Modelo analítico tridimensional de dispersão de poluentes na camada limite atmosférica. **Revista Ciência e Natura**, v.1, p.115–118, 2011.

CATALDI, M.; MARGALHO, M.; VELLOSO, M.; PIMENTEL, L. Estudo do transporte de poluentes na região da camada de superfície sob diversas condições de estabilidade atmosférica. **In XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, v.1, p.2890–2899, 2000.

CAUGHEY, S. J. **Diffusion in the convective boundary layer**. Reidel, Boston: Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling, Edited by F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, 1982.

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

CIRILLO, M. C.; 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, C. P.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na camada limite convectiva. In **XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia, Fortaleza**, p.1–19, 2004.

COSTA, C. P.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T. **A Closed-Form Formulation for Pollutant Dispersion in the Atmosphere**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Computational Methods, Organized by: C. Constanta; M. E. Pères, 2010. v.2, p.141–150.

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

COSTA, C. P.; VILHENA, M. T.; ; TIRABASSI, T. Application of the GIADMT method in pollutant dispersion under low wind conditions (In Portuguese). **Ciência e Natura**, p.17–20, 2009.

COSTA, C.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.40, n.29, p.5659–5669, 2006.

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

COTTA, R. M.; BARROS, F. P. J. 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 Transforms, Symbolic Computation**. Baffins Lane, Chinchester, England: John Wiley & Sons, 1997.

DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M.; CAMPOS, C. R. J.; CARVALHO, J. C.; VILHENA, M. T. Comparison between an integral and algebraic formulation for the eddy diffusivity using the Copenhagen experimental dataset. **Il Nuovo Cimento**, v.25C, p.207–218, 2002.

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

DEGRAZIA, G. A.; VILHENA, M. T.; MORAES, O. L. L. An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion. **Il Nuovo Cimento**, v.19C, p.399–403, 1996.

DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.34, p.3575–3583, 2000.

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

DORAN, J. C.; HORST, T. W. An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements. **Atmospheric Environment**, v.19, p.939–951, 1985.

DYER, A. J. A Review of flux-profile relationship. **Boundary Layer Meteorology**, v.7, p.363–372, 1974.

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

GRYNING, S. E. Elevated source SF₆ - tracer dispersion experiments in the Copenhagen area. **Report RISOE-R-446, Risoc National Laboratory, Roskilde, Denmark**, 1981.

GRYNING, S.; HOLTSLAG, A.; IRWING, J.; SILVERSTEN, B. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment**, v.21 (1), p.79–89, 1987.

GUERRERO, J. S. P.; PIMENTEL, L. C. G.; OLIVEIRA-JÚNIOR, J. F.; HEILBRON FILHO, P. F. L.; ULKE, A. G. A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.55, p.201–212, 2012.

HANNA, S.; PAINE, R. J. Hibrid plume dispersion model (HPDM) development and evaluation. **Journal of Applied Meteorology**, v.28, p.206–224, 1989.

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.

KOCH, 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.

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

MANGIA, C.; MOREIRA, D. M.; SCHIPA, I.; DEGRAZIA, G. A.; TIRABASSI, T.; RIZZA, U. 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.; ÖZISIK. **Ünified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**. New York: John Wiley & Sons, 1984.

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

MOREIRA, D. M.; FERREIRA NETO, P. V.; CARVALHO, J. C. 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. M.; VILHENA, M. T.; 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. v.1, p.179–202.

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

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; 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, n.3-4, p.413–424, 2005.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; COSTA, C.; BODMANN, B. Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. **Water, Air and Soil Pollution**, v.177, p.411–439, 2006.

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

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

OETTL, D.; ALMBAUER, R. A.; STURM, P. J. A new method to estimate diffusion in stable, low-wind conditions. **Journal of Applied Meteorology**, v.40, p.259–268, 2001.

OLESEN, H. R.; LARSEN, S. E.; HOJSTRUP, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.29, p.285–312, 1984.

PANOFSKY, H. A.; DUTTON, J. A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1984.

RIBEIRO, M.; CATALDI, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Estudo da dispersão de poluentes na atmosfera via transformação integral. **In XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, v.1, p.2969–2975, 2000.

ROBERTS, O. F. T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. **In Royal Society of London**, v.104, p.640–648, 1923.

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

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

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

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K. A mathematical model for the atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmospheric Environment**, v.30 (7), p.1137–1145, 1996.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K.; AGARWAL, P.; NIGAM, S. A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions. **Atmospheric Environment**, v.30, p.1209–1220, 1996.

SHARAN, M.; 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.

SHARAN, M.; YADAV, A. K.; MODANI, M. Simulation of short-range diffusion experiment in low wind convective conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.1901–1906, 2002.

SIVERSTEN, B.; BÖHLER, T. **Verification of dispersion estimates using tracer data**. Lilleström, Norway: NILU Report - The Norwegian Institute for Air Research, 1985. p.TR 19/85.

SMITH, F. B. **Convection-diffusion processes below a stable layer**. London: Technical Report, Meteorological Research Committee, 1957.

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo eulariano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos. **Revista Ciência e Natura**, 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. M.; VILHENA, M. 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.

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

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

VELLOSO, M. F.; STORCH, R. B.; PEREZ GUERRERO, J. S.; PIMENTEL, L. C. Estudo do transporte de poluentes na camada limite atmosférica a partir de dois modelos algébricos para o coeficiente de difusão turbulenta e transformação integral. In **XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, p.1–16, 2004.

VILHENA, M.; RIZZA, U.; DEGRAZIA, G.; MANGIA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. An analytical air pollution model: Development and evaluation. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315–320, 1998.

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

VILHENA, M. T.; COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. A semi-analytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Atmospheric Research**, v.1, p.63–69, 2008.

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

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

ZANNETTI, p. **Air Pollution Modelling**. [S.l.]: Computational Mechanics Publications, Southampton, 1990. 444p.

ZILITINKEVITH, s. s. On the determination of the height of the Ekman boundary layer. **Boundary Layer Meteorology**, v.3, p.141–145, 1972.

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes
na atmosfera em condições de vento fraco – Viliam
Cardoso da Silveira**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Centro de Pesquisas e Previsões Meteorológicas - CPPMet
Programa de Pós-Graduação em Meteorologia



Dissertação

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes na
atmosfera em condições de vento fraco**

VILIAM CARDOSO DA SILVEIRA

Pelotas, 2013