

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

**SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA, RESOLVENDO
UM PROBLEMA ADVECTIVO – DIFUSIVO DEPENDENTE DO TEMPO COM
FONTE ARBITRÁRIA**

por

Ledina Lentz Pereira

Tese para obtenção do Título de Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Junho de 2007

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

**SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA RESOLVENDO
UM PROBLEMA ADVECTIVO – DIFUSIVO DEPENDENTE DO TEMPO COM
FONTE ARBITRÁRIA**

por

Ledina Lentz Pereira
Mestre em Matemática Aplicada

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

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

Co-orientadores: Prof. Dr. Tiziano Tirabassi e Prof. Dr. Davidson Martins Moreira

Aprovada por:

Prof. Dr. Luiz Cláudio Gomes Pimentel - UFRJ

Prof. Dr. Antônio G. O. Goulart - CCNE/URISAM

Prof. Dr. Francis H. R. França - PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Flávio Lorini
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 29 de Junho de 2007

Ao meu marido Carlos Roberto e aos meus filhos Luciana e Felipe

AGRADECIMENTOS

Ao professor orientador professor Marco Tullio M. B. de Vilhena pela oportunidade e conhecimento tantas vezes manifestados durante estes anos.

Aos co-orientadores professores Davidson M. Moreira e, em especial, Tiziano Tirabassi pela generosidade, companheirismo, sugestões e contribuições ao meu trabalho durante estes anos e, também, no período do estágio no CNR/Bolonha/Itália.

Ao meu marido e meus filhos, pela compreensão, companheirismo e, também, por terem me dado tanto apoio nas horas mais complicadas e difíceis deste doutorado.

A minha mãe e irmãos, em especial a Cleide, que com muita sabedoria e carinho contribuiu na revisão deste trabalho.

Aos colegas pela amizade e que de alguma forma contribuíram na realização deste trabalho. Em destaque as minhas três grandes amigas Camila, Bárbara e Deise.

A SED/SC e UNESC/SC pelo afastamento das atividades concedido e apoio dos colegas de trabalho.

A CAPES pelo suporte financeiro e ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários, em especial, ao Paulo C. Prado Kutter do PROMEC, e docentes.

Porto Alegre, 29 de junho de 2007

Resumo

SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA RESOLVENDO UM PROBLEMA ADVECTIVO – DIFUSIVO DEPENDENTE DO TEMPO COM FONTE ARBITRÁRIA

Os problemas ambientais causados pelo rápido desenvolvimento industrial e tecnológico têm levado, nas últimas décadas, a investigação da dispersão de poluentes na atmosfera. Esta investigação é fundamental na busca de alternativas que minimizem os impactos dessa dispersão ao meio ambiente. Um instrumento particularmente útil na compreensão dos fenômenos que controlam o transporte, a dispersão e a transformação físico-química dos poluentes imersos na atmosfera é fornecido pelos modelos matemáticos. Neles, a equação de advecção-difusão é geralmente utilizada. A solução dessa equação pode ser obtida numericamente ou de forma analítica, fazendo-se algumas hipóteses de forma a simplificar a equação original. Neste trabalho, a equação de advecção-difusão é resolvida analiticamente. Um dos objetivos do presente trabalho foi simular o comportamento de um poluente para uma emissão instantânea, em condições meteorológicas não homogêneas e não estacionárias, ou seja, um modelo a *puff*. Na realização das simulações foi utilizado um modelo Lagrangeano a *puff* Gaussiano bidimensional transiente, descrito em termos da função de Green unidimensional transiente e por uma gaussiana em x , caracterizando a difusão nesta direção. Em x , o baricentro de cada *puff* é transportado pelo vento, variando no espaço. Outro objetivo foi determinar a função de Green unidimensional transiente pelos métodos GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) e ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method). Como as formulações matemáticas de cada método são diferentes, tem-se também como objetivo: além de confrontá-los com dados experimentais existentes na literatura, compará-los entre si.

Abstract

SIMULATION OF THE POLLUTANT DISPERSION IN THE ATMOSPHERE SOLVING A TIME-DEPENDENT ADVECTION – DIFFUSION PROBLEM WITH ARBITRARY SOURCE

In the last few decades, environmental problems caused by the fast industrial and technological development have been taking the pollutant dispersion investigation in the atmosphere. This investigation is fundamental in search for alternatives that minimize such dispersion impact on environment. An instrument particularly useful to understand the phenomena that control the transport, dispersion and physicochemical pollutant transformation immersed in the atmosphere is giving by mathematical models. In such models, the advection-diffusion equation is frequently used. The solution of the advection-diffusion equation can be obtained by numerical or analytical solutions, considering some hypotheses to simplify the original equation. At this study, the solution of the advection-diffusion equation is obtained by the analytical form. One of the objectives of this study was to simulate the pollutant behavior for an instantaneous emission, in inhomogeneous and nonstationary meteorological conditions, that is, a *puff* model. For that, it was used two analytical methods for the concentration calculation. For realizing the simulations a transient two-dimensional Gaussian Lagrangean puff model was used, writing in terms of the transient one-dimensional Green function and multiplied by a Gaussian in x , characterizing the diffusion in this direction. At x , the barycentre of each *puff* is carried by the wind, varying in the space. Another objective was to determinate the transient one-dimensional Green function by the methods GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) and ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method). As the mathematical formularization of each method is different, there is another objective: either collating literature available experiment data or comparing each other.

Sumário

| | |
|---|-----------|
| RESUMO | iii |
| ABSTRACT | iv |
| 1 – INTRODUÇÃO | 01 |
| 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | |
| 2.1 – Revisão Bibliográfica | 04 |
| 3 – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | |
| 3.1 - Camada Limite Planetária (CLP) | 12 |
| 3.1.1 - Perfil do vento na CLP | 14 |
| 3.1.2 - Difusão turbulenta | 15 |
| 3.1.3 - Gradiente térmico vertical e estabilidade atmosférica | 16 |
| 3.2 - A estrutura da CLP | 19 |
| 3.2.1 – Camada Limite Convectiva (CLC) | 20 |
| 3.2.2 – Camada Residual Noturna (CRN) | 21 |
| 3.2.3 – A camada estável (CE) | 22 |
| 3.3 - Teoria da Similaridade | 22 |
| 3.3.1 – Teoria da Similaridade de Monin – Obukhov | 22 |
| 3.4 – Modelagem Matemática da Dispersão de Poluentes na CLP | 23 |
| 3.4.1 - Modelos de Dispersão Eulerianos: modelos K | 26 |
| 3.4.2 - Modelos de Dispersão Lagrangeanos de Partícula | 29 |
| 3.4.3 Modelos Gaussianos | 30 |
| 4 – SOLUÇÕES ANALÍTICAS DO PROBLEMA ADVECTIVO-DIFUSIVO BIDIMENSIONAL, DEPENDENTE DO TEMPO COM FONTE ARBITRÁRIA | |
| 4.1 – O Problema bidimensional Transiente com Termo Fonte | 35 |
| 4.1.1.- Parametrização da Turbulência | 38 |
| 4.1.1.1 – O Coeficiente de Difusão | 38 |
| 4.1.1.2 – Perfil do vento | 40 |
| 4.1.2 – A Solução do Problema Unidimensional Transiente - via GILTT | 41 |

| | |
|---|----|
| 4.1.2.1 – A construção da função de Green e a solução do problema bidimensional transiente, com termo fonte – via GILTT | 47 |
| 4.1.3 – A Solução do Problema Unidimensional Transiente - via ADMM | 48 |
| 4.1.3.1 – A construção da função de Green e a solução do problema bidimensional transiente, com termo fonte – via ADMM | 51 |
| 4.1.4 – Algoritmos Computacionais..... | 52 |
| 4.1.4.1 – Algoritmo do modelo GILTT..... | 53 |
| 4.1.4.2 – Algoritmo do modelo ADMM | 53 |

5 – AVALIAÇÕES DOS MODELOS DE DISPERSÃO DE POLUENTES

| | |
|--|----|
| 5.1 - Dados Experimentais | 56 |
| 5.1.1 - O Experimento de Copenhagen | 56 |
| 5.2 - Índices Estatísticos..... | 59 |
| 5.3 – Resultados e análise dos modelos | 60 |

6 – CONCLUSÃO

7 – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANEXO I

Lista de Símbolos

1 – Caracteres Arábicos

| | |
|---------------------|--|
| ADMM | Advection Diffusion Multilayer Method |
| CLA | Camada Limite Atmosférica ou |
| CLP | Camada Limite Planetária |
| CLC | Camada Limite Convectiva |
| CLE | Camada Limite Estável |
| CM | Camada da Mistura |
| CLS | Camada Limite Superficial |
| CRN | Camada Residual Noturna |
| EDO | Equações diferenciais ordinárias |
| EDP | Equações diferenciais parciais |
| GITT | Generalized Integral Transform Technique |
| GILTT | Generalized Integral Laplace Transform Technique |
| PDF | Função densidade de probabilidade |
| Cor | coeficiente de correlação |
| $\overline{c'u}$ | fluxo turbulento |
| $D\nabla^2 c$ | termo de difusão molecular |
| D | coeficiente de difusão molecular |
| $\overline{A_j(t)}$ | solução do problema transformado |
| $Fa2$ | fator de 2 |
| Fb | fração de inclinação |
| Fs | desvio fracional padrão |
| B | matriz de coeficientes do problema transformado |
| $c(x,t)$ | concentração média em x no tempo t |
| $c(z,t)$ | concentração média em z no tempo t |
| Co | concentrações observadas |
| Cp | concentrações preditas |
| C, c | concentração de contaminante |
| $c_{puff}(x, z, t)$ | concentração de poluente em cada $puff$ |

| | |
|--------------------------|--|
| d_i | autovalores da matriz B |
| D_a | matriz diagonal dos autovalores de R |
| E | matriz de coeficientes do problema transformado |
| f_x | função adimensional do tempo de viagem t/T_x |
| $(f_m^*)_w$ | freqüência adimensional do pico espectral vertical |
| $G_D(t)$ | a matriz diagonal, cujos elementos não-nulos são $e^{-d_i(t-t_0)}$ |
| g | aceleração da gravidade |
| $G(x; x')$ | função de Green associada ao operador diferencial L_a |
| $G(z, t; z', t')$ | função de Green unidimensional transiente |
| H_S | altura da fonte |
| H | função de Heaviside |
| I | matriz Identidade |
| K_i | coeficientes de difusão turbulenta, onde $i = x, y, z$ |
| $K(z)$ ou K_z | coeficiente de difusão vertical |
| k | constante de Von Karman |
| k_p | número de pontos da quadratura Gaussiana |
| L | comprimento de Monin-Obukhov |
| $L_a(x)$ | operador diferencial linear |
| L^{-1} | operador inverso do operador diferencial L_a |
| N_m | norma |
| P | pressão |
| P_o | pressão de referência (1000 mb) |
| $P(x, t x', t')$ | função densidade de probabilidade |
| $p(t) = (x_p, y_p, z_p)$ | localização do centro de um <i>puff</i> |
| Q | capacidade de emissão da fonte |
| $r(x_r, y_r, z_r)$ | posição de um <i>puff</i> |
| S ou $S(x', t')$ | termo fonte |
| s | variável independente transformada |
| t | tempo |
| T_a | matriz dos autovetores de R |
| T | temperatura |

2- Caracteres Gregos

| | |
|--------------------------|---|
| γ | gradiente adiabático |
| θ | temperatura potencial |
| Θ | temperatura potencial média |
| θ_* | temperatura de escala |
| $(\overline{w\theta})_o$ | fluxo de calor turbulento na superfície |
| $\Psi_{\text{puff}}(x)$ | gaussiana em x |
| ψ | taxa de dissipação |
| $(\lambda_m)_w$ | comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical |
| Ψ_m | função estabilidade |
| σ_x e σ_z | parâmetro de dispersão longitudinal e vertical, respectivamente |
| σ_u | desvio padrão da componente longitudinal da velocidade do vento |
| σ_w | variância da velocidade vertical |
| λ_i | autovalores do problema de Sturm-Liouville |
| δ | função Delta de Dirac |
| Δh | termo de correção |
| ΔM | quantidade de massa |
| ∇ | operador de gradiente |
| ∇^2 | laplaciano |

ÍNDICE DE FIGURAS

3.1 - A força de gradiente (F_g) faz com que a velocidade do vento aumente, e com esse aumento, a força de *Coriolis* também aumenta até um valor que vai compensar a força de gradiente.

3.2 – *Vento Geostrófico*.

3.3 - Estratificação da CLP.

3.4 - Os sistemas de referência Euleriano e Lagrangeano, para os movimentos da atmosfera.

3.5 - Dispersão de poluentes através de uma pluma gaussiana. Distribuição em um sistema coordenado.

3.6 - Simulação de uma pluma por meio de uma série de *puffs* emitidos com certo intervalo de tempo da fonte.

4.1 - Comportamento do coeficiente de difusão adimensional para grandes tempos dependente das propriedades da turbulência em função da altura adimensional.

4.2 - Influência do vento horizontal na dispersão dos poluentes.

4.3 - O esquema da CLP dividida em um sistema multicamadas.

4.4 - Aproximação *stepwise* para o coeficiente de difusão vertical adimensional K_z .

5.1 - Experimento de Copenhagen.

5.2 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e as preditas (C_p) do modelo ADMM, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

5.3 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e as preditas (C_p) do modelo GILTT, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

5.4 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e as preditas (C_p) dos modelos ADMM e GILTT, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

5.5 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e as preditas (C_p) dos modelos ADMM e GILTT, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Degrazia et al., 2001.

5.6 - Gráfico de espalhamento das concentrações observadas experimentalmente ao nível do solo e as simuladas pelos modelos ADMM e GILTT, respectivamente, considerando-se em (a) o coeficiente de difusão de Pleim Chang e em (b) o do Degrazia et al., 2001.

ÍNDICE DE TABELAS

- 5.1 – Velocidade de fricção u_* (m/s) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 min.
- 5.2 - Comprimento de Monin-Obukhov L (m) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 min.
- 5.3 - Altura da camada limite para os experimentos de Copenhagen
- 5.4 - Concentração observadas (C_o) (10^{-4}sm^{-2}), normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q$ nos diferentes tempos de medição.
- 5.5 - Desempenho do modelo ADMM – com $K(z)$ de Pleim Chang, 1992.
- 5.6 - Desempenho do modelo GILTT – com $K(z)$ de Pleim Chang, 1992.
- 5.7 – Concentração observadas (C_o) e as previstas C_p (10^{-4}sm^{-2}) nos modelos ADMM e GILTT, considerando o $K(z)$ de Pleim Chang, 1992, nos diferentes períodos de medição e com $\Delta t_1(s) = 600$ e $\Delta t_2(s)=60$
- 5.8 - Desempenho do modelo ADMM – $K(z)$ de Degrazia.et al., 2001.
- 5.9 - Desempenho do modelo GILTT – $K(z)$ de Degrazia et al., 2001.
- 5.10 – Concentrações observadas e as preditas nos modelos ADMM e GILTT, considerando o $K(z)$ de Degrazia, 2001, nos diferentes períodos de medição e com $\Delta t_1(s) = 120$ e $\Delta t_2(s)=120$

1. INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica é composta por substâncias nocivas não apenas ao homem e aos diversos ecossistemas, mas também aos materiais (exemplos: prédios, igrejas, obras de arte, etc...). São liberadas no ar quase sempre como produto da atividade humana, isto é, são substâncias presentes na composição do ar, em cujo estado original o ar não possui.

Os principais poluentes são aqueles emitidos por processos de combustão de qualquer natureza, ou seja, os hidrocarbonetos incombustos, o monóxido de carbono, os óxidos de nitrogênio (principalmente sob a forma de monóxido) e o material de partículas. No caso em que os combustíveis contêm enxofre, tem-se também a emissão de anidrido sulfuroso. Seguindo a emissão na atmosfera, os poluentes primários estão sujeitos a processos de difusão, transporte e deposição, mas também a processos de transformação físico-química, que podem levar à formação de novas espécies de poluentes, que freqüentemente são mais tóxicos e com um raio de ação ainda mais vasto que os originários.

A investigação da dispersão desses poluentes na atmosfera é fundamental na busca de alternativas que minimizem os impactos dessa dispersão ao meio ambiente. Somente com uma estimativa da concentração dos poluentes é possível encontrar tais alternativas, necessárias aos estudos relacionados aos impactos ambientais e, também, fazer uma avaliação das fontes existentes e a implantação de novas indústrias.

A estimativa da concentração de poluentes atmosféricos é determinada pela elaboração de modelos de dispersão. Um modelo de dispersão é uma expressão matemática dos efeitos da atmosfera sobre os poluentes atmosféricos. De acordo com os problemas ocasionados pela poluição do ar, é necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes para prever as possíveis conseqüências do impacto da poluição sobre os diversos ecossistemas.

O controle local ou regional da poluição atmosférica normalmente é feito pelas redes de monitoramento da qualidade do ar. Essas redes constituem uma ferramenta útil para a proteção da saúde humana e do ambiente, pois elas permitem avaliar os benefícios das ações de melhorias que predispõe intervenções específicas, caso os níveis superem os limites estabelecidos por lei.

Por motivos de caráter econômico e administrativo, o número de pontos de medida de uma rede é limitado e, acima de tudo, se a disposição delas não for estudada adequadamente, poderão estar posicionadas em um local pouco representativo. Por este motivo, os modelos matemáticos que simulam o transporte e a difusão dos poluentes na atmosfera constituem uma

importante ferramenta para auxiliar as medidas de concentrações e a evolução das mesmas. Através de modelos matemáticos, é possível fazer previsões ou simular campos de concentração em conexão com políticas de limitação da liberação de poluentes, em concordância com planos de melhoria da qualidade de vida da população.

Um instrumento particularmente útil na compreensão dos fenômenos que controlam o transporte, a dispersão e a transformação físico-química dos poluentes imersos na atmosfera é fornecido, como já foi dito, pelos modelos matemáticos. Estes modelos fornecendo uma avaliação do nível observado de poluentes e a causa-efeito das emissões podem ser utilizados para: prevenir eventos críticos de poluição, discriminar os efeitos de várias fontes e de vários poluentes, estimar o impacto de novas fontes e, enfim, avaliar o estado da qualidade do ar em um determinado lugar.

A dispersão dos poluentes atmosféricos pode ser simulada por diferentes metodologias, que são divididas principalmente em duas categorias: modelos Eulerianos e Lagrangeanos, cuja diferença básica é o sistema de referência. O sistema de referência Euleriano é fixo (em relação a terra), enquanto o sistema de referência Lagrangeano segue o movimento atmosférico.

Os modelos gaussianos, que são bem conhecidos nessa área, podem entrar em ambas as categorias (Euleriana e Lagrangeana), pois, segundo Tirabassi, 2005, fundamenta o pressuposto teórico da solução exata, mas não realística, da equação de transporte e difusão na atmosfera, no caso em que o vento e o coeficiente de difusão são constantes.

Uma das formas de se resolver o problema do fechamento da equação de advecção-difusão é baseada na hipótese de transporte por gradiente (teoria-K) que, em analogia à difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. A solução desta equação pode ser obtida numericamente ou de forma analítica, considerando-se algumas hipóteses que simplificam a equação original. É importante ressaltar que a busca de soluções analíticas são preferidas, pois reduzem o tempo computacional e, também, todos os parâmetros do problema aparecem explicitamente na solução, de forma que sua influência pode ser facilmente investigada.

Um dos objetivos do presente trabalho foi simular o comportamento de um poluente para uma emissão instantânea, em condições meteorológicas não homogêneas e não estacionárias, ou seja, um modelo a *puff*. Para tanto foram utilizados dois métodos para o cálculo da concentração. Na realização desta simulação usa-se um modelo Lagrangeano a *puff* Gaussiano bidimensional transiente, escrito em termos de função de Green unidimensional transiente e uma gaussiana em x , unidimensional transiente, caracterizando a difusão nessa direção. Em x , o

baricentro de cada *puff* é transportado pelo vento, variando no espaço. Outro objetivo é a construção da função de Green unidimensional transiente pelos métodos GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) e ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method). Como as formulações matemáticas de cada método são diferentes, tem-se também como objetivo, além de confrontá-los com dados experimentais existentes na literatura, compará-los entre si.

Convém salientar que, um dos diferenciais do presente trabalho, é que se utiliza o método GILTT ou ADMM para obter a solução do problema advectivo–difusivo como modelo a *puff*, o que não é considerado nos trabalhos existentes na literatura, pois são baseados na emissão contínua. Também, utiliza-se aqui a metodologia de Green, que possibilita a emissão arbitrária. Estas considerações demonstram que este trabalho, pelos resultados obtidos nas simulações, pode ser considerado como uma expansão desses métodos.

Esta proposta de tese encontra-se estruturada além da introdução, em quatro capítulos. No capítulo 2, apresenta-se uma revisão bibliográfica sobre os modelos matemáticos existentes na literatura, com enfoque maior nos modelos analíticos. No capítulo 3 a fundamentação teórica onde é apresentado o problema da poluição e um breve estudo sobre a classificação dos modelos matemáticos, que estudam a dispersão de poluentes. No capítulo 4 são apresentadas duas soluções analíticas para o problema de advecção-difusão bidimensional, transiente e não-homogêneo, com fonte arbitrária, que representa o problema proposto neste trabalho. No capítulo 5, apresenta-se a avaliação de cada modelo em relação aos resultados obtidos na pesquisa. Finaliza-se o trabalho com a conclusão.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera emprega-se normalmente a equação de advecção-difusão, que pode ser integrada (analítica ou numericamente) se são fornecidos os dados relativos aos coeficientes de difusão K , os de advecção u e fonte S , como também as condições iniciais e de contorno do problema a ser analisado. Observa-se na literatura que tais formas de soluções dessa equação, conhecidos como modelos eulerianos - modelos K , se diferenciam essencialmente pela função que utilizam para o coeficiente K e pela técnica utilizada para integração. Uma grande variedade de soluções numéricas pode ser encontrada na literatura: Nieuwstadt e Van Ulden, 1978, Lamb, 1978, e Carvalho, 1996. Entretanto, nas soluções analíticas todos os parâmetros são explicitamente expressos em uma fórmula matemática fechada e, conseqüentemente, uma análise sensível sobre os parâmetros do modelo pode ser realizada.

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

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \text{ e } z_i \rightarrow \infty \quad (2.1)$$

Essas condições de contorno são usualmente utilizadas nas soluções analíticas da equação de advecção-difusão e que corresponde a fluxo nulo de poluentes no solo e na parte superior da camada limite planetária.

Roberts, 1923, apresentou uma solução bidimensional da equação de advecção-difusão, somente para fontes ao nível do solo (superficiais), nos casos onde a velocidade média do vento u e o coeficiente de difusão vertical K_z seguem uma lei de potência em função da altura z . Isto é:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (2.2)$$

z_1 é a altura onde u_1 e K_1 são avaliados, m e n variam entre 0 e 1.

Rounds, 1955, obteve uma solução bidimensional válida para fontes elevadas com o perfil de velocidade média do vento descrito pelas equações (2.2), mas somente para perfis lineares de K_z .

Smith, 1957, resolveu a equação de transporte e difusão bidimensional, com u e K_z sendo funções de potência da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$). Posteriormente, ele apresentou a solução no caso de u constante, mas com K_z da seguinte forma:

$$K_z = K_0 z^\alpha (z_i - z)^\beta \quad (2.3)$$

onde K_0 é uma constante, α e β variam entre 0 e 1, de acordo com a altura da camada limite z_i , conforme apresenta-se abaixo:

$$\alpha \geq 0 \text{ e } \beta = 0$$

$$\alpha = 0 \text{ e } \beta > 0 \text{ para } 0 \leq z \leq z_i$$

$$\alpha = 1 \text{ e } \beta > 0 \text{ para } 0 \leq z \leq z_i$$

$$\alpha = 1 \text{ e } \beta = 0 \text{ para } 0 \leq z \leq z_i/2; \alpha = 0 \text{ e } \beta = 1 \text{ para } z_i/2 \leq z \leq z_i.$$

Scriven e Fisher, 1975, propuseram uma solução com u constante e K_z como segue:

$$K_z = z \text{ para } 0 \leq z \leq z_i \quad (2.4)$$

$$K_z = K_z(z_i) \text{ para } z_i < z \leq z_i \quad (2.5)$$

onde z_i é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada limite superficial). Esta solução tem sido usada no Reino Unido para transporte de poluentes de longo alcance.

Yeh e Huang, 1975, e Berlyand, 1975, (usada na Rússia) publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com u e K_z seguindo perfis de potência, para uma atmosfera sem contorno superior, isto é, $K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$. Tais soluções foram obtidas em termos de funções de Green. Demuth, 1978, avançou essa solução em termos de função de Bessel, com as mesmas condições, para uma camada limite verticalmente limitada, isto é, $K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$ em $z = a$, com a constante.

Aplicando a teoria de similaridade¹ de Monin-Obukhov, com a hipótese que u e K_z seguem perfis de potência, Van Ulden, 1978, derivou uma solução para a difusão vertical a partir de fontes contínuas próximas ao solo. Seus resultados, segundo Tirabassi, 2005, são similares aos de Roberts, 1923, mas ele obteve um modelo para fontes não-superficiais, porém, aplicável a fontes dentro da camada superficial.

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

$$K_z = G_c u_* z \left(1 - \frac{z}{z_i} \right) \quad (2.6)$$

onde G_c é uma constante e u_* é a velocidade de fricção. Posteriormente Nieuwstadt e Haan, 1981, estenderam esta solução, em termos de polinômios de Jacobi, para o caso de crescimento da altura da camada limite. Catalano, 1982, estendeu a solução para o caso de perfis de vento vertical não-nulo.

Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de Yeh e Huang, Berlyand e Demuth têm sido adotados: KAPPAG [Tirabassi et al., 1986] KAPPAG– LT [Tirabassi et al., 1989], CISP [Tirabassi e Rizza, 1992] e MAOC [Tirabassi e Rizza, 1993].

Kock, 1989, desenvolveu uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, onde o vento e as difusividades seguem os perfis de potência, incluindo efeitos de absorção de contaminante pelo solo. A deposição foi considerada em termos de funções hipergeométricas.

Chrysikopoulos et al., 1992, apresentaram uma solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo de uma fonte aérea contínua ao nível do solo, para os mesmos perfis de u e K_z dados pelas equações (2.2), incluindo um termo de deposição seca. As funções de Bessel e hipergeométricas foram incorporadas à solução.

Van Ulden, 1992, propôs uma solução aproximada para a dispersão de contaminante passivo liberado por uma fonte instantânea (a *puff*) próxima do solo, a solução aproximada descrevendo o campo de concentração como uma soma de *puffs*. Tirabassi e Rizza, 1994, utilizaram esta solução baseada na teoria da similaridade de Monin-Obukhov, chamado SPM – Skewed *Puff* Model. Também, em 1996, desenvolveram um modelo *puff* não-Gaussiano, fundamentado na técnica para resolução da equação K usando a expansão de Gram-Charlier para

¹ Teoria apresentada no próximo capítulo.

o campo de concentração e o sistema finito de equações para os momentos correspondentes. Fundamentado na mesma metodologia, Sertori, 2001, apresentou um modelo que simula uma emissão de poluentes (acidental ou contínua) na proximidade do solo. O modelo *California Puff Model* – CALPUFF, apresentado por Scire et al., 2000, é um modelo gaussiano a *puff*, que tem sido rotineiramente acoplado a modelos atmosféricos, desenvolvidos para aplicações sobre terreno complexo e turbulência não homogênea.

Sharan et al., 1996a, 1996b, desenvolveram modelos matemáticos com solução analítica, considerando velocidade do vento e coeficientes de difusão constantes para a dispersão atmosférica tridimensional com vento fraco. As soluções são apresentadas em termos de funções de Bessel e combinações lineares da função de Green.

Diversos são os métodos aplicados para encontrar soluções da equação de advecção-difusão. Particularmente, neste trabalho, o interesse maior são as soluções obtidas por meio da aplicação da Transformada de Laplace e também a Técnica da Transformada Integral Generalizada. Conseqüentemente, o enfoque a partir deste momento serão os modelos que utilizam estes métodos para obtenção da solução.

Moura et al., 1995, obtiveram uma solução analítica da equação de advecção-difusão unidimensional dependente do tempo, para dispersão de contaminantes passivos na camada limite estável - CLE². Os resultados foram obtidos com uso da técnica da Transformada de Laplace, utilizando o coeficiente de difusão K_z de Degrazia e Moraes, 1992. Posteriormente, Pires, 1996, apresentou uma solução similar para uma camada limite convectiva - CLC³, com uso do coeficiente de difusão dado por [Degrazia et al., 1995]. Moreira, 1996, expandiu a solução, propondo para o caso bidimensional estacionário usando o mesmo artifício dos trabalhos anteriores, também na CLC. Moreira et al., 1999, utilizaram os dados do experimento de Praire Grass e o coeficiente de difusão de Degrazia et al., 1997, na mesma equação.

Degrazia et al., 2001, desenvolveram um coeficiente difusivo K_z , resultante de um equacionamento bidimensional, advectivo-difusivo com coeficiente variável, cuja descrição do fenômeno da dispersão de poluentes é feita através do procedimento Euleriano, com uso dos dados do Experimento de Copenhagen.

Nos trabalhos de Moura et al., 1995, Pires, 1996, Moreira, 1996, Moreira et al., 1999 e Degrazia et al., 2001, comentados nos parágrafos anteriores, a metodologia adotada era dividir o domínio em vários sub-domínios e em cada um deles foram tomados valores médios do coeficiente difusivo K_z . Assim, o problema com coeficiente variável é substituído por um

² Ou Noturna, ocorre quando a superfície da terra se resfria. Também conhecida como camada limite noturna.

³ É a camada atmosférica que começa a forma-se do nascer sol e cessa com o por do sol.

conjunto de problemas com coeficientes constantes (coeficientes médios), acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminantes nas interfaces. A solução de cada um deles é obtida pelo uso da Transformada de Laplace, cuja inversão é calculada numericamente pelo esquema da quadratura de Gauss. Este método recebe o nome de ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method), sendo utilizado em 2003 por Ferreira Neto, 2003, para estimar o campo de concentração de poluentes na CLC e resolver a equação de advecção-difusão bidimensional transiente. Resultados deste trabalho também são apresentados em Moreira et al, 2005a.

Costa, 2004, estendeu o método ADMM resolvendo a equação unidimensional transiente considerando o fechamento não-local da turbulência. No mesmo ano, Buligon, 2004, resolveu a equação bidimensional estacionária também considerando o fechamento não-local e o método ADMM.

Para Heinen, 2005, nas últimas décadas, problemas em físico-matemática, no qual se enquadram os da dispersão de poluentes na camada limite planetária, têm sido resolvidos tanto por métodos numéricos, analíticos e também por métodos conhecidos como híbrido analítico-numéricos. Com o surgimento e o conseqüente avanço dos computadores, propiciou importantes avanços nos métodos numéricos. No entanto, a utilização de tais métodos envolve um alto custo computacional. O uso da computação simbólica associada aos métodos analíticos contribuiu para importantes melhorias, seja reduzindo custos computacionais ou na precisão dos resultados. Esta associação resultou nos chamados métodos híbridos analítico-numéricos. Dentre os híbridos, destaca-se a Transformada Integral Generalizada - GITT, de Cotta, 1993, e Cotta e Mikhaylov, 1997, que vem sendo utilizada com grande êxito na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de advecção-difusão. É interessante mencionar que esta técnica surgiu como uma evolução da transformação integral clássica de Mikhaylov e Özisik, 1984, que é aplicada para resolver problemas de difusão. Sua principal vantagem em relação à antecessora é que ela permite a abordagem de problemas advectivos-difusivos.

Fazendo-se uma comparação entre a utilização da GITT e o método ADMM, de Degrazia et al., 2001, em relação à obtenção da solução da equação de advecção-difusão, pode-se afirmar que a diferença está no fato que, na primeira não há necessidade da discretização do domínio.

Para Vilhena e Wortmann, 2005, a GITT foi construída para resolver problemas em domínio limitado, cuja idéia básica consiste na expansão da solução procurada em uma base de autofunções determinada a partir da solução de um problema de Sturm-Liouville associado. Depois disso, resulta um sistema de equações diferenciais ordinárias, lineares ou não,

dependendo do problema em questão, conhecido como problema transformado, e que é classicamente resolvido por códigos computacionais existentes na literatura, como, por exemplo, os códigos IMSL, LAPAC, etc. Com a solução do problema transformado, pode-se obter a solução do problema original por meio da fórmula inversa. A GITT tem como única aproximação o truncamento do somatório infinito da chamada fórmula da inversa da GITT, que fornece o resultado da equação governante do problema original. Este procedimento permite o controle automático do erro a partir da ordem de truncamento do referido somatório. Referências: [Santos, 1990]; [Pérez Gerrero e Cotta, 1992]; [Cotta et al., 1992]; [Cotta, 1993]; [Cotta, 1994a, b]; [Mikhailov e Cotta, 1994]; [Machado e Cotta, 1995], [Wortmann, 1995]; [Pérez Gerrero e Cotta, 1995]; [Pérez Gerrero e Cotta, 1996]; [Cheroto et al., 1999]; [Silva et al., 1999] e [Pimentel e Cotta, 1999].

Embora exista uma vasta bibliografia sobre GITT, a aplicação desta técnica em problemas de poluição atmosférica é recente. Cataldi et al., 2000, desenvolveram um modelo matemático que obtém a solução da equação de difusão atmosférica para uma fonte pontual instantânea. Ribeiro et al., 2000, geraram posteriormente uma simulação computacional para a dispersão de poluentes com uma fonte contínua e em condições de neutralidade atmosférica. Os estudos de Cataldi et al., 2000, e Ribeiro et al., 2000, concentraram-se na região da camada limite superficial. Em 2002, Ribeiro et al. obtiveram um avanço, avaliando o transporte de poluentes em toda a região da camada limite atmosférica. Velloso et al., em 2003, utilizaram a GITT num modelo que permite simular mecanismos de transporte na atmosfera, incluindo os processos de deposição de poluentes. Em 2003, Storch e Pimentel simularam a dispersão de poluentes através da equação de advecção-difusão. Para a obtenção dos resultados numéricos, foi considerado o transporte turbulento apenas na direção vertical. Almeida, 2005, também simulou a dispersão de poluentes resolvendo um problema advectivo - difusivo bi e tridimensionais transientes, com uso do método GITT dupla e tripla, respectivamente, para fontes em linhas e pontuais. Esse trabalho faz uso de filtros nos contornos, para possibilitar a aplicação do método GITT.

Em todos os trabalhos citados no parágrafo anterior, os procedimentos para solução de cada um dos problemas eram da seguinte forma: faz-se a transformação integral das equações governantes do problema considerado. O sistema resultante da transformação integral é resolvido numericamente. Finaliza com a inversão da transformação integral para reconstruir o potencial original.

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

Wortmann et al, 2000, resolveu um problema difusivo, unidimensional, dependente do tempo com coeficiente de difusão variável que, segundo os autores, era a primeira aplicação da GITT na simulação da dispersão de poluentes na atmosfera com o coeficiente de difusão K_z variável. Em 2003, Buske et al., usando a mesma idéia, apresentaram a derivação matemática de um problema bidimensional advectivo-difusivo estacionário, que modela a dispersão de poluentes na camada limite planetária. O método GILTT(“Generalized Integral Laplace Transform Technique”), no qual o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) transformado é resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Os resultados deste problema são apresentados em Wortmann et al., 2000 e, neste trabalho, foram comparados com os modelos ADMM, de Vilhena et al., 1998, e KAPPA-G de Tirabassi et al., 1986. Em todos estes trabalhos, foi utilizado um coeficiente de difusão variável com altura dado por Degrazia et al., 1997.

A novidade no uso da GILTT em relação ao da GITT, que obtém a solução do problema transformado numericamente, [Cotta, 1993], [Cotta e Mikhaylov, 1997], surgiu com o trabalho de Wortmann et al., 2000, que resolve o problema transformado analiticamente, pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Então, pode-se afirmar que nos trabalhos de Wortmann et al., 2000, Buske, 2003, Wortmann et al., 2005, e Moreira et al, 2005b, faz-se a transformação integral normal até a obtenção do sistema EDO. Aplica-se a transformada de Laplace neste sistema, obtendo-se um sistema algébrico. A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Depois da fatoração, a matriz é invertida, analiticamente e sem custo computacional (devido à matriz ser diagonalizada), para se obter a solução do sistema algébrico. A transformada inversa de Laplace também é resolvida analiticamente. Assim, é obtida, de forma totalmente analítica, a solução do problema transformado.

Em 2005, foi apresentado um confronto dos dois métodos GILTT e ADMM, [Buske et al., 2005], para o caso estável onde foram utilizados os dados experimentais de Minnessota e Cabauw, sendo verificados resultados similares. Costa, et al., 2005, avançou apresentando uma solução para a equação de advecção-difusão tridimensional. Para realizar este objetivo a equação foi resolvida combinando o método ADMM e a técnica GILTT. Esse novo método foi denominado GIADMT (Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique).

Todos os modelos descritos anteriormente, que usam as metodologias ADMM ou GILTT com ponto de emissão, consideram a fonte como contínua. O modelo desenvolvido neste trabalho determina a concentração $c(z,t)$ por meio dessas duas metodologias, considerando fonte instantânea (*puff*), o que demonstra ser mais uma expansão desses modelos. O próximo capítulo apresenta a fundamentação teórica deste trabalho.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A dispersão de poluentes na atmosfera depende principalmente de fatores meteorológicos da região em estudo, tais como, por exemplo, a velocidade e direção do vento e da temperatura do ar.

É na troposfera, camada mais próxima da superfície da terra, onde ocorrem os fenômenos meteorológicos. Ela é composta por duas camadas: uma de espessura de 1 Km a, no máximo, 3 Km, adjacente a superfície terrestre chamada Camada Limite Planetária (CLP) e outra, acima desta, chamada Atmosfera Livre.

Define-se a CLP como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra, em cujos tempos de resposta são da ordem de uma hora ou menos. A influência da superfície inclui atrito superficial, evaporação e transpiração, transferência de calor e modificações do campo de vento induzidos pelo solo e por sua orografia. Para tais fatores, de origem física, pode-se adicionar também, por motivo de atividade antropológica, a emissão dos poluentes. É nesta camada que ocorre a dispersão de poluentes, pois é a região mais próxima da superfície da terra onde se localizam as fontes de emissão. Descreve-se na próxima seção mais detalhes dessa camada.

3.1 - Camada Limite Planetária (CLP)

O movimento caótico do ar, induzido pelo atrito do vento com o solo, do aquecimento do mesmo pelo sol e do resfriamento dele durante a noite, é um fenômeno extremamente complexo que provoca a dispersão de poluentes na horizontal como também na vertical.

Conhecer o comportamento das grandezas meteorológicas permite avaliar o transporte e difusão de um poluente emitido na atmosfera e, portanto, relacionar o campo de concentração com as fontes de emissão.

Salienta-se que é necessário diversificar este campo de estudo, porque os movimentos do ar são referentes às escalas temporais e espaciais, que vão da fração de centímetros ao comprimento da circunferência do globo terrestre na horizontal, até a estratosfera⁴ na vertical.

⁴ Camada da atmosfera superior à troposfera, chega a medir 50 km do solo. Nesta camada contém ozônio, um gás que absorve os prejudiciais raios ultravioletas do sol. Hoje, a poluição está ocasionando os chamados "buracos" na camada de ozônio.

Distinguem - se, segundo Panofsky e Dutton, 1984, as escalas:

- *Micro-escala* – é o estudo em relação à escala local dos fenômenos meteorológicos, com uma escala espacial na ordem de alguns quilômetros e com a temporal na ordem da hora;
- *Meso-escala* – é o estudo em relação à escala regional, com uma escala espacial na ordem das centenas de quilômetros e com a temporal que varia de horas do dia inteiro;
- *Macro-escala ou escala sinótica* - é o estudo em relação à escala global, para áreas continentais.

Neste trabalho considera-se a micro-escala, isto é, estuda-se a dispersão de poluentes nas vizinhanças da fonte de emissão. Para a escolha desse tipo de escala, o campo de estudos será limitado à física da camada atmosférica mais próxima da superfície terrestre, na qual estão concentradas as estruturas e as atividades do homem. Para este trabalho, estuda-se a dispersão de poluentes na CLP.

A variação da temperatura na camada limite é causada pelo aquecimento e resfriamento da superfície da terra. Nessa camada o transporte de poluentes é dominado na horizontal pelo vento médio (advecção) e na vertical pela turbulência, que é constituída de vários turbilhões, que se sobrepõem e cujos tamanhos são variáveis (da ordem de 1 mm a 3000m de diâmetro). A soma das contribuições de todos estes turbilhões constitui o espectro de energia turbulenta.

As perturbações induzidas pelo solo são de vários tipos. As principais são: as resistências aos movimentos atmosféricos (atrito), a evaporação e a transpiração, a transferência de calor, a introdução de poluentes e as modificações do fluxo das massas do ar por obra da orografia (referente ao relevo).

Desta forma, as variáveis meteorológicas que, na CLP, intervêm no processo de dispersão de um poluente emitido por uma fonte, são [Zannetti, 1990]:

1. A velocidade e a direção do vento,
2. A turbulência atmosférica,
3. A estratificação térmica vertical do ar.

Estas grandezas não são variáveis e independentes entre si, mas existe, mais ou menos explicitamente, um vínculo de independência entre elas.

3.1.1 - Perfil do vento na CLP

O vento é o resultado do equilíbrio de três forças [Zannetti, 1990]:

- o gradiente horizontal de pressão,
- a força de *Coriolis*⁵ e
- a força de atrito viscoso devido à presença da superfície.

As massas de ar deslocam-se das zonas com maior pressão para aquelas com pressão inferior. A força de *Coriolis* (F_c) faz com que o vento resultante corte as isóbaras⁶ (Figura 3.1), desviando o fluxo do ar em direção à direita no hemisfério setentrional e à esquerda no hemisfério austral.

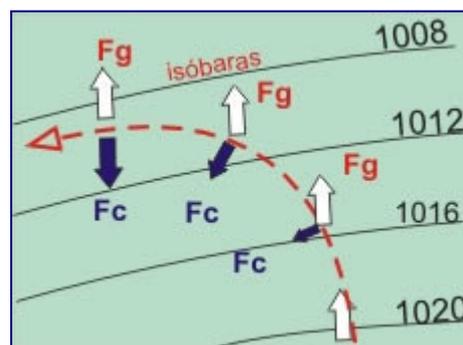


Figura 3.1 - A força de gradiente (F_g) faz com que a velocidade do vento aumente, e com esse aumento, a força de *Coriolis* também aumenta até um valor que vai compensar a força de gradiente [Reis, 2007].

Em alturas elevadas, acima dos 1500 a 2000 metros aproximadamente, o fluxo médio do ar pode ser descrito numa primeira aproximação do assim denominado *vento geostrófico* (Figura 3.2), gerado pelo equilíbrio entre o gradiente de pressão e a força de *Coriolis*. Em baixa quota age também a força de atrito viscoso, cuja ação é, ao máximo, no nível do solo, provocando uma mudança da velocidade e da direção do vento. A velocidade do vento se anula no solo e cresce até o valor geostrófico, a uma quota da qual, depende do atrito superficial. O vento no solo apresenta um desvio em relação à direção do vento geostrófico entre 15° e 50° [Zannetti, 1990].

⁵Força devido à rotação terrestre.

⁶ São linhas que unem os pontos da atmosfera de igual pressão (curvas de nível), indicam a pressão nas cartas Meteorológicas.



Figura 3.2 – *Vento Geostrófico*. [Reis, 2007].

A variação juntamente com a quota da velocidade média do vento é calculada através da lei de potência [Avaltroni, 2002]:

$$\frac{\overline{u}_z}{\overline{u}_0} = \left(\frac{z}{z_0} \right)^n \quad (3.1)$$

onde: \overline{u}_z e \overline{u}_0 representam as velocidades médias do vento às alturas z e z_0 , respectivamente, n pode variar no intervalo (0, 0.8) conforme as condições de turbulência atmosférica.

3.1.2 - Difusão turbulenta

A difusão turbulenta é aquele conjunto de flutuações causais, aperiódicas e não correlacionadas à velocidade do vento, que se sobrepõem ao movimento médio do ar e misturam a nuvem de poluentes com o ar circunstante, contribuindo para a sua diluição. Pode ser representada como um conjunto de vórtices de várias grandezas, compreendendo-se com este termo, puramente simbólico, toda uma variedade de movimentos vorticosos relativos à difusão na atmosfera de uma grandeza qualquer, que não seja distribuída de modo uniforme e que é gerada por dois fatores, [Sertori, 2001]:

- ✓ rugosidade do solo, responsável pela turbulência de tipo *mecânica*;
- ✓ aquecimento solar do solo, que causa a turbulência de tipo *térmica*.

No item 3.1.1 descreveu-se o efeito da superfície terrestre sobre o perfil do vento; em particular o atrito, gerado sobre as massas de ar que se movem na proximidade do solo, e que causa variações na velocidade média e na direção do vento, tornando-se, às vezes, fontes de turbulência.

A maior parte da turbulência é, porém, gerada pelo aquecimento do ar e do solo, que é por sua vez aquecido pelas radiações solares: de dia o ar mais quente proveniente do terreno sobe a quotas mais elevadas na CLP, cedendo progressivamente o seu calor; portanto descendo, produzindo vórtices de amplas dimensões, estendidos em toda camada limite atmosférica. À noite a amplitude destes vórtices diminui.

O perfil do vento diurno é mais uniforme do que o noturno, devido à mistura turbulenta ser maior durante o dia. Os movimentos turbulentos que derivam das variações do perfil do vento são importantes para a diluição dos poluentes.

Por exemplo, um volume de ar deslocado de um lugar a outro, alcançará o novo lugar com uma parte da sua quantidade de movimento e com certa energia térmica, isso constituirá uma espécie de perturbação em relação ao novo regime de movimento que o circunda. O estado turbulento da atmosfera é, portanto, produzido e incrementado por esta não homogeneidade vertical.

Vórtices muito amplos (em relação à amplitude da pluma), que aparecem frequentemente em condições de turbulência térmica, determinam amplos movimentos da pluma, mas uma pequena dispersão do poluente. Pequenos vórtices, ao invés, acrescem as dimensões da pluma sem fazê-lo ondular.

3.1.3 - Gradiente térmico vertical e estabilidade atmosférica

A variação da temperatura juntamente com a altura (*gradiente de temperatura vertical*) ocupa um papel fundamental na difusão de um poluente na atmosfera, porque pode contribuir para ampliar ou reduzir a dispersão do poluente.

Considerando-se um volume hipotético de ar seco, que se move verticalmente na atmosfera: a sua temperatura varia de acordo com a expansão (ou compressão), que ocorre na fase de subida (ou descida).

Se o processo de expansão (ou compressão) ocorre sem a troca de calor com o ambiente circunstante (como ocorre na atmosfera), a variação da temperatura da massa de ar é adiabática e se fala de *gradiente adiabático seco*. Tal gradiente para uma atmosfera *standard* é [Avaltroni, 2002]:

$$\gamma = \frac{dT}{dz} = -0.0098 \text{ } ^\circ\text{C/m} \quad (3.2)$$

Esta variação, de cerca de um grau a cada 100 metros, é a condição que se verifica em um estrato atmosférico no qual exista uma boa mistura vertical das massas do ar devido, essencialmente, à turbulência de origem mecânica ou na presença de ventos fortes.

A definição do gradiente adiabático deve ser modificada se o volume do ar levado em consideração conter vapor d'água, enquanto o processo de subida (ou descida) de tal volume é acompanhado pela emissão (ou pelo acúmulo) de calor latente⁷. É introduzida neste caso a *temperatura virtual*, que representa a temperatura que o ar seco deveria ter para se igualar à densidade de um dado ar úmido na mesma pressão.

Assim, ao invés de se estudar as variações de densidade, se limitam a tratar das variações de temperatura virtual. O vapor de água é menos denso do que o ar seco, portanto o ar úmido não saturado é mais flutuante em relação ao ar seco na mesma temperatura. A temperatura virtual do ar úmido não saturado é por isso sempre superior à temperatura absoluta do ar seco.

Em contrapartida, o ar com água líquida é mais denso do que o ar seco; por isto o ar contendo gotículas de água em suspensão (as nuvens) é mais pesado, dessa forma, menos flutuante do que o ar que não as contém. Uma descrição das variáveis ligadas aos processos relativos ao transporte do ar úmido encontra-se em Stull, 1988.

Para os movimentos verticais da atmosfera, o perfil adiabático de temperatura representa o estado de equilíbrio indiferente, o estado da atmosfera é denominado *neutral*. Se, de fato, certo volume de ar possui uma temperatura diferente daquela circunstante, este tenderá a subir ou a descer na medida em que esteja mais quente ou mais frio do que a atmosfera onde se move. Disto segue que, em uma atmosfera com o gradiente superadiabático, ou seja, no qual a diminuição da temperatura juntamente com a altura é superior ao valor de 1°C (um grau centígrado) a cada 100 metros, um volume de ar, dotado de movimento ascensional, sem troca de calor com o ambiente circunstante, encontrará no seu caminho ar circunstante mais frio e, portanto, o seu movimento vertical será reforçado. Também o seu movimento para baixo seria amplificado por causa do menor aquecimento do volume de ar em relação àquele do ambiente, uma atmosfera com um gradiente superadiabático, é denominada *instável*. Em tais condições, a mistura do ar é favorecida e, em consequência, os poluentes seriam dispersos em volumes de ar demasiadamente grandes.

⁷Calor latente é a grandeza física que determina a quantidade de calor que uma unidade de massa de determinada substância deve receber para mudar de estado físico.

Ao contrário, se o gradiente atmosférico é inferior aquele adiabático, a atmosfera é denominada *estável*, pois os movimentos verticais são amortizados. O volume de ar considerado, que alcança com o movimento ascensional uma certa altura em condições neutrais terá, em condições estáveis e na mesma altura do solo, um peso maior, enquanto que a sua temperatura será inferior àquela do ambiente e tenderá ainda a retornar à posição inicial.

Define-se *temperatura potencial* (θ), a temperatura de uma massa de ar que se comporta de maneira adiabaticamente na altura, na qual a pressão é igual a 1000 mb. Esta temperatura é função da temperatura T e da pressão P finais da massa de ar [Stern, 1976]:

$$\theta = T(P_o / P)^{2/7} \quad (3.3)$$

Onde P_o é a pressão de referência (1000 mb).

Uma fórmula aproximada válida na proximidade do solo para a temperatura potencial é [Stern, 1976]:

$$\theta = T + \gamma z \quad (3.4)$$

onde z é a altura e γ é o gradiente adiabático.

O gradiente de temperatura potencial $d\theta/dz$ é dado pela $(dT/dz) + \gamma$, que é nulo em uma atmosfera adiabática.

Pode-se agora esquematizar as *condições de estabilidade* da atmosfera:

$d\theta/dz = 0$ *atmosfera neutra*: gradiente adiabático seco $dT/dz = \gamma$;

$d\theta/dz > 0$ *atmosfera estável*: gradiente sub-adiabático $dT/dz > \gamma$;

$d\theta/dz < 0$ *atmosfera instável*: gradiente superadiabático $dT/dz < \gamma$.

Em condições fortemente estáveis, ou seja, com um gradiente de temperatura positivo, pode-se formar uma *camada de inversão* seja a baixa altura, seja em proximidade do solo por causas diversas, entre as quais lista-se:

- O resfriamento da superfície terrestre nas horas noturnas (*inversão radioativa*);
- O abaixamento de massas de ar nas zonas anticiclônicas (*inversão da subsidência*, que significa: lento movimento de descida do ar, característicos nas zonas anticiclônicas, que acarreta um aquecimento, por compressão do próprio ar);

- A passagem de duas frentes caracterizadas por fortes diferenças de temperatura (*inversão devida a frentes*);
- A advecção do ar quente sobre um estrato frio em condições particulares orográficas (*inversão por advecção*).

A camada de inversão é caracterizada pela altura da sua base, pela sua espessura e pelo valor do gradiente térmico; a sua presença em quota pode impedir a difusão dos poluentes em quotas superiores.

3.2 - A estrutura da CLP

A CLP é tradicionalmente subdividida em camadas, caracterizadas por parâmetros de escala diferentes.

Sobre terra firme a CLP tem uma estrutura bem definida, como indicado na Figura 3.2, que de acordo com Stull, 1988, as principais componentes dessa estrutura são:

- ✓ Camada Limite Convectiva - CLC
- ✓ Camada Residual Noturna - CRN;
- ✓ Camada Limite Estável - CLE

Na proximidade do solo tem-se:

A Camada Limite Superficial (CLS) - pode ser considerada como a parte inferior da CLC ou da CLE, onde predomina a turbulência mecânica, está restrita a alturas menores do que $z \leq |L|$, onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, definido pela expressão:

$$L = - \frac{u_*^3}{k \frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0} \quad (3.5)$$

Onde, Θ é a temperatura potencial média, $(\overline{w\theta})_0$ é o fluxo de calor turbulento na superfície, u_* a velocidade de fricção na superfície, k a constante de Von-Karman (na qual o valor é compreendido em um intervalo que vai de cerca 0.35 a 0.42, fixado de modo diferente pelos diversos autores) e g a aceleração da gravidade.

3.2.1 – Camada Limite Convectiva (CLC)

É a camada que inicia ao nascer do sol, aquecendo a superfície produzindo *termas* de ar quente que se elevam provocando o crescimento da CLP. Cessa-se ao pôr do sol e é caracterizada por uma forte mistura vertical (camada de mistura - CM– Figura 3.3) gerada pelo fluxo de calor turbulento positivo. A turbulência na camada CLC é de natureza prevalentemente convectiva, isto é, devido ao transporte de calor da superfície terrestre quente e ao resfriamento radioativo do estrato das nuvens.



Figura 3.3 - Estratificação da CLP. Adaptado de Stull, 1988.

O transporte de calor da superfície terrestre quente gera fluxos de ar quente que sobem do solo, enquanto o resfriamento radioativo do estrato das nuvens gera fluxos descendentes de ar frio. Ambos os processos podem ocorrer contemporaneamente, especialmente na presença de uma camada acumulada fria que prevalece sobre a camada de mistura e que se move sobre um solo quente.

Mesmo se a convecção é o mecanismo dominante, frequentemente está presente um gradiente vertical do vento, que contribui para a geração da turbulência. A CM tem uma altura variável que, estende-se do solo ($z = |L|$) (com L sendo o comprimento de Monin – Obukhov), até a base de uma inversão ($z = z_i$, altura da CLC, geralmente variando de 1000m a 2000m).

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

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

Na parte central do EM a velocidade e a direção do vento são constantes. Na proximidade do solo, ao invés, a velocidade do vento tende a anular-se e o seu perfil assume na CLS um andamento quase logarítmico. À medida que se aproxima do solo a direção do vento cruza as isóbaras com ângulos sempre maiores, que podem atingir os 45°.

3.2.2 – Camada Residual Noturna (CRN)

É a camada de ar que surge um pouco antes do por do sol, quando cessa a formação de termas (elevação de massas de ar da superfície) diminuindo a turbulência na camada precedentemente misturada. A camada de ar resultante desse fenômeno é a CRN e suas características são essencialmente as mesmas da camada de mistura. Nela não existem movimentos advectivos. É composta por resíduos gasosos passivos que foram dispersos pela CLC.

3.2.3 – A camada estável (CE)

Ao anoitecer a superfície terrestre se resfria ocasionando uma diminuição significativa dos movimentos convectivos (difusão) e, por isso, a dispersão é basicamente horizontal (advecção).

O resfriamento da superfície nessa camada provoca um fluxo de calor negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões, permitindo somente que os pequenos sobrevivam. Por este motivo, a turbulência, nesta camada, é menos intensa que na CLC, conseqüentemente, poluentes emitidos nela se dispensam lentamente na horizontal.

3.3 - Teoria da Similaridade

A impossibilidade de resolver as equações que governam a turbulência atmosférica levou ao desenvolvimento da Teoria de Similaridade a qual torna possível o desenvolvimento de relações empíricas para as variáveis da camada limite. Ela se baseia na análise dimensional das grandezas

para construir relações adimensionais entre as diferentes quantidades, colocando em evidência uma lei de escala entre elas [Stull, 1988].

A Teoria de Similaridade é um mecanismo que ajuda entender o fenômeno da Turbulência, sendo esta controlada por influências dominantes como forçantes térmicos, mecânicos e topografia.

Para Moraes, 2000, o objetivo da hipótese de similaridade é encontrar escalas que permitam que observações feitas em diferentes alturas ou em diferentes condições sejam descritas através de relações comuns. Essas relações comuns são definidas como grupos adimensionais que são utilizadas na Camada Superficial, seguindo as escalas de velocidade u_* e temperatura T de acordo com a hipótese de similaridade de Monin-Obukhov, 1954.

3.3.1 – Teoria da Similaridade de Monin - Obukhov

Monin e Obukhov, em 1954, aplicaram a teoria da similaridade na camada limite superficial (CLS), com o intuito de obter uma relação entre os fluxos turbulentos e os gradientes. Esta teoria conhecida como Teoria de Similaridade de Monin- Obukhov combina a turbulência mecânica com a convectiva.

O comprimento de Monin- Obukhov, dado pela equação (3.5), é a altura da CLP onde os efeitos da turbulência mecânica se equivalem aos efeitos da turbulência convectiva. Está relacionado com o fluxo de calor sensível, pois ele é negativo em condições instáveis (fluxo de calor sensível positivo), infinito em neutra (fluxo de calor sensível igual a zero) e positivo em estável (fluxo de calor sensível negativo).

De acordo com o procedimento sugerido pela teoria da Similaridade uma análise das dimensões envolvidas leva a identificação entre grandezas chave (são três, de fato, as dimensões fundamentais: u_* , z e θ_* , sendo:

- ✓ u_* velocidade de fricção e é dado pela relação:

$$u_*^2 = -(u'w') \quad (3.6)$$

onde $-(u'w')$, é o stress superficial de Reynolds.

- ✓ z é a altura e
- ✓ θ_* é a temperatura de escala

Estas três variáveis definem um grupo (ou parâmetro) adimensional que satisfaz as condições impostas pela teoria da Similaridade:

$$\zeta = z / L \quad (3.7)$$

Onde ζ é utilizado habitualmente para o estabelecimento de parâmetros da estabilidade atmosférica.

3.4 – Modelagem Matemática da Dispersão de Poluentes na CLP

Os modelos matemáticos são instrumentos fundamentais para a maioria dos estudos relacionados à poluição atmosférica e podem ser utilizados para: descrever e interpretar os dados experimentais; controlar em tempo real e/ou analisar a qualidade do ar; gerir as emissões acidentais e avaliar as áreas de risco; identificar as fontes poluentes e avaliar a singular contribuição à carga poluente e gerir e planejar o território.

Existem numerosos modelos matemáticos de difusão de poluentes na atmosfera que podem ser utilizados para descrever os propósitos citados acima. O fenômeno da difusão turbulenta na atmosfera não foi até o momento, unicamente formulado. Conseqüentemente, não existe ainda um modelo único para explicar todos os fenômenos observados [Tirabassi, 2005].

Um modelo é escolhido com base nos objetivos que se deseja atingir e nos meios que se têm à disposição, tais como [Tirabassi, 2005]: qualidade e detalhe das informações disponíveis: dados de emissão, dados meteorológicos e medidas de concentração; tipologia do poluente (reativo ou não reativo); resolução temporal das simulações (resultados instantâneos em curto período, ou médias climatológicas); escalas temporais e espaciais dos processos; características do domínio (terrenos planos, orografia complexa); instrumentos de cálculo disponíveis.

É possível dividir os modelos matemáticos, que permitem a simulação da difusão dos poluentes em duas categorias [Anfossi, 2005]:

- (a) Modelos Eulerianos
- (b) Modelos Lagrangeanos.

A diferença fundamental entre eles é apresentada na Figura 3.4: o sistema de coordenadas de um modelo Euleriano é fixo no espaço (em relação a terra), enquanto num modelo Lagrangeano

segue o movimento médio do fluxo atmosférico.

Os modelos gaussianos podem entrar em ambas as categorias, como por exemplo, os Eulerianos do tipo pluma gaussiana e os Lagrangeanos do tipo modelo a *puff*, que são obtidos pela solução da equação de advecção-difusão, equação (3.12) deste trabalho. Por isso, são considerados por Longhetto, 1980, como uma subclasse das duas categorias (a) e (b). O modelo gaussiano do tipo modelo pluma é estacionário e se aplicam somente a situações de vento constante e turbulência homogênea, que dificilmente são encontradas na CLP. A solução é forçada a representar situações reais por meio de parâmetros empíricos, os chamados sigmas (σ). Os Lagrangeanos do tipo a *puff*, aperfeiçoamentos dos modelos pluma, possuem uma aplicabilidade bem maior, com a vantagem de consumir em média 30 vezes menos tempo de CPU do que os modelos lagrangeanos de partícula [Souto *et al.*, 2001], descritos posteriormente neste capítulo. Embora os modelos gaussianos possam ser tanto eulerianos como lagrangeanos, neste trabalho, eles são apresentados separadamente devido ao seu grande uso operacional.

3.4.1 - Modelos de Dispersão Eulerianos: modelos *K*

Os modelos eulerianos são usados para o estudo de problemas complexos, tais como, a dispersão dos poluentes numa orografia complexa ou na difusão de poluentes não-inertes. Nestes a dispersão é estudada em termos da equação (3.8) de conservação da massa de espécie química poluente, expressa em termos da concentração $c(x, y, z, t)$, sendo resolvida em uma grade fixa no tempo e no espaço [Zannetti, 1990].

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u_v \nabla c + D \nabla^2 c + S \quad (3.8)$$

onde, u_v é o vetor da velocidade do vento, de componentes: u, v, w ; $D \nabla^2 c$ é o termo de difusão molecular, onde D , coeficiente de difusão molecular, as vezes é desprezado devido a turbulência ser um fenômeno sempre dominante em relação ao transporte laminar; S é o termo relativo à fonte (mede a intensidade da emissão e representa também a cinética de remoção do poluente); ∇ é o operador gradiente e ∇^2 é o laplaciano.

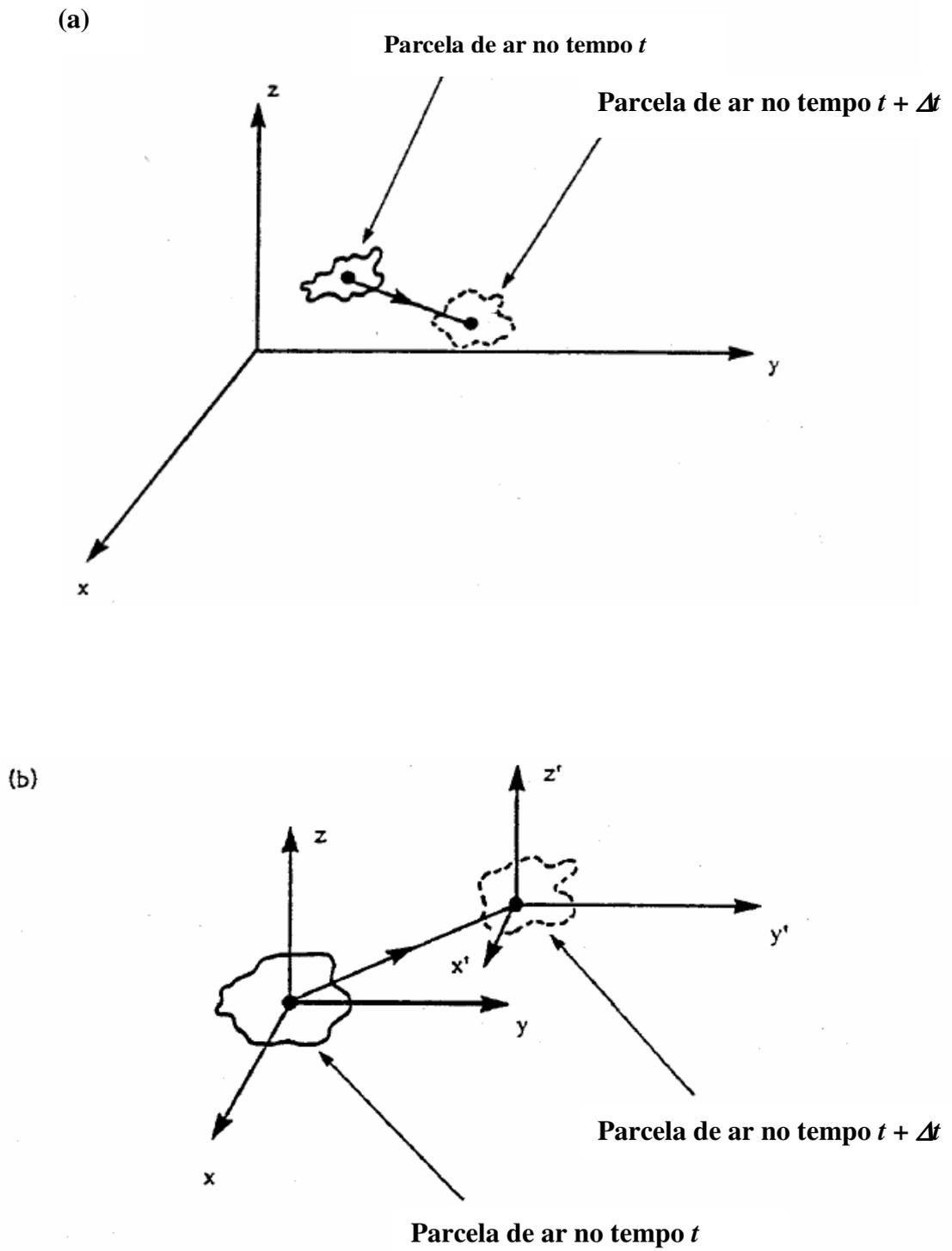


Figura 3.4: Os sistemas de referência Euleriano (a) e lagrangeano (b) para os movimentos da atmosfera. Adaptado de Zannetti, 1990.

Assim, para resolver a equação (3.8) deve-se conhecer o campo do vento u , o que não é possível por ele ser extremamente variável no espaço e no tempo. Como consequência, aplicando-se a hipótese de Reynolds, tanto o vetor da velocidade do vento como o campo de concentração são decompostos nas componentes de média e de flutuação:

$$u_v = \bar{u} + u' \quad (3.9a)$$

$$c = \bar{c} + c' \quad (3.9b)$$

Onde \bar{u} é considerada a velocidade média do vento; u' é a flutuação turbulenta do vento com média nula. Esta mesma consideração é feita para a concentração.

Conseqüentemente, reescrevendo a equação (3.8) tem-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\bar{u}\nabla\bar{c} - \nabla\overline{c'u'} + D\nabla^2\bar{c} + S \quad (3.10)$$

onde o termo $\overline{c'u'}$ representa o fluxo turbulento.

O aparecimento de novos termos na equação (3.10) para as quantidades médias nos leva a ter um número de incógnitas maior do que o número de equações, logo o sistema de equações não é fechado, isto é, não possui solução única. Este problema, na mecânica dos fluidos, é o assim denominado problema do fechamento da turbulência na CLP.

Uma solução para este problema consiste em utilizar somente um número finito de equações, relativas a certo número de incógnitas e em estabelecer parâmetros para as remanescentes em termos de quantidades conhecidas. A proposta mais clássica e utilizada para remediar o problema do fechamento de primeira ordem é a definição de parâmetros para os momentos de segunda ordem, assumindo uma analogia hipotética entre a difusão molecular e as transferências turbulentas. Ela se fundamenta na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) que, em analogia a difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média, hipótese de Boussinesq. Ou seja:

$$\overline{c'u'} = -K\nabla\bar{c} \quad (3.11)$$

onde K é o coeficiente de difusão turbulenta. Reescrevendo a equação (3.10) tem-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\bar{u} \cdot \nabla \bar{c} + \nabla \cdot K \nabla \bar{c} + S \quad (3.12)$$

A equação (3.12) é o ponto de partida de muitos tratamentos matemáticos da difusão de poluentes na CLP. Desta forma, a equação pode ser resolvida (analítica ou numericamente) conforme sejam fornecidos os dados relativos a u , K e S , juntamente com as condições iniciais e de contorno.

A teoria K de difusão turbulenta tem sido muito utilizada como base matemática para simulação da dispersão de poluentes na CLP. Fechamentos de alta ordem são ainda impraticáveis. Isto se deve ao tempo computacional de execução ser grande. Além disso, o fechamento K tem seus próprios limites. O limite principal deste método é o fato que, diferente da difusão molecular, a difusão turbulenta não é uma propriedade do fluido, mas da estrutura do escoamento turbulento, que é determinado pelo grau de estabilidade da atmosfera. Quando a nuvem cresce, turbilhões maiores são incorporados ao processo de expansão, de forma que uma fração progressivamente maior da energia cinética turbulenta está disponível para a expansão da nuvem. Porém, turbilhões maiores que a própria nuvem são relativamente sem importância em sua expansão. Assim, a teoria de transferência por gradiente trabalha bem quando a dimensão do material dispersado é muito maior que o tamanho dos turbilhões envolvidos no processo de difusão, ou seja, para liberações ao nível do solo e para grandes tempos de difusão. Especificamente falando, deve-se introduzir um coeficiente de difusão não somente função da estabilidade atmosférica e altura de liberação, mas também para tempo de viagem ou distância da fonte. Porém tal dependência temporal torna difícil o tratamento matemático para se obter a solução da equação de difusão em um sistema de coordenadas fixo, quando várias fontes devem ser tratadas simultaneamente. Caso contrário deve-se limitar a aplicação da teoria K para grandes tempos de difusão [Pasquill e Smith, 1983].

Apesar dos limites anteriormente descritos, a teoria K é largamente utilizada em muitas condições atmosféricas, porque descreve o transporte difusivo de forma Euleriana, assim como quase todas as medidas, produzindo resultados tanto realísticos, se comparados com dados experimentais, quanto qualquer modelo mais complexo. Também, computacionalmente não exige tanto quanto os modelos de ordem superior [Moreira, 2004].

Na solução da equação (3.12) são empregados dois tipos de métodos: o primeiro seria métodos numéricos do tipo volumes finitos, diferenças finitas, elementos finitos, [Maliska, 1995], obtendo-se soluções aproximadas; o segundo, métodos analíticos, obtendo-se soluções exatas.

Os valores da concentração no modelos K são obtidos para cada um dos volumes(pontos) de uma grade. O principal desafio destes modelos é a determinação dos coeficientes de difusão turbulenta K_i , onde $i = x, y, z$. Estas difusividades são dependentes da posição e do tempo. Ao invés dos coeficientes de difusão molecular, não são funções do fluido, mas sim do estado do escoamento. Desta forma, diversas aproximações são utilizadas para estimar tais difusividades (*exemplos*: Teoria das similaridades de Monin-Obukhov e Teoria estatística de Taylor da turbulência).

3.4.2 - Modelos de Dispersão Lagrangeanos de Partícula

Para Carvalho, 1999, a aproximação lagrangeana é uma técnica alternativa para se obter as concentrações médias sem precisar resolver a equação (3.12). No esquema lagrangeano formula-se um modelo de trajetórias para o movimento das partículas de fluido. O elemento ou partícula de um fluido é um pequeno volume de controle que viaja na velocidade local do meio fluido. A sua dimensão é grande quando comparada com as escalas moleculares e pequena em relação à menor escala de movimento, a microescala de Kolmogorov. As partículas movem-se seguindo os vórtices turbulentos, descrevendo trajetórias aleatórias.

A equação Lagrangeana fundamental para a dispersão atmosférica de uma espécie de poluente, segundo Carvalho, 1999 é:

$$c(x,t) = \int_0^t \int P(x,t | x',t') S(x',t') dx' dt' \quad (3.13)$$

onde, $c(x,t)$ é a concentração média em x no tempo t , $S(x',t')$ é o termo fonte e $P(x,t|x',t')$ é a função densidade de probabilidade (PDF) das partículas, que representa a probabilidade de uma partícula de fluido que estava em x' no tempo t' alcançar x no tempo t . A equação (3.13) representa uma descrição rigorosa dos processos de transporte e de difusão expressa em uma notação probabilística, onde o parâmetro chave é a PDF. Para determinar a PDF é necessário liberar um número de partículas suficientemente grandes, seguir suas trajetórias e calcular quantas delas alcançam a vizinhança de x no tempo t . Portanto, as trajetórias reais das parcelas de ar podem ser obtidas, o cálculo simples da densidade dos pontos de trajetórias fornece uma estimativa da concentração.

Segundo Zannetti, 1990, vários tipos de modelos podem ser classificados como lagrangeanos. Entre eles então os modelos a box lagrangeanos, de pluma gaussiana segmentada,

modelos a *puff* gaussianos e modelos de partículas lagrangeanos. Os modelos lagrangeanos de partículas se fundamentam na equação generalizada de Langevin. A posição de cada partícula, em cada passo de tempo é obtida pela integração numérica das seguintes equações:

$$du_i = a(x_i, u_i, t)dt + b(x_i, u_i, t)dn \quad (3.14)$$

$$\frac{dx_i}{dt} = u_i \quad (3.15)$$

onde u_i é a velocidade das partículas, x_i a variável espacial, t o tempo de dn uma variável randômica. O primeiro termo a do lado direito da equação (3.14) é um termo determinístico representando o arrasto viscoso do escoamento sobre as partículas e o segundo b um termo estocástico representando acelerações randômicas causadas por flutuações de pressão.

3.4.3 Modelos Gaussianos

Segundo Moraes, 2001, entre os modelos de dispersão de poluentes na atmosfera o mais conhecido e usado é o modelo pluma gaussiano. Este se baseia na fórmula que descreve o campo tridimensional da concentração de um poluente em condições meteorológicas de emissão estacionária.

O modelo gaussiano de uma pluma é representado na Figura 3.5, onde, por simplicidade, a velocidade de advecção está na direção positiva do eixo x . Representa a solução analítica, sob regime permanente e difusividades e campos do vento homogêneos e constantes da equação de advecção-difusão, para fonte pontual elevada. Num sistema de referência, a expressão que descreve a distribuição gaussiana da concentração é, segundo Tirabassi, 2005:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{z-H_s}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[\frac{1}{2}\left(\frac{z+H_s}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\} \quad (3.16)$$

onde, c é a concentração do poluente à sotavento da fonte no ponto (x, y, z) , x a distância horizontal da fonte, y a distância horizontal do eixo central da pluma, z altura, Q é a capacidade de emissão da fonte; u é a velocidade horizontal média do vento; H_s é a altura da fonte (considerando *plume rise*: $H_s = h_e + \Delta h$, com Δh um termo de correção, devido à ascensão da pluma e h_e é a altura física da fonte); σ_y e σ_z são funções da distância da fonte e da intensidade

da turbulência e são determinadas experimentalmente. Estes coeficientes são dependentes do tempo, e os responsáveis pelo crescimento de cada *puff*. A variável independente x não aparece explicitamente na definição de $c(x,y,z)$, por estar embutida nos parâmetros σ_y e σ_z .

Pode-se distinguir duas técnicas fundamentais para este propósito: a primeira faz uso de funções adimensionais construídas sobre a base das medidas disponíveis de intensidade da turbulência; a segunda utiliza funções semi-empíricas para os “sigmas” construídos para cada classe de estabilidade com a qual foram esquematizados o estado da atmosfera. Podem ser estacionários (independentes do tempo, e considerados “modelos pluma” expressos pela equação (3.16) ou depender do tempo (os modelos a *puff*). O nome de tais modelos deriva do fato que a distribuição dos poluentes, ambos vertical e transversal à direção do vento, é descrita da curva proposta pelo físico-matemático Gauss, [Tirabassi, 2005].

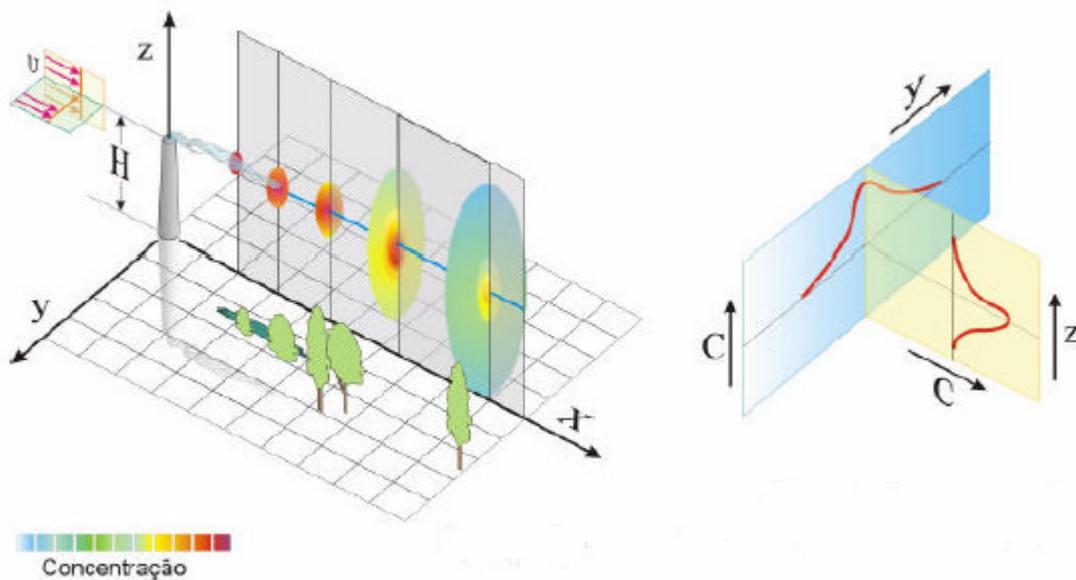


Figura 3.5: Dispersão de poluentes através de uma pluma gaussiana. Distribuição em um sistema coordenado. [Souza, 2004]

O modelo gaussiano pode ser modificado para permitir a simulação da dispersão em casos particulares: Fontes de emissão lineares, areal e volumétricas; Topografia complexa (vales, cidades, zona costeira); Condições meteorológicas particulares; Difusão de poluentes pesados ou reativos, [Tirabassi, 2005; Zanetti,1990].

Para estender a aplicação do método Gaussiano, também considera-se a condição não – homogênea e não – estacionária formuladas em modelos Gaussianos/Lagrangeanos a *puff*.

Desta forma, a pluma emitida é subdividida em uma série de elementos independentes, que envolvem em função da variação da condição meteorológica no espaço e no tempo, [Zannetti, 1990].

O modelo gaussiano/lagrangeano a *puff* foi introduzido para simular o comportamento do poluente em condições meteorológicas e de emissão não-homogênea e não-estacionária, [Zannetti, 1990]. A emissão é descrita em uma sucessão temporal de elementos (*puffs*) cada um dos quais se desloca no domínio de cálculo pelo efeito de um campo de vento tridimensional variável no tempo, como mostra a Figura 3.6.

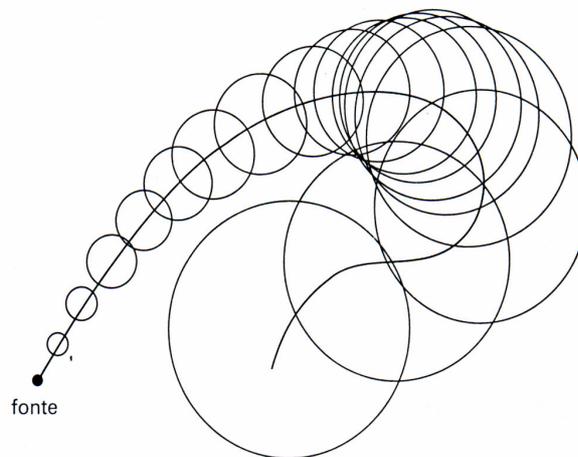


Figura 3.6: Simulação de uma pluma por meio de uma série de *puffs* emitidos com certo intervalo de tempo da fonte [Tirabassi, 2005].

O modelo gaussiano/lagrangeano a *puff* assume que cada emissão de poluente em um intervalo de tempo Δt , emite na atmosfera uma massa $\Delta M = Q\Delta t$, onde Q é a taxa de emissão de poluente variável no tempo. Cada *puff* contém a massa ΔM e o seu baricentro é transportado pelo vento, podendo variar no espaço e no tempo.

Se, no instante t o centro de um *puff* está localizado em $\mathbf{p}(t)=(x_p, y_p, z_p)$, então a contribuição deste *puff* à concentração calculada na posição $\mathbf{r} = (x_r, y_r, z_r)$, com $r = u\Delta t$, é dada pela seguinte relação, [Tirabassi, 2005]:

$$\Delta c = \frac{\Delta M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_h^2 \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_p - x_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_p - y_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_p - z_r}{\sigma_z}\right)^2\right] \quad (3.17)$$

que é a distribuição de Gauss para o campo de concentração de um *puff*. A equação (2.8) requer a avaliação de σ_z e σ_h (com $\sigma_h = \sigma_y = \sigma_x$ são funções da distância da fonte e da intensidade da

turbulência) para cada *puff*. A concentração total de um poluente em um setor é calculada somando-se as contribuições Δc de todos os *puffs* emitidos por todas as fontes presentes.

Convém salientar a diferença fundamental entre as expressões (3.16) e (3.17): nesta última aparece um outro termo de difusão no lugar do termo de advecção, com o conseqüente desaparecimento da velocidade média do vento u da expressão. Em outras palavras, isto significa que em um modelo a *puff* a velocidade do vento influencia no cálculo da concentração somente na densidade do *puff* na região de difusão (tanto mais baixa é a velocidade do vento, tanto mais os *puffs* emitidos por uma fonte resultarão próximos uns dos outros). Por este motivo o modelo a *puff*, se diferencia dos modelos gaussianos descritos pela (3.16) (a concentração tende ao infinito para u que tende a zero), podem ser utilizados para simular a difusão em condições de vento fraco.

O modelo a *puff* presta-se também às simulações de difusão sobre topografia complexa: neste caso, é necessário reconstruir um campo de vento tridimensionalmente a partir das características topográficas e da medida anemométrica disponível.

4 – SOLUÇÕES ANALÍTICAS DO PROBLEMA ADVECTIVO-DIFUSIVO BIDIMENSIONAL, DEPENDENTE DO TEMPO COM FONTE ARBITRÁRIA

Uma substância emitida na atmosfera se dispersa por meio da difusão turbulenta causada pelo cisalhamento do vento e pela variação da temperatura na CLP. Esta variação provoca o aquecimento e resfriamento da superfície da terra, fazendo com que o transporte das partículas seja dominado na horizontal pelo vento médio (advecção) e na vertical pela turbulência. Conseqüentemente, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera são, geralmente, descritos pela equação de advecção-difusão.

No contexto descrito no parágrafo anterior, as interações entre o cisalhamento do vento e a difusão vertical podem ser analisadas através de um *puff* (emissão instantânea) de uma substância poluente emitida por uma fonte (instantânea) e é o que se considera neste trabalho.

Neste capítulo, apresenta-se duas metodologias diferentes de solução para um mesmo problema bidimensional transiente não-homogêneo com termo fonte, consideradas nesta pesquisa. O que difere uma metodologia da outra é a técnica utilizada para solucionar a equação de advecção-difusão unidimensional transiente com termo fonte, que resolve parte do problema proposto.

Na solução do problema unidimensional transiente, as duas metodologias usadas foram sugeridas por Wortmann, et al., 2005, e Vilhena et al., 1998, que são respectivamente GILTT e ADMM. Tais metodologias são utilizadas para encontrar a função de Green $G(z, t; z', t')$ ⁸, ANEXO I, que possibilita uma emissão arbitrária. A solução final do problema bidimensional transiente é determinada multiplicando-se esta função por uma gaussiana em x , que representa a difusão nessa direção.

A primeira metodologia, GILTT, na construção da solução do problema unidimensional transiente o potencial original é expandido em uma base determinada a partir da solução de um problema de Sturm-Liouville, escolhido por associação com o problema original. A ortogonalidade da base é então usada para transformar a equação expandida em um sistema de equações, chamado de problema transformado, que é um sistema de equações diferenciais ordinárias. Encontrada a solução deste problema, a fórmula da inversa é utilizada para obter a solução do problema original. A solução do problema transformado pode ser obtida de forma numérica [Cotta, 1993] ou analítica [Wortmann et al., 2005], que usa a transformada de Laplace e diagonalização de matrizes, considerada neste trabalho.

⁸ O significado da notação $G(z, t; z', t_0)$ é como segue: a primeira parte do argumento “ z, t ” refere-se ao efeito, isto é, a concentração no local z no tempo t ; a segunda parte “ z', t_0 ” refere-se ao impulso, isto é, ao posicionamento da fonte de ponto impulsivo.

O segundo, ADMM, obtém a solução discretizando o domínio em vários subdomínios e em cada um deles considera valores médios do coeficiente difusivo K_z . Assim, o problema com coeficiente variável é substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes (coeficientes médios), acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminantes nas interfaces. A solução de cada um deles é obtida pelo uso da transformada de Laplace, cuja inversão é calculada por quadratura de Gauss. A concentração é determinada pela solução do sistema de equações lineares resultante da aplicação dessa transformada e a sua inversão.

4.1 – O Problema bidimensional Transiente com Termo Fonte

No presente trabalho, considera-se um experimento de dispersão de poluentes bidimensional transiente, no qual uma fonte aérea libera um traçador químico. Este é abandonado sem empuxo, a partir de uma fonte pontual com altura H_S , que emite poluentes instantaneamente a uma taxa constante Q . No nível do solo e na altura da CLP (z_i), considera-se que não há fluxo de poluente.

Assume-se, nesta pesquisa, que a cada emissão de poluentes é injetada na atmosfera uma quantidade de massa $\Delta M = Q\Delta t$, onde Q é a taxa de emissão de poluentes liberada a cada intervalo de tempo Δt .

Os modelos Lagrangeanos a *puff* Gaussianos aqui apresentados, representam a pluma através de um número de *puffs* discretos de material poluente. Os *puffs* são emitidos em intervalos de tempo Δt_1 e o cálculo da concentração de poluentes em cada um é feito num intervalo de tempo Δt_2 . Cada *puff* é transportado de acordo com a trajetória de seu centro de massa (baricentro), que é determinado pelo vetor velocidade do vento local, considerado constante com a altura, enquanto se expande no tempo por meio dos coeficientes de dispersão.

Adaptando o que foi visto na fundamentação teórica ao problema proposto neste trabalho, tem-se que, se, em um tempo t , o centro de um *puff* está localizado em $p(t) = (x_p, z_p)$, então a concentração devido aquele *puff* no receptor $r = (x_r, z_r)$, pode ser calculado utilizando a fórmula de *puff* gaussiana básica, descrita na equação (3.16), aqui adaptada para o caso bidimensional:

$$\Delta c = \frac{\Delta M}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x^2 \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_p - x_r}{\sigma_x}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_p - z_r}{\sigma_z}\right)^2\right] \quad (4.1)$$

Neste trabalho a solução na vertical $c(z,t)$ é determinada segundo duas metodologias diferentes: GILTT e ADMM. Já a dispersão em x é modelada por uma Gaussiana (Ψ_{puff}) caracterizando a difusão nesta direção. Desta forma, a concentração total de um poluente em um setor é calculada somando-se todos os *puffs* emitidos pela fonte e que contribuiriam para a concentração do poluente no ponto que está sendo avaliado, como determina a equação (4.2):

$$\Delta c = C(x, z, t) = \sum_{puff=1}^{total\ de\ puffs} \int_0^{\infty} c_{puff}(x, z, t) H(t - t_0) dt \quad (4.2)$$

onde,

$$c_{puff}(x, z, t) = c_{puff}(z, t) \Psi_{puff}(x, t) \quad (4.2a)$$

e a gaussiana $\Psi_{puff}(x, t)$ definida por:

$$\Psi_{puff}(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x^2} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x - x_0}{\sigma_x}\right)^2\right] \quad (4.2b)$$

sendo $x_0 = u\Delta t$ o baricentro e σ_x o parâmetro de dispersão longitudinal expresso segundo Grynyng, 1987, por:

$$\sigma_x = \sigma_u t f_x(t/T_x) \quad (4.3)$$

onde, f_x é a função adimensional do tempo de viagem t/T_x :

$$f_x = \frac{1}{1 + \sqrt{t/2T_x}} \quad (4.4)$$

e T_x é a escala de tempo Lagrangeana para a dispersão longitudinal sendo:

$$T_x = 600s \quad \text{para fontes elevadas } \left(\frac{H_s}{z_i} > 0,1\right)$$

$$T_x = 200s \quad \text{para fontes ao nível do solo } \left(\frac{H_s}{z_i} \leq 0,1\right).$$

σ_u é o desvio padrão da componente longitudinal da velocidade do vento definido por:

$$(\sigma_u / u_*)^2 = 0.35 \left(-\frac{H_s}{kL} \right)^{2/3} + (2 - z_i / H_s) \quad (4.5)$$

u_* a velocidade de fricção, k é a constante de Von Karman e seu valor é 0.4, z_i é a altura da CLP e L o comprimento de Monin-Obukhov.

A equação de advecção-difusão, que representa o problema unidimensional transiente, que descreve a evolução da concentração $c(z,t)$ produzida por uma fonte elevada H_s com a liberação instantânea no tempo t_0 de uma quantidade Q de material passivo, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial c(z,t)}{\partial t} + w \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(z) \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \right) + S \quad (4.6)$$

onde, $c(z,t)$ representa a concentração média; w é a componente cartesiana do vento médio na direção z ; $K(z)$ é a componente cartesiana do coeficiente de difusão e S é o termo fonte dado por $S = Q \delta(t-t_0) \delta(z-H_s)$; δ é a função Delta Dirac.

Desprezando o segundo termo do lado esquerdo (termo difusivo em z é muito maior que o de transporte⁹), reescreve-se a equação (4.6), na seguinte forma:

$$\frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(z) \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \right) + S \quad (4.7)$$

A descrição matemática do problema de dispersão representada pela equação (4.7) é bem apresentada, quando é provida de condições iniciais e de contorno. Realmente, é assumido que no começo da liberação de poluentes a região de dispersão não está poluída, isto significa:

$$c(z,t) = 0 \quad \text{em } t = 0 \quad (4.8)$$

e as condições de contorno com fluxo nulo no solo e na altura da camada limite (z_i) são:

⁹ $\frac{\partial}{\partial z} \left(K(z) \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \right) \gg w \frac{\partial c(z,t)}{\partial z}$

$$K(z) \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } z = z_i \quad (4.9)$$

Sendo a região considerada em $0 < z < z_i$, com z_i sendo a altura da CLP e $t > 0$.

Na modelagem do transporte de poluentes, a escolha de uma parametrização para turbulência representa uma decisão fundamental. Pode ser considerada como um complemento da modelagem do transporte e difusão de poluentes na atmosfera e, para isto, apresenta-se na próxima seção a parametrização considerada neste trabalho.

4.1.1.- Parametrização da Turbulência

Do ponto de vista físico, a parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no sentido em que se está colocando em modelos matemáticos uma relação aproximada, que em princípio pode ser usada como uma substituição para o verdadeiro termo desconhecido. A validade de cada modelo depende do modo como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados ao atual conhecimento da CLP.

4.1.1.1 – O Coeficiente de Difusão

Neste trabalho foram estudadas, nas simulações, duas propostas de coeficientes de difusão vertical. A primeira, de Pleim e Chang, 1992, o coeficiente de difusão é formulado a partir da teoria de difusão estatística de Taylor e o espectro de energia cinética turbulenta, a fim de descrever a estrutura turbulenta da CLC. Este coeficiente é válido para grandes tempos de difusão e é definido por:

$$K_z = k w_* z \left(1 - \frac{z}{z_i} \right) \quad (4.10)$$

Na segunda proposta, o coeficiente de difusão é sugerido por Degrazia et al., 2001:

$$K_z = \frac{0.55}{4} \frac{\sigma_w z}{(f_m^*)_w} \quad (4.11)$$

onde a variância da velocidade vertical σ_w é dada por:

$$\sigma_w^2 = 1.06c_w \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_w^{2/3}} \left(\frac{z}{z_i} \right)^{2/3} w_*^2 \quad (4.12)$$

onde $c_w = 0.36$, w_* é a escala de velocidade convectiva, ψ é a taxa de dissipação e $(f_m^*)_w$ é a frequência adimensional do pico espectral vertical expresso da seguinte forma:

$$(f_m^*)_w = \frac{z}{(\lambda_m)_w} \quad (4.13)$$

$$\psi = 1.5 - 1.2 \left[\left(\frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \right] \quad (4.14)$$

onde $(\lambda_m)_w$ é o comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical dado por:

$$(\lambda_m)_w = \begin{cases} \frac{z}{0.55 - 0.38 \left| \frac{z}{L} \right|} & 0 \leq z \leq |L| \\ 5.9z & |L| \leq z \leq 0.1z_i \\ 1.8z_i \left[1 - \exp\left(\frac{-4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right] & 0.1z_i < z \end{cases} \quad (4.15)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukov.

A Figura 4.1 apresenta o gráfico do comportamento da equação (4.11), válida para grandes tempos de difusão.

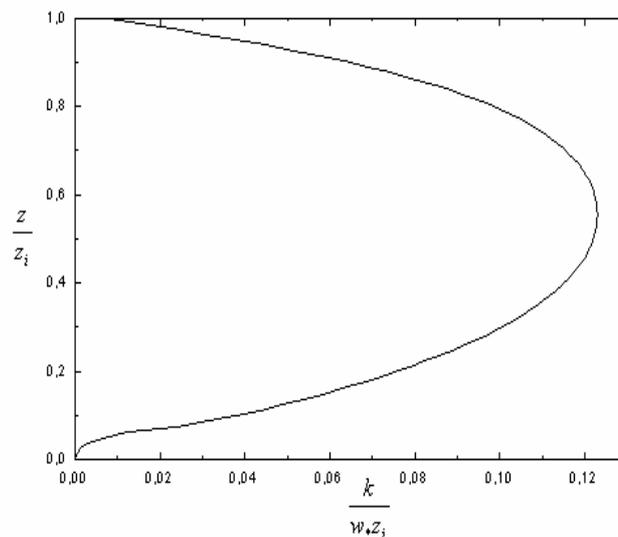


Figura 4.1 - Comportamento do coeficiente de difusão adimensional para grandes tempos dependente das propriedades da turbulência em função da altura adimensional.[Costa, 2004]

4.1.1.2 – Perfil do vento

A direção inicial do transporte dos poluentes originados de uma fonte é determinada pela direção do vento medido no local da fonte. Pequenos erros na estimativa da direção do vento podem ocasionar grandes erros nas estimativas das concentrações. A intensidade do vento também, logicamente, influencia significativamente a dispersão dos poluentes. A Figura 4.2 mostra claramente o efeito do módulo da velocidade do vento na dispersão dos poluentes.

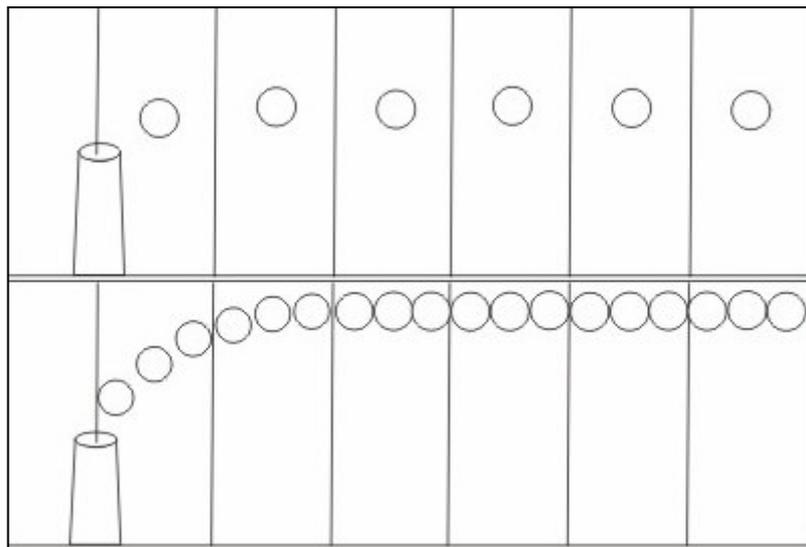


Figura 4.2 - Influência do vento horizontal na dispersão dos poluentes. Adaptado de Boubel et al., 1994

Neste estudo, na modelagem dos *puffs*, o vento é considerado constante com a altura, ou seja, z assume um valor fixo ($z = H_s$).

Definidos o problema proposto e os parâmetros considerados para obtenção de sua solução, apresentam-se nas próximas seções as estratégias de resolução da equação (4.7). Tais resoluções representam a etapa final para obtenção da solução do problema aqui proposto.

4.1.2 – A Solução do Problema Unidimensional Transiente - via GILTT

Primeiramente o termo do segundo membro da equação (4.7) é reescrito aplicando-se a derivada do produto no termo que tem o coeficiente $K(z)$. Este procedimento permite a simplificação do chamado problema auxiliar, cuja escolha é feita por associação com o problema original. Assim, tem-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = K'(z) \frac{\partial c}{\partial z} + K(z) \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + Q \delta(t - t_0) \delta(z - H_s) \quad (4.16)$$

Como as condições de contorno (4.9) são homogêneas e a equação (4.16) apresenta um termo laplaciano em z , aplica-se GILTT nessa variável. Tais condições de contorno geram um problema de Sturm-Liouville:

$$\frac{d^2}{dz^2} Z_i(z) + \lambda_i^2 Z_i(z) = 0 \quad \text{em } 0 < z < z_i \quad (4.17)$$

E suas respectivas condições de contorno são

$$\frac{d}{dz} Z_i(z) = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } z = z_i \quad (4.21a)$$

A solução do problema (4.17) pode ser escrita [Özisik, 1980] como:

$$Z_i(z) = \cos(\lambda_i z) \quad (4.18)$$

onde, λ_i são as raízes positivas da expressão $\sin(\lambda_i a) = 0$, para $z_i = a$. Assim,

$$\lambda_i = \frac{i\pi}{a}, \quad \text{para } i = 0, 1, 2, \dots \quad (4.19)$$

Os valores de λ_i para os quais o sistema de Sturm - Liouville tem uma solução não trivial são chamados de autovalores e as soluções correspondentes $Z_i(z)$ são as suas autofunções. O conjunto de todos os autovalores de um sistema de Sturm - Liouville é chamado espectro do sistema. As autofunções possuem a propriedade de ortogonalidade, que é definida pela forma [Özisik, 1980]:

$$\frac{1}{N_m^{1/2} N_n^{1/2}} \int_v Z_i(z) Z_j(z) dv = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \quad (4.20)$$

Onde N_m é definido como:

$$N_m = \int_v Z_i^2(z) dv \quad (4.21)$$

A base de autofunções é usada na expansão da variável $c(z,t)$, na seguinte forma :

$$c(z,t) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{A_i(t)} Z_i(z)}{N_i^{1/2}} \quad (4.22)$$

onde $\overline{A_i(t)}$ é a solução do problema transformado. Substituindo-se a definição (4.26) na equação (4.16), tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{A_i(t)Z_i(z)}}{N_i^{1/2}} \right] = k'(z) \frac{\partial}{\partial z} \left[\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{A_i(t)Z_i(z)}}{N_i^{1/2}} \right] + k(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left[\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{A_i(t)Z_i(z)}}{N_i^{1/2}} \right] + Q\delta(t-t_0)\delta(z-H_s) \quad (4.23)$$

A próxima etapa é aplicar na equação (4.23) o operador integral $\int_0^a \frac{Z_j(z)}{N_j^{1/2}} dz$ e substituir, nesta mesma equação, $\frac{\partial^2 Z_i(z)}{\partial z^2} = -\lambda_i^2 Z_i(z)$, da equação (4.17). Assim, após algumas manipulações algébricas, obtém-se o seguinte resultado:

$$\left[\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{A_j(t) \int_0^a \frac{Z_i(z)Z_j(z)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz}_{E_{ij}} \right] = \left[\sum_{j=0}^{\infty} \underbrace{A_j(t) \left(\int_0^a \frac{k'(z)Z_i(z)Z_j'(z)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz - \lambda_j^2 \int_0^a \frac{k(z)Z_i(z)Z_j(z)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz \right)}_{B_{ij}} \right] + Q\delta(t-t_0) \int_0^a \delta(z-H_s)Z_j(z)dz \quad (4.24)$$

Reescrevendo-se a equação (4.28) tem-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \left[E_{ij} \frac{\partial}{\partial t} \overline{A_j(t)} - B_{ij} \overline{A_j(t)} \right] = Q\delta(t-t_0) \frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}} \quad (4.25)$$

Para $t > 0$, E_{ij} é definida como:

$$E_{ij} = [e_{ij}] \quad \text{com} \quad e_{ij} = \int_0^a \frac{Z_i(z)Z_j(z)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz \quad (4.26)$$

e a matriz B_{ij} , também definida por:

$$B_{ij} = [b_{ij}] \quad \text{com} \quad b_{ij} = \frac{1}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} \left[\int_0^a k'(z)Z_i(z)Z_j'(z)dz - \lambda_j^2 \int_0^a k(z)Z_i(z)Z_j(z)dz \right] \quad (4.27)$$

Devido à complexidade das integrais de linha que aparecem na equação (4.27), optou-se resolvê-las numericamente pelo método da quadratura gaussiana [Stroud and Secrest, 1966].

Para a condição inicial o procedimento é análogo. Primeiro a variável $c(z,0)$ é expandida, usando-se a equação (4.22) na equação (4.8):

$$c(z,0) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{A_i(0)Z_i(z)}}{N_i^{1/2}} = 0 \quad (4.28)$$

Em seguida é usado o operador $\int_0^a \frac{Z_j(z)}{N_j^{1/2}} dz$ na equação (4.28), obtendo-se o resultado:

$$\sum_{i=0}^{\infty} \overline{A_i(0)} \underbrace{\int_0^a \frac{Z_i(z)Z_j(z)}{N_i^{1/2}N_j^{1/2}} dz}_{E_{ij}} = 0 \quad (4.29)$$

Executadas as devidas substituições e integrações obtém-se:

$$\overline{A_j(x,0)} = 0 \quad (4.30)$$

Aplicando-se na equação (4.29)

$$Y(t) = \overline{A_j(t)} , \quad (4.31)$$

a equação, (4.25) é reescrita como segue:

$$E_{ij}Y'(t) + B_{ij}Y(t) = Q\delta(t-t_0) \frac{Z_i(H_S)}{N_i^{1/2}} \quad (4.32)$$

Sendo E e B matrizes e $Y(t)$ é o vetor incógnita. Para condição inicial o procedimento é análogo.

Desta forma, tem-se:

$$Y(t) = 0 \quad \text{em} \quad t = 0 \quad (4.33)$$

O que foi resolvido até aqui segue a metodologia da GITT de Cotta, 1993, e Cotta e Mikhaylov, 1997, cujos problemas transformados são resolvidos numericamente. Neste trabalho, a equação matricial transformada (4.32) será resolvida analiticamente, por transformada de Laplace e diagonalização, seguindo a metodologia, GILTT, adotada em Wortmann et al., 2005.

A primeira etapa para a solução da equação transformada (4.32) é reescrevê-la na seguinte forma:

$$Y'(t) + RY(t) = E^{-1}Q\delta(t-t_0)\frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}} \quad (4.34)$$

com $R = E^{-1}B$ (neste trabalho, a matriz $R = B$, pois a matriz E é uma matriz identidade).

Aplicando-se a Transformada de Laplace em t ($L\{Y(t)\} = \bar{Y}(s)$) na equação (4.34), obtém-se:

$$s\bar{Y}(s) - Y(0) + BY(s) = E^{-1}Q\frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}}e^{-t_0s} \quad (4.35)$$

Substituindo-se a condição inicial (4.33) na equação (4.35), tem-se:

$$s\bar{Y}(s) + BY(s) = E^{-1}Q\frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}}e^{-t_0s} \quad (4.36)$$

A seguir decompõem-se a matriz B em seus respectivos autovalores e autovetores, como segue:

$$B = T_a D_a T_a^{-1} \quad (4.37)$$

onde, D_a é a matriz diagonal dos autovalores e T_a é a matriz dos autovetores de B . Esta fatoração pode ser feita toda vez que os autovalores da matriz B forem distintos.

Aplicando-se a equação (4.37) na equação (4.36), obtém-se a seguinte equação:

$$s\bar{Y}(s) + T_a D_a T_a^{-1}Y(s) = E^{-1}Q\frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}}e^{-t_0s} \quad (4.38)$$

Ou ainda,

$$(sI + T_a D_a T_a^{-1})\bar{Y}(s) = E^{-1}Q\frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}}e^{-t_0s} \quad (4.39)$$

Onde I é a matriz identidade. Como $T_a T_a^{-1} = I$, a equação (4.39) pode ser reescrita como:

$$T_a (s e^{t_0 s} I + e^{t_0 s} D_a) T_a^{-1} \overline{Y}(s) = E^{-1} Q \frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}} \quad (4.40)$$

Multiplicando-se, à esquerda, ambos os lados da equação (4.40) por T_a^{-1} , $(s e^{t_0 s} I + e^{t_0 s} D_a)^{-1}$ e T_a consecutivamente, obtém-se:

$$\overline{Y}(s) = T_a (s e^{t_0 s} I + e^{t_0 s} D_a)^{-1} T_a^{-1} E^{-1} Q \frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}} \quad (4.41)$$

Os elementos não-nulos da matriz $(s e^{t_0 s} I + e^{t_0 s} D_a)^{-1}$ são da forma $\{e^{t_0 s} (s + d_i)\}^{-1}$, onde d_i são os autovalores da matriz B da equação (4.37).

Da álgebra matricial, a inversa de uma matriz diagonal é a inversa de seus elementos, ou seja, os elementos não-nulos da matriz $(s e^{t_0 s} I + e^{t_0 s} D)^{-1}$ são $\frac{1}{e^{t_0 s} (s + d_i)}$, cuja inversa de Laplace é $e^{-d_i(t-t_0)}$. Sendo $G_D(t)$ a matriz diagonal, cujos elementos não-nulos são $e^{-d_i(t-t_0)}$. Desta forma, a solução final da equação considerada é:

$$Y(t) = T_a G_D(t) T_a^{-1} E^{-1} Q \frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}} \quad (4.42)$$

Para diminuir o custo computacional da solução (4.42), utiliza-se um procedimento alternativo para inversão da matriz T_a , sugerido por Segato e Vilhena, 1999. Inicialmente, é determinado o vetor ξ da seguinte forma:

$$\xi = T_a^{-1} E^{-1} Q \frac{Z_i(H_s)}{N_i^{1/2}} \quad (4.43)$$

Substituindo-se a equação (4.43) na equação (4.41) tem-se o seguinte resultado:

$$\overline{Y}(s) = T_a (s e^{t_0 s} I + e^{t_0 s} D)^{-1} \xi \quad (4.44)$$

Para determinar ξ , reescreve-se a equação (4.43) na forma:

$$T_a \xi = E^{-1} Q \frac{Z_i(H_S)}{N_i^{1/2}} \quad (4.45)$$

Onde os valores de ξ são calculados por decomposição LU, cujo custo computacional é menor que o de inversão de matrizes. Assim, a solução final será:

$$Y(t) = T_a G_D(t) \xi \quad (4.46)$$

Utilizando-se a fórmula da inversa, dada pela equação (4.26), chega-se a solução final do problema proposto. $Z_i(z)$ é encontrada do problema de Sturm - Liouville fornecido pela equação (4.17) e $\overline{A_j(t)} = Y(t)$ resulta da solução do problema transformado dado pela equação (4.46). Deste modo, tem-se a seguinte solução final do problema unidimensional transiente, com termo fonte:

$$c(z, t) = \sum_{j=0}^N \frac{\overline{A_j(t)} Z_j(z)}{N_j^{1/2}} \quad (4.47)$$

com

$$Z_i(z) = \cos(\lambda_i z) \quad (4.48)$$

$$\lambda_i = \frac{i\pi}{a}, \quad \text{para } i = 0, 1, 2, \dots \quad (4.49)$$

$$A_j(t) = Y(t) = T_a G_D(t) \xi \quad (4.50)$$

Na próxima seção é apresentada a abordagem do uso da função de Green na solução de parte do problema proposto neste trabalho. Após esta apresentação, com uso da metodologia GILTT, a solução final do problema bidimensional transiente proposto é determinada.

4.1.2.1 – A construção da função de Green e a solução do problema bidimensional transiente, com termo fonte – via GILTT

A função de Green unidimensional $G(z, t; z', t_0)$, aqui apresentada, que satisfaz parte do problema proposto neste trabalho, representa a concentração de poluentes num determinado

ponto da região em estudo. Inicialmente com uma concentração nula e sujeita às condições de contorno homogêneas, devido a uma fonte de emissão de poluentes de ponto impulsivo, localizada em z' , que libera seu poluente instantaneamente no tempo t_0 .

Na seção anterior, foi apresentada a solução da equação unidimensional transiente, com fonte instantânea pela metodologia da GILTT. Como as condições de contorno propostas são homogêneas e também existe um termo fonte impulsivo e condição inicial zero, pode-se afirmar que a $c(z,t)$ determinada é a versão homogênea do problema unidimensional proposto. Então, tem-se que a $c(z,t) = G(z,t; z',t_0)$, isto é:

$$c(z,t) = G(z,t; z',t_0) = \sum_{j=0}^N \frac{\overline{A_j(t)} Z_j(z)}{N_j^{1/2}} \quad (4.51)$$

com $A_j(t)$, $Z_j(z)$ e $N_j^{1/2}$ definidas pelas equações (4.50), (4.48) e (4.21), respectivamente. Como a fonte é instantânea, a concentração de poluente em cada *puff* é determinada por:

$$c_{puff}(x, z, t) = c_{puff}(z, t) \Psi_{puff}(x) = G_{puff}(z, t; z', t_{0,puff}) \Psi_{puff}(x) \quad (4.52)$$

Como a concentração de poluentes em cada ponto da grade é determinada pela soma dos *puffs* que se localizam na área do ponto analisado, a solução analítica do problema bidimensional transiente é então definida por:

$$C(x, z, t) = \sum_{puff=1}^{total\ de\ puffs} \int_{t=0}^{\infty} c_{puff}(x, z, t) H(t - t_{0,puff}) dt \quad (4.53)$$

Ou seja:

$$C(x, z, t) = \sum_{puff=1}^{total\ de\ puffs} \left\{ \int_{t=0}^{\infty} G_{puff}(z, t; z', t_{0,puff}) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_o}{\sigma_x}\right)^2\right] H(t - t_{0,puff}) dt \right\} \quad (4.54)$$

onde H sendo a função de Heaviside.

É importante salientar que os trabalhos existentes na literatura, que utilizaram o método GILTT para obter a solução do problema advectivo-difusivo, consideram o fato de a emissão ser contínua e não se apresentam como modelo a *puff*. Também, não utilizam a metodologia de Green, que possibilita a emissão de posição arbitrária. Isto demonstra que o trabalho aqui proposto pode ser considerado uma expansão do modelo GILTT.

Na próxima seção é apresentada a segunda metodologia, ADMM, adotada na resolução do mesmo problema bidimensional transiente não-homogêneo com termo fonte.

4.1.3 – A Solução do Problema Unidimensional Transiente - via ADMM

Para se resolver a equação de advecção-difusão (4.7), considerando-se turbulência não-homogênea, o modelo ADMM discretiza a CLP em um sistema multicamadas, como mostra a Figura 4.3.

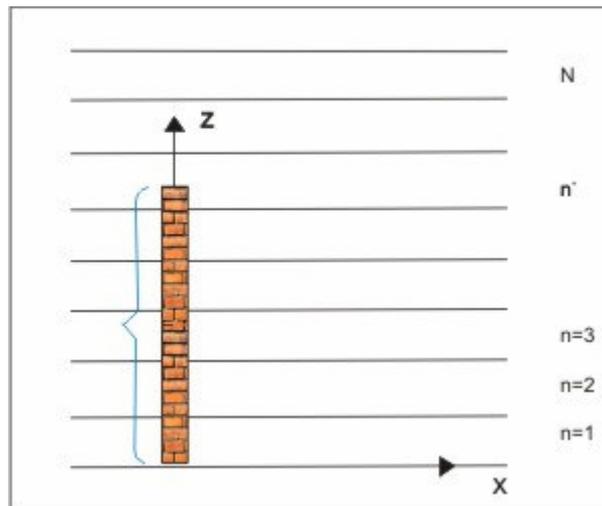


Figura 4.3 - O esquema da CLP dividida em um sistema multicamadas [Moreira e Vilhena, 2005].

Como pode ser observado, este procedimento transforma o domínio em uma barra de multicamadas na direção z . Na Figura 4.4, a aproximação *stepwise* é ilustrada para o coeficiente de difusão vertical K_z .

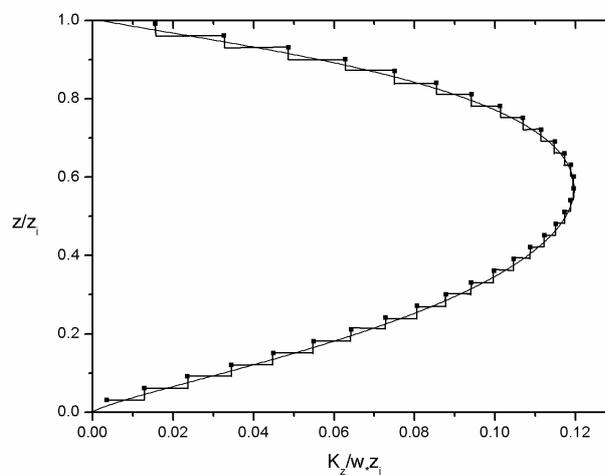


Figura 4.4 - Aproximação *stepwise* para o coeficiente de difusão vertical adimensional K_z [Moreira e Vilhena, 2005].

Considerando-se a dependência do coeficiente K_z da variável z , $K_z(z)$, assume um valor médio constante:

$$K_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(z) dz \quad (4.55)$$

Com essa discretização do domínio, a solução da equação (4.7) é reduzida à solução de N problemas do tipo:

$$\frac{\partial c_n}{\partial t} = K_n \frac{\partial^2 c_n}{\partial z^2} + S \quad (4.56)$$

para $n = 1, \dots, N-1$, onde, $S = Q\delta(z-H_S)\delta(t-t_0)$. Com as condições de contorno e inicial dadas por:

$$K_n \frac{\partial c_n}{\partial z} = 0 \quad \text{para } z = 0, z_i \quad (4.57)$$

$$c_n(z, t) = 0 \quad \text{para } t = 0 \quad (4.58)$$

As condições de continuidade para concentração e fluxo na interface são consideradas:

$$c_n = c_{n+1} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (4.59)$$

$$K_n \frac{\partial c_n}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial c_{n+1}}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (4.60)$$

Aplicando-se a transformada de Laplace na equação (4.56) na variável t obtém-se:

$$\frac{d^2}{dz^2} \hat{c}_n(z, s) - \frac{s}{K_n} \hat{c}_n(z, s) = -\frac{1}{K_n} Q\delta(z - H_S)e^{-t_0 s} \quad (4.61)$$

onde $\hat{c}_n(z, s) = L_p\{c_n(z, t); t \rightarrow s\}$. A equação (4.61) é uma equação linear, de 2ª. ordem não-homogênea (solução do tipo $\hat{c}_n(z, s) = \hat{c}_{nh} + \hat{c}_{np}$, onde \hat{c}_{nh} é a solução da parte homogênea e \hat{c}_{np} da particular). A solução homogênea da equação (4.61) é:

$$\hat{c}_{nh}(z, s) = A_n e^{-R_n z} + B_n e^{R_n z} \quad (4.62)$$

com
$$R_n = \sqrt{\frac{s}{K_n}} \quad (4.63)$$

E a solução \hat{c}_{np} da particular, determinada nesta metodologia pela variação de parâmetros, pode ser escrita como:

$$\hat{c}_{np}(z, s) = \frac{Q}{2R_n K_n} \left(e^{-(R_n(z-H_s)+t_0s)} - e^{R_n(z+H_s)-t_0s} \right) \quad (4.64)$$

Finalmente aplicando-se as condições de contorno e interface, obtém-se um sistema linear para determinar as constantes de integração. A concentração de poluentes nas subcamadas que não contém a fonte é dada por:

$$c_n(z, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} [A_n e^{-R_n z} + B_n e^{R_n z}] e^{st} ds \quad (4.65)$$

e:

$$c_n(z, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \left[A_n e^{-R_n z} + B_n e^{R_n z} + \frac{Q}{2R_n K_n} \left(e^{-(R_n(z-H_s)+t_0s)} - e^{R_n(z+H_s)-t_0s} \right) H(z-H_s) \right] e^{st} ds \quad (4.66)$$

na subcamada que contém a fonte, com H sendo a função de Heaviside.

Devido à complexidade da integral de linha descrita da equação (4.66), optou-se resolvê-la numericamente pelo método da quadratura gaussiana [Stroud and Secrest, 1966]. Desta forma, a solução de (4.66) pode ser escrita na forma:

$$c_n(z, t) = \sum_{i=1}^{k_p} a_i \frac{P_i}{t} \hat{c}_n \left(z, \frac{P_i}{t} \right) \quad (4.67)$$

Portanto, a concentração de poluentes na subcamada é dada por:

$$c_n(z, t) = \sum_{i=1}^{k_p} a_i \frac{P_i}{t} \left[A_n e^{-\left(\sqrt{\frac{P_i}{tK_n}}\right)z} + B_n e^{\left(\sqrt{\frac{P_i}{tK_n}}\right)z} + \frac{1}{2} \frac{Q}{\sqrt{tK_n}} \left(e^{-\left[(z-H)\left(\sqrt{\frac{P_i}{tK_n}}\right) + \frac{t_0 P_i}{t}\right]} - e^{\left[(z+H)\left(\sqrt{\frac{P_i}{tK_n}}\right) - \frac{t_0 P_i}{t}\right]} \right) H(z-H_s) \right] \quad (4.68)$$

válido para camada que contém a fonte

onde k_p é o número de pontos da quadratura Gaussiana e a_i e p_i são os pesos e as raízes, respectivamente, tabulados no livro de Stroud e Secrest, 1966.

Na próxima seção é apresentada a abordagem do uso da função de Green na solução de parte do problema proposto neste trabalho. Após esta apresentação, com uso do método ADMM, a solução final do problema bidimensional transiente proposto é determinada.

4.1.3.1 – A construção da função de Green e a solução do problema bidimensional transiente, com termo fonte – via ADMM

A função de Green unidimensional $G(z, t; z', t_0)$, aqui apresentada, que satisfaz parte do problema proposto neste trabalho, como já foi dito, representa a concentração de poluentes num determinado ponto da região considerada. Inicialmente com uma concentração nula e sujeito às condições de contorno homogêneas, devido a uma fonte de emissão de poluentes de ponto impulsivo, localizada em z' , que libera seu poluente instantaneamente no tempo t_0 .

Na seção anterior, foi apresentada a solução da equação unidimensional transiente, com fonte instantânea pelo método ADMM. Pelo fato das condições de contorno propostas serem homogêneas e também existir um termo fonte impulsivo de condição inicial zero, pode-se afirmar que a $c_n(z, t)$ determinada, equações (4.67) e (4.69), é a versão homogênea do problema unidimensional proposto. Então, tem-se que a $c_n(z, t) = G_n(z, t; z', t_0)$ e como a fonte é instantânea, a concentração de poluente em cada *puff* é determinada por:

$$c_{n \text{ puff}}(x, z, t) = c_n(z, t)\Psi_{\text{puff}}(x) = G_{n \text{ puff}}(z, t; z', t_{0 \text{ puff}})\Psi_{\text{puff}}(x) \quad (4.69)$$

Como a concentração de poluentes em cada ponto da grade é determinada pela soma dos *puffs* que se localizam na área do ponto analisado, a solução analítica do problema bidimensional transiente é definida como:

$$C_n(x, z, t) = \sum_{\text{puff}=1}^{\text{total de puffs}} \int_{t=0}^{\infty} c_{n \text{ puff}}(x, z, t)H(t - t_{0 \text{ puff}})dt \quad (4.70)$$

Ou,

$$C_n(x, z, t) = \sum_{\text{puff}=1}^{\text{total de puffs}} \left\{ \int_{t=0}^{\infty} G_{n \text{ puff}}(z, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_o}{\sigma_x}\right)^2\right] H(t - t_{0 \text{ puff}})dt \right\} \quad (4.71)$$

Aqui, também, é importante salientar que os trabalhos existentes na literatura que utilizaram o método ADMM para obter a solução do problema advectivo–difusivo não se apresentam como modelo a *puff*, pois consideram o fato da emissão ser contínua. E também, não utilizam a metodologia de Green, que possibilita a emissão de posição arbitrária. Demonstrando que o trabalho aqui proposto também pode ser considerado uma expansão do modelo ADMM.

Na próxima seção são apresentados os algoritmos utilizados na implementação dos modelos apresentados por este trabalho.

4.1.4 – Algoritmos Computacionais

Os métodos apresentados neste trabalho calculam a concentração de poluentes num determinado ponto com auxílio computacional. As equações (4.54) e (4.71) juntamente com as parametrizações utilizadas, dadas pelas equações (4.10) e (4.11) são elementos característicos do presente modelo que, acrescidas dos dados micrometeorológicos dos experimentos reproduzem a concentração de poluentes.

Para um melhor entendimento dos processos de obtenção da concentração dos modelos descritos neste trabalho, apresenta-se um esquema do algoritmo de cada um deles. A implementação foi feita na linguagem de programação FORTRAN 90 [Kerrigan, 1993].

4.1.4.1 – Algoritmo do modelo GILTT

- Dados de entrada: dados micrometeorológicos do experimento:

$$u_*, L, w_*, z_i, z_0, H_s, Q$$

- Emissão de cada *puff* em intervalos de tempo Δt_1
 - Cálculo de cada *puff* num passo de tempo Δt_2 .
 - Cálculo do vento: u constante para fixado com a altura da fonte, ($z=H_s$)
 - Cálculo do baricentro: $x_0 = u\Delta t_2$
 - Cálculo da gaussiana em x : $\psi_{puff}(x, t)$
 - Cálculo do coeficiente de difusão: $K(z)$ e sua derivada $K'(z)$
 - Calcula a concentração de cada *puff* por meio da equação (4.47).
- A concentração final é calculada por meio da equação (4.54);

- Calcula os índices estatísticos.

4.1.4.2 – Algoritmo do modelo ADMM

- Dados de entrada: dados micrometeorológicos do experimento:

$$u_*, L, w_*, z_i, z_0, H_s, Q$$

- Emissão de cada *puff* em intervalos de tempo Δt_1
 - Cálculo de cada *puff* num passo de tempo Δt_2 .
 - Cálculo do vento: u constante para fixado com a altura da fonte, ($z=H_s$)
 - Cálculo do baricentro: $x_0 = u\Delta t_2$
 - Cálculo da gaussiana em x : $\psi_{puff}(x, t)$
 - Discretiza a CLC em N subcamadas e calcula:
 - ✓ Cálculo do coeficiente de difusão: K_n
 - ✓ Para os pontos e raízes da Quadratura: inversão no tempo: ($i = 1 : k$, com $k = 8$);
 - ✓ Monta e resolve o sistema (Eliminação de Gauss)
 - ✓ Calcula a concentração de cada *puff* por meio da equação (4.68).
- A concentração final é calculada por meio da equação (4.71);
- Calcula os índices estatísticos.

Neste trabalho, como pode ser observado neste capítulo, apresenta-se duas soluções para equação de advecção-difusão bidimensional dependente do tempo com termo fonte, apresentadas nas seções (4.1.2) e (4.1.3). Estas soluções foram obtidas por metodologias distintas e apresentadas como: a primeira GILTT, como série, em que a solução é obtida pelo truncamento dessa série; e a segunda, ADMM, em que a solução é determinada por uma integral, cuja inversão da transformada de Laplace é desenvolvida por Quadratura Gaussiana. Como a formulação matemática de cada método é diferente, tem-se também como objetivo: além de confrontá-los com dados experimentais existentes na literatura, compará-los entre si.

Os resultados e avaliação dos modelos apresentados neste trabalho são descritos no próximo capítulo.

5. AVALIAÇÕES DOS MODELOS DE DISPERSÃO DE POLUENTES

O desempenho de qualquer modelo matemático de dispersão é definido de acordo com o que ficou estabelecido nos resultados dos estudos em relação a sua avaliação estatística. E o significado disto é saber se estes resultados estão dentro dos padrões previstos na literatura. Desta forma, afirmar que um modelo é operacional significa dizer que, dentro de seus parâmetros e características físicas da sua aplicação, ele poderá ser utilizado no estudo da dispersão de poluentes na atmosfera.

Um modelo é considerado operacional e poderá ser utilizado para o controle da qualidade do ar, quando apresentar os seguintes atributos [Venkatran e Wyngaard, 1988]:

- (1) Deve incorporar uma descrição real dos processos físicos que governam o sistema a ser modelado;
- (2) Deve produzir estimativas adequadas de dados observados.

Modelos de poluição do ar são, em geral, somente descrições de processos complexos, como a turbulência, que governa a dispersão. Isso mostra que é muito difícil medidas objetivas dos dois atributos do desempenho do modelo.

Os passos básicos que envolvem a avaliação de um modelo matemático para o estudo da dispersão de poluentes são:

- (1) exame da estrutura do modelo;
- (2) análise da sensibilidade;
- (3) teste das predições do modelo contra observações.

O exame das hipóteses envolvidas na formulação do modelo que está sendo avaliado é extremamente importante, porque um acentuado desvio entre as predições do modelo e as observações faz a clara discriminação entre os diferentes modelos.

A análise de sensibilidade é importante no sentido de identificar os dados críticos de entrada do modelo. O teste das predições do modelo deve concentrar-se nos dados de entrada que tornam o modelo mais sensível, ou seja, os diferentes coeficientes de difusão, perfis de vento e os termos adicionais.

5.1 - Dados Experimentais

Para avaliar o desempenho de cada modelo, foram utilizados dados observados no experimento de Copenhagen, que é um experimento de fonte elevada. A razão entre a altura onde ocorre a emissão de poluentes (H_s) e a altura da CLC (z_i) determina se o experimento é considerado de fonte alta ou baixa [Costa, 2004], ou seja:

- ✓ se $\frac{H_s}{z_i} < 0,1$ o experimento é considerado de fonte baixa;
- ✓ se $\frac{H_s}{z_i} > 0,1$ o experimento é considerado de fonte elevada.

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

- ✓ se $\frac{z_i}{|L|} < 5$ tem-se convecção fraca
- ✓ se $5 < \frac{z_i}{|L|} < 10$ tem-se convecção moderada;
- ✓ se $\frac{z_i}{|L|} > 10$ tem-se convecção intensa.

5.1.1 - O Experimento de Copenhagen

Para os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning e Lyck, 1984 e Gryning et al., 1987, o poluente passivo foi abandonado sem empuxo de uma altura de 115 m, essa fonte consiste de um cilindro posicionado perpendicularmente ao chão simulando uma chaminé e coletado por três arcos perpendiculares ao vento médio. O local do experimento foi basicamente residencial, com o comprimento de rugosidade de aproximadamente 0.6 m. Os arcos foram posicionados de 2 a 6 km do ponto no qual ocorreu a liberação do traçador, como mostra a Figura 5.1.

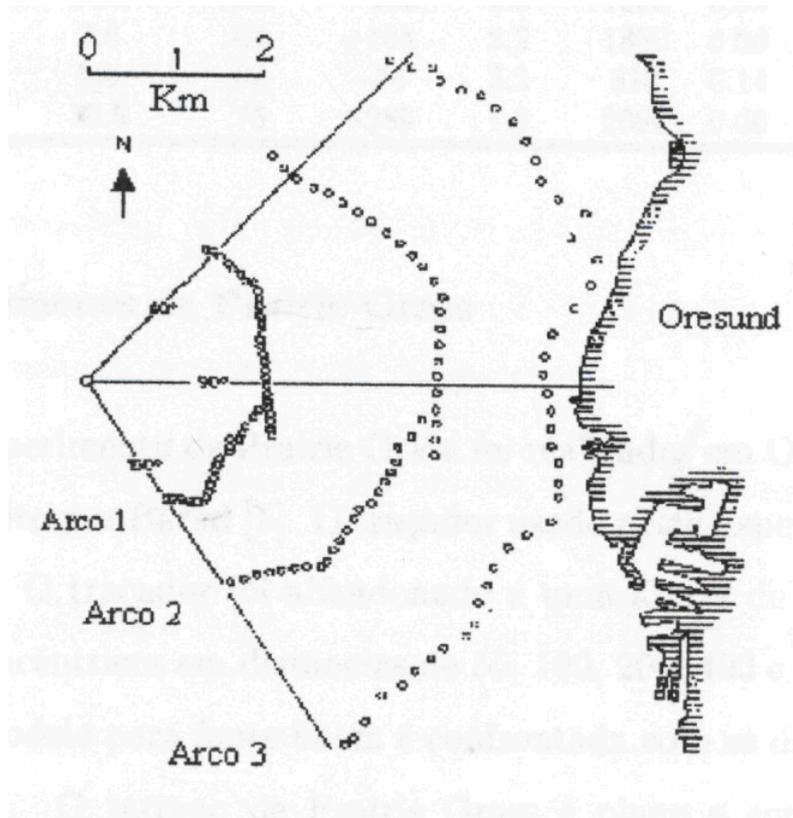


Figura 5.1 - Experimento de Copenhagen. [Costa, 2004]

As concentrações integradas lateralmente (normalizadas pela taxa de emissão Q) foram observadas ao nível do solo ($z = 0$). As emissões de hexafluoreto de enxofre (SF_6) começaram 1h antes do início da amostragem. A concentração foi obtida fazendo-se médias na segunda hora, ou seja, depois de uma hora de emissão é que as concentrações começaram a serem medidas a cada 20 minutos. Com este procedimento, na segunda hora, obtém-se 3 (três) medidas da concentração de poluentes. Em Gryning et al., 1987, os dados micrometeorológicos (velocidade de fricção e comprimento de Monin-Obukhov) são medidos a cada 10 minutos. Neste trabalho, foram feitos médias desses dados desde o momento inicial da emissão, até o momento de cada medida de concentração. Isso foi possível devido ao fato que os coeficientes de difusão, aqui considerados, não serem dependentes do tempo. As tabelas 5.1, 5.2 e 5.3 apresentam a velocidade de fricção, o comprimento de Monin-Obukhov e a altura da camada limite, respectivamente, usadas nas simulações deste trabalho. A tabela 5.4 apresenta as concentrações observadas (C_o) (10^{-4}sm^{-2}) do Experimento de Copenhagen, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q$ nos diferentes tempos de medição

Tabela 5.1 – Velocidade de fricção u_* (m/s) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 min

| Intervalos de tempo | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 7 | 8 | 9 |
|---------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 1 | .36 | .68 | .46 | .56 | .58 | .48 | .65 | .72 |
| 2 | .37 | .67 | .45 | .51 | .52 | .48 | .79 | .73 |
| 3 | .40 | .81 | .47 | .37 | .51 | .57 | .67 | .60 |
| 4 | .43 | .68 | .39 | .44 | .58 | .62 | .67 | .59 |
| 5 | .35 | .75 | .39 | .48 | .59 | .53 | .68 | .65 |
| 6 | .34 | .74 | .40 | .48 | .52 | .65 | .65 | .71 |
| 7 | .42 | .76 | .40 | .39 | .52 | .63 | .68 | .73 |
| 8 | .43 | .82 | .41 | .40 | .45 | .65 | .67 | .73 |
| 9 | .40 | .76 | .31 | .39 | .44 | .66 | .73 | .73 |
| 10 | .37 | .73 | .34 | .39 | .44 | .62 | .73 | .66 |
| 11 | .35 | .69 | .39 | .39 | .44 | .52 | .75 | .67 |
| 12 | .36 | .66 | .40 | .39 | .43 | .62 | .69 | .74 |

Tabela 5.2 - Comprimento de Monin-Obukhov L (m) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 min.

| Intervalos de tempo | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 7 | 8 | 9 |
|---------------------|-----|------|------|------|------|------|-----|------|
| 1 | -26 | -178 | -152 | -75 | -492 | -71 | -71 | -793 |
| 2 | -23 | -227 | -194 | -42 | -215 | -80 | -85 | -471 |
| 3 | -83 | -311 | -106 | -23 | -368 | -64 | -47 | -202 |
| 4 | -42 | -160 | -101 | -32 | -735 | -111 | -49 | -366 |
| 5 | -36 | -203 | -129 | -71 | -366 | -177 | -45 | -633 |
| 6 | -42 | -286 | -70 | -80 | -273 | -67 | -63 | -588 |
| 7 | -47 | -155 | -83 | -83 | -273 | -87 | -41 | -593 |
| 8 | -38 | -228 | -60 | -101 | -262 | -71 | -47 | -471 |
| 9 | -83 | -184 | -106 | -129 | -395 | -56 | -70 | -389 |
| 10 | -21 | -389 | -42 | -129 | -395 | -111 | -64 | -375 |
| 11 | -32 | -133 | -101 | -129 | -395 | -215 | -52 | -262 |
| 12 | -29 | -375 | -70 | -129 | -759 | -123 | -39 | -252 |

Tabela 5.3 - Altura da camada limite para os experimentos de Copenhagen

| exp | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 7 | 8 | 9 |
|-----------|------|------|------|-----|-----|------|-----|------|
| z_i (m) | 1980 | 1920 | 1120 | 390 | 820 | 1850 | 810 | 2090 |

Tabela 5.4 - Concentração observadas (C_o) (10^{-4}sm^{-2}), normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q$ nos diferentes tempos de medição.

| Exp. | Dist. (m) | I | II | III |
|------|-----------|---------|---------|---------|
| | | Período | Período | Período |
| 1 | 1900. | 5.60 | 8.27 | 5.51 |
| 1 | 3700. | 1.74 | 2.25 | 3.02 |
| 2 | 2100. | 4.36 | 5.14 | 6.73 |
| 2 | 4200. | 2.72 | 1.96 | 4.20 |
| 3 | 1900. | 6.00 | 9.26 | 9.32 |
| 3 | 3700. | 4.70 | 6.53 | 7.62 |
| 3 | 5400. | 3.93 | 5.24 | 4.01 |
| 4 | 4000. | 6.26 | 9.97 | 17.37 |
| 5 | 2100. | 5.78 | 8.62 | 5.89 |
| 5 | 4200. | 5.09 | 6.55 | 5.91 |
| 5 | 6100. | 5.07 | 5.37 | 4.65 |
| 7 | 2000. | 2.72 | 12.74 | 5.25 |
| 7 | 4100. | 2.31 | 1.34 | 2.42 |
| 7 | 5300. | 2.45 | 0.64 | 1.49 |
| 8 | 1900. | 4.00 | 4.84 | 3.65 |
| 8 | 3600. | 2.31 | 1.34 | 2.42 |
| 8 | 5300. | 2.45 | 0.64 | 1.49 |
| 9 | 2100. | 3.98 | 3.93 | 5.90 |
| 9 | 4200. | 3.46 | 2.44 | 3.40 |
| 9 | 6000. | 3.96 | 2.04 | 1.76 |

O conjunto de dados gerados pelos modelos apresentados neste trabalho foram comparados com os dados observados nos experimentos de Copenhagen, descritos nesta seção, por meio dos índices estatísticos para verificação do desempenho de cada modelo. Apresenta-se a seguir os índices estatísticos considerados neste trabalho.

5.2 - Índices Estatísticos

Neste trabalho os índices o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas no experimento de Copenhagen e preditas pelo modelo em estudo. \bar{C} é a concentração de poluentes e σ é o desvio padrão. Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo [Hanna, 1989]:

Nmse (*erro quadrático médio normalizado*) = $\overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p}$; informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos e observados. É um índice estatístico que varia de zero a infinito e seu valor ótimo é zero.

Fa2 (*Fator de dois*) = fração de dados (%) que estão entre $0.5 \leq (C_p / C_o) \leq 2$. O valor ideal é 1 (um).

Cor (*coeficiente de correlação*) = $\frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})(\overline{C_p} - \overline{C_o})}{\sigma_o \sigma_p}$; descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Valor 1 (um) indica bom desempenho.

Fb (*Fração de inclinação*) = $\frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})}{0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}$; informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. Fornece uma medida de quanto, na média, o modelo consegue aproximar-se da melhor estimativa das concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

Fs (*Desvio Fracional Padrão*) = $(\sigma_o - \sigma_p) / 0.5(\sigma_o + \sigma_p)$. O valor ótimo é zero.

Para realização desta análise estatística, como dito anteriormente, é aplicado o programa desenvolvido por Hanna, 1989, que utiliza um procedimento padrão da área de dispersão de poluentes na atmosfera.

5.3 – Resultados e análise dos modelos

Nas Tabelas 5.5 e 5.6 estão os resultados dos índices estatísticos dos modelos a *puff* ADMM e GILTT, respectivamente, considerando o coeficiente de difusão proposto por Pleim Chang, 1992, descrito na equação (4.10), relatando os seus desempenhos.

Tabela 5.5 - Desempenho do modelo ADMM – com $K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

| modelo | Δt_1 (s) | Δt_2 (s) | NMSE | COR | FA2 | FB | FS |
|--------|------------------|------------------|------|------|------|-------|-------|
| ADMM | 600 | 600 | 0.71 | 0.50 | 0.58 | -0.01 | -0.41 |
| ADMM | 600 | 300 | 0.53 | 0.54 | 0.65 | -0.01 | -0.29 |
| ADMM | 600 | 60 | 0.42 | 0.57 | 0.72 | 0.14 | -0.02 |
| ADMM | 300 | 300 | 0.50 | 0.55 | 0.68 | -0.04 | -0.28 |
| ADMM | 300 | 60 | 0.42 | 0.58 | 0.72 | 0.13 | -0.03 |
| ADMM | 120 | 120 | 0.41 | 0.57 | 0.72 | 0.07 | -0.09 |
| ADMM | 120 | 60 | 0.41 | 0.58 | 0.72 | 0.13 | -0.03 |

Tabela 5.6 - Desempenho do modelo GILTT -- com $K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

| modelo | $\Delta t_1 (s)$ | $\Delta t_2 (s)$ | NMSE | COR | FA2 | FB | FS |
|---------------|------------------|------------------|-------------|------------|------------|-----------|-----------|
| GILTT | 600 | 600 | 0.65 | 0.49 | 0.60 | 0.11 | -0.26 |
| GILTT | 600 | 300 | 0.50 | 0.53 | 0.68 | 0.11 | -0.14 |
| GILTT | 600 | 60 | 0.46 | 0.57 | 0.72 | 0.25 | 0.13 |
| GILTT | 300 | 300 | 0.47 | 0.54 | 0.70 | 0.08 | -0.13 |
| GILTT | 300 | 60 | 0.46 | 0.57 | 0.68 | 0.25 | 0.13 |
| GILTT | 120 | 120 | 0.44 | 0.57 | 0.72 | 0.19 | 0.06 |
| GILTT | 120 | 60 | 0.46 | 0.57 | 0.68 | 0.25 | 0.13 |

- Considera-se nas Tabelas 5.5 e 5.6 de dados dos modelos ADMM e GILTT, $\Delta t_1 (s)$ como o intervalo de nascimento de cada *puff* e $\Delta t_2 (s)$ como o intervalo de tempo para o cálculo da concentração de cada *puff*.

Exemplo: No terceiro caso grifado na tabela, considera-se que a cada 20 min a fonte emite um novo *puff*, sendo que o cálculo da concentração de cada *puff* foi simulado num intervalo de tempo de 1(um) minuto. A concentração final em um determinado ponto da superfície é determinada pela soma das concentrações de cada *puff*, que contribuíram para poluição do ar naquele ponto.

- O melhores resultados e também, mais aproximados nos dois modelos foi para o intervalo de nascimento $\Delta t_1=600s$ e o intervalo de tempo para o cálculo da concentração de cada *puff*, $\Delta t_2=60s$.
- Analisando os índices estatísticos nas Tabela 5.4 e 5.5 dos resultados dos modelos ADMM e GILTT observa-se:
 - ✓ Os valores do NMSE, *erro quadrático médio normalizado*, obtidos pelos dados de concentração calculados pelos modelos ADMM e GILTT, permite afirmar que os resultados obtidos pelos modelos estão relativamente próximos aos dados experimentais.
 - ✓ Para o *coeficiente de correlação (Cor)*, cujo valor ótimo é um, os modelos apresentaram resultados semelhantes e, também, satisfatórios.
 - ✓ Em relação ao fator de dois, Fa2, nos dois modelos, todos os resultados deram relativamente próximos de 1(um), apesar de apresentarem valores abaixo dele. Isto

significa que os dados se distribuem com um percentual de 72 % no intervalo Fa2, o que pode ser considerado como um bom resultado.

Para facilitar a compreensão dos dados apresentados nas tabelas 5.5 e 5.6, apresenta-se as Figuras 5.2 e 5.3 com um diagrama de espalhamento da concentração observada experimentalmente ao nível do solo e as simuladas pelos modelos ADMM e GILTT, respectivamente.

Normalmente, na análise de gráficos de espalhamento, introduz-se uma reta formando um ângulo de 45° com a linha vertical e horizontal para a melhor visualização da concordância dos resultados. Quanto mais próximo estiverem os dados dessa reta, melhores os resultados.

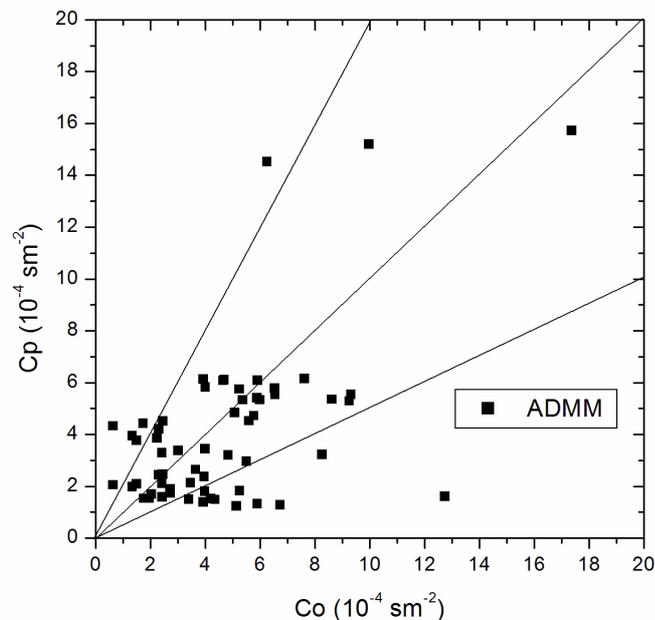


Figura 5.2 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e as previstas (C_p) do modelo ADMM, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

Analisando os gráficos é possível observar que, embora tenham acontecido de alguns resultados superestimarem ou subestimarem os dos dados experimentais, muitos deles deram no intervalo do Fa2. Isto caracteriza um bom resultado para os dois modelos.

- ✓ O *Desvio Fracional Padrão*, F_b , possibilita uma medida de quanto, na média, o modelo consegue aproximar-se da estimativa das concentrações observadas, o melhor

resultado é zero. Os modelos apresentaram valores bem próximos de zero, caracterizando um bom resultado.

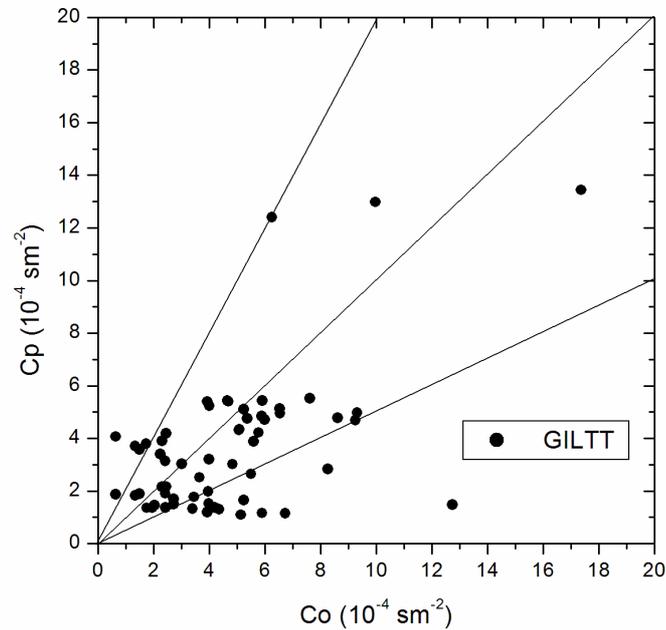


Figura 5.3 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (Co) e as preditas (Cp) do modelo GILTT, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

- ✓ Para F_s , cujo valor ótimo é zero, considera-se que os modelos também apresentaram bons resultados.
- Comparando os resultados das tabelas 5.5 e 5.6 é possível observar que os modelos apresentam uma boa concordância entre si, podendo-se afirmar que esses métodos apresentam performances bem semelhantes, quando se considera o coeficiente de Pleim Chang, 1992.

Na Figura 5.4 da concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (Co) e as preditas (Cp) dos modelos ADMM e GILTT é possível observar a semelhança nos resultados dos dois modelos.

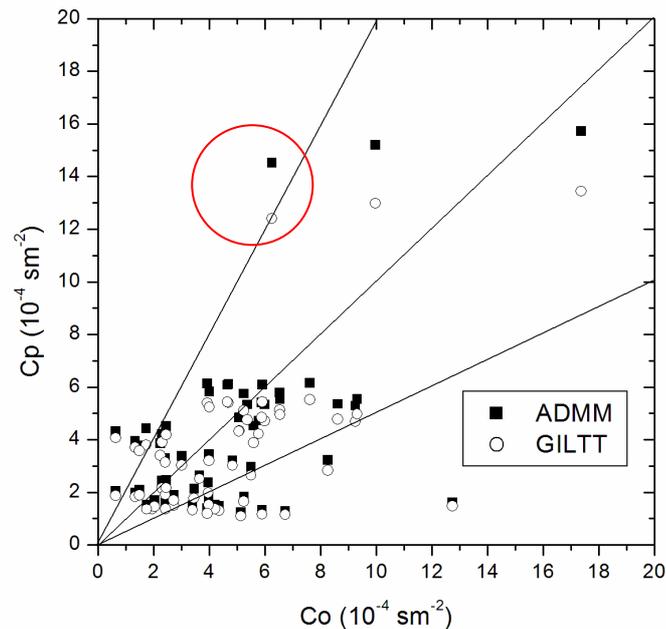


Figura 5.4 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e as preditas (C_p) dos modelos ADMM e GILTT, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Pleim Chang, 1992.

No gráfico de espalhamento, Figura 5.4, circulado de vermelho, aparece um resultado em que o modelo GILTT varia no intervalo do Fa2, $0.5 \leq (C_p / C_o) \leq 2$, e o do ADMM não. A Tabela 5.7 elucida o fato onde deu essa diferença entre os modelos.

Ao analisar a razão entre a concentração predita pela observada, do experimento 4 da Tabela 5.7, tem-se $2,3 \left(\frac{14,52}{6,26} \cong 2,3 \right)$, no caso do ADMM, indicando que este resultado sai fora

do intervalo do Fa2. Já para o caso da GILTT, tem-se a razão $\frac{12,40}{6,26} \cong 2,0$, que ainda está dentro

do intervalo do Fa2. Apesar dos resultados preditos 14,52 e 12,40 pelos modelos ADMM e GILTT, respectivamente, eles não diferem muito entre si, o que demonstra não ser um diferencial entre os modelos considerados neste trabalho.

O teste das predições de qualquer modelo é recomendável considerar coeficientes de difusão distintos. Para tanto, nas Tabelas 5.8 e 5.9 são apresentados os resultados dos índices estatísticos dos modelos a *puff* ADMM e GILTT, respectivamente, considerando o coeficiente de difusão proposto por Degrazia et al., 2001.

Tabela 5.7 – Concentração observadas (C_o) e as previstas C_p (10^{-4}sm^{-2}) nos modelos ADMM e GILTT, considerando o $K(z)$ de Pleim Chang, 1992, nos diferentes períodos de medição e com $\Delta t_1(s) = 600$ e $\Delta t_2(s)=60$

| Exp | dist. (m) | I período | | | II período | | | III período | | |
|-----|--------------|-----------|-------|-------|------------|-------|-------|-------------|-------|-------|
| | | C_o | C_p | | C_o | C_p | | C_o | C_p | |
| | | | ADMM | GILTT | | ADMM | GILTT | | ADMM | GILTT |
| 1 | 1900. | 5.60 | 4.53 | 3.88 | 8.27 | 3.23 | 2.84 | 5.51 | 2.96 | 2.65 |
| 1 | 3700. | 1.74 | 4.43 | 3.80 | 2.25 | 3.87 | 3.40 | 3.02 | 3.38 | 3.03 |
| 2 | 2100. | 4.36 | 1.49 | 1.30 | 5.14 | 1.24 | 1.10 | 6.73 | 1.28 | 1.15 |
| 2 | 4200. | 2.72 | 1.73 | 1.50 | 1.96 | 1.53 | 1.36 | 4.20 | 1.52 | 1.37 |
| 3 | 1900. | 6.00 | 5.34 | 4.71 | 9.26 | 5.29 | 4.69 | 9.32 | 5.54 | 4.97 |
| 3 | 3700. | 4.70 | 6.12 | 5.40 | 6.53 | 5.78 | 5.13 | 7.62 | 6.16 | 5.52 |
| 3 | 5400. | 3.93 | 6.13 | 5.40 | 5.24 | 5.75 | 5.11 | 4.01 | 5.83 | 5.23 |
| 4 | 4000. | 6.26 | 14.52 | 12.40 | 9.97 | 15.20 | 12.98 | 17.37 | 15.72 | 13.44 |
| 5 | 2100. | 5.78 | 4.72 | 4.22 | 8.62 | 5.36 | 4.78 | 5.89 | 5.42 | 4.84 |
| 5 | 4200. | 5.09 | 4.85 | 4.34 | 6.55 | 5.54 | 4.95 | 5.91 | 6.09 | 5.43 |
| 5 | 6100. | 5.07 | 4.83 | 4.32 | 5.37 | 5.34 | 4.76 | 4.65 | 6.08 | 5.43 |
| 7 | 2000. | 2.72 | 1.91 | 1.69 | 12.74 | 1.62 | 1.48 | 5.25 | 1.83 | 1.65 |
| 7 | 4100. | 2.31 | 2.44 | 2.16 | 1.34 | 1.99 | 1.82 | 2.42 | 2.10 | 1.91 |
| 7 | 5300. | 2.45 | 2.46 | 2.17 | 0.64 | 2.06 | 1.88 | 1.49 | 2.09 | 1.90 |
| 8 | 1900. | 4.00 | 3.45 | 3.20 | 4.84 | 3.21 | 3.02 | 3.65 | 2.65 | 2.52 |
| 8 | 3600. | 2.31 | 4.21 | 3.90 | 1.34 | 3.95 | 3.71 | 2.42 | 3.30 | 3.14 |
| 8 | 5300. | 2.45 | 4.52 | 4.18 | 0.64 | 4.33 | 4.07 | 1.49 | 3.77 | 3.58 |
| 9 | 2100. | 3.98 | 1.81 | 1.52 | 3.93 | 1.39 | 1.20 | 5.90 | 1.32 | 1.16 |
| 9 | 4200. | 3.46 | 2.13 | 1.78 | 2.44 | 1.59 | 1.37 | 3.40 | 1.50 | 1.32 |
| 9 | 6000. | 3.96 | 2.38 | 1.99 | 2.04 | 1.69 | 1.46 | 1.76 | 1.54 | 1.36 |

- Diferente dos modelos usados com o coeficiente de Pleim Chang, 1992, os usados com o do Degrazia et al., 2001, o melhor desempenho comum aos modelos em estudo foi para $\Delta t_1=120$ s e $\Delta t_2=120$ s.

Tabela 5.8 - Desempenho do modelo ADMM – $K(z)$ de Degrazia.et al.,2001.

| modelo | $\Delta t_1(s)$ | $\Delta t_2(s)$ | NMSE | COR | FA2 | FB | FS |
|--------|-----------------|-----------------|------|------|------|-------|-------|
| ADMM | 600 | 600 | 0.72 | 0.50 | 0.60 | 0.07 | -0.38 |
| ADMM | 600 | 300 | 0.55 | 0.54 | 0.68 | 0.07 | -0.26 |
| ADMM | 600 | 60 | 0.47 | 0.57 | 0.72 | 0.21 | 0.003 |
| ADMM | 300 | 300 | 0.49 | 0.55 | 0.65 | -0.06 | -0.27 |
| ADMM | 300 | 60 | 0.39 | 0.57 | 0.75 | 0.11 | -0.01 |
| ADMM | 120 | 120 | 0.39 | 0.57 | 0.75 | 0.05 | 0.08 |
| ADMM | 120 | 60 | 0.39 | 0.58 | 0.75 | 0.11 | -0.01 |

Tabela 5.9 - Desempenho do modelo GILTT – $K(z)$ de Degrazia et al., 2001.

| modelo | $\Delta t_1 (s)$ | $\Delta t_2 (s)$ | NMSE | COR | FA2 | FB | FS |
|--------|------------------|------------------|------|------|------|------|-------|
| GILTT | 600 | 600 | 0.62 | 0.48 | 0.60 | 0.09 | -0.24 |
| GILTT | 600 | 300 | 0.47 | 0.53 | 0.73 | 0.08 | -0.11 |
| GILTT | 600 | 60 | 0.44 | 0.56 | 0.72 | 0.22 | 0.17 |
| GILTT | 300 | 300 | 0.44 | 0.54 | 0.73 | 0.05 | -0.10 |
| GILTT | 300 | 60 | 0.43 | 0.56 | 0.75 | 0.22 | 0.17 |
| GILTT | 120 | 120 | 0.41 | 0.56 | 0.77 | 0.16 | 0.10 |
| GILTT | 120 | 60 | 0.46 | 0.57 | 0.70 | 0.25 | 0.13 |

- Analisando os índices estatísticos nas Tabela 5.8 e 5.9 é possível notar que em relação ao *fator de dois*, Fa2, houve uma melhora nos resultados (GILTT, de 72% para 77%; no ADMM, 72% para 75%). Isto demonstra a sensibilidade do modelo em relação aos coeficientes de difusão.
- Em relação aos demais índices é possível notar que tanto o modelo ADMM quanto o GILTT, na sua maioria, houve uma pequena melhora nos resultados obtidos com o coeficiente de difusão de Degrazia et al., 2001.
- Comparando os resultados das tabelas 5.8, 5.9 e 5.10, constata-se, novamente, que os modelos apresentam uma boa concordância entre si, podendo-se afirmar que esses métodos apresentam performances bem semelhantes, quando se considera também o coeficiente de Degrazia et al., 2001.

O gráfico de espalhamento dos dois modelos apresentado na Figura 5.5, demonstra a semelhança nos resultados dos modelos considerados por este trabalho.

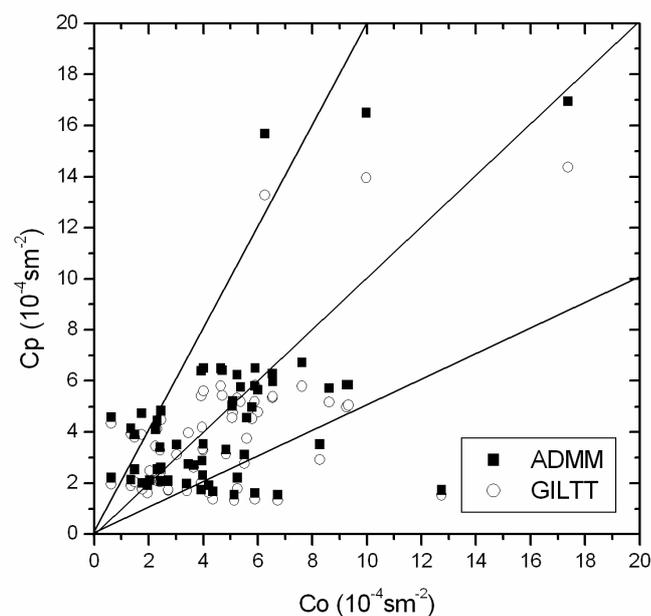


Figura 5.5 - Concentração observada integrada lateralmente ao nível do solo (C_o) e as preditas (C_p) dos modelos ADMM e GILTT, normalizada com a taxa de emissão $C(x,z,t)/Q - K(z)$ de Degrazia et al., 2001.

- Os dados apresentados nas tabelas 5.5, 5.6 e, agora, 5.8, 5.9, são representados na Figura 5.6 com todos os diagramas de espalhamento da concentração observada experimentalmente ao nível do solo e as simuladas pelos modelos ADMM e GILTT respectivamente, considerando-se em (a) o coeficiente de difusão de Pleim Chang, 1992, e em (b) o de Degrazia et al., 2001.
- Neste paralelo da Figura 05 é possível observar o que foi dito anteriormente, pois graficamente tanto a semelhança nos resultados em relação aos dados experimentais, como a diferença deles na mudança de coeficiente de difusão é possível perceber.

Com o que foi anteriormente exposto pode-se concluir que o objetivo do presente trabalho foi atingido, pois simulou corretamente o comportamento do poluente em condições meteorológicas não homogêneas e não estacionária de emissão instantânea, ou seja, o modelo a *puff*.

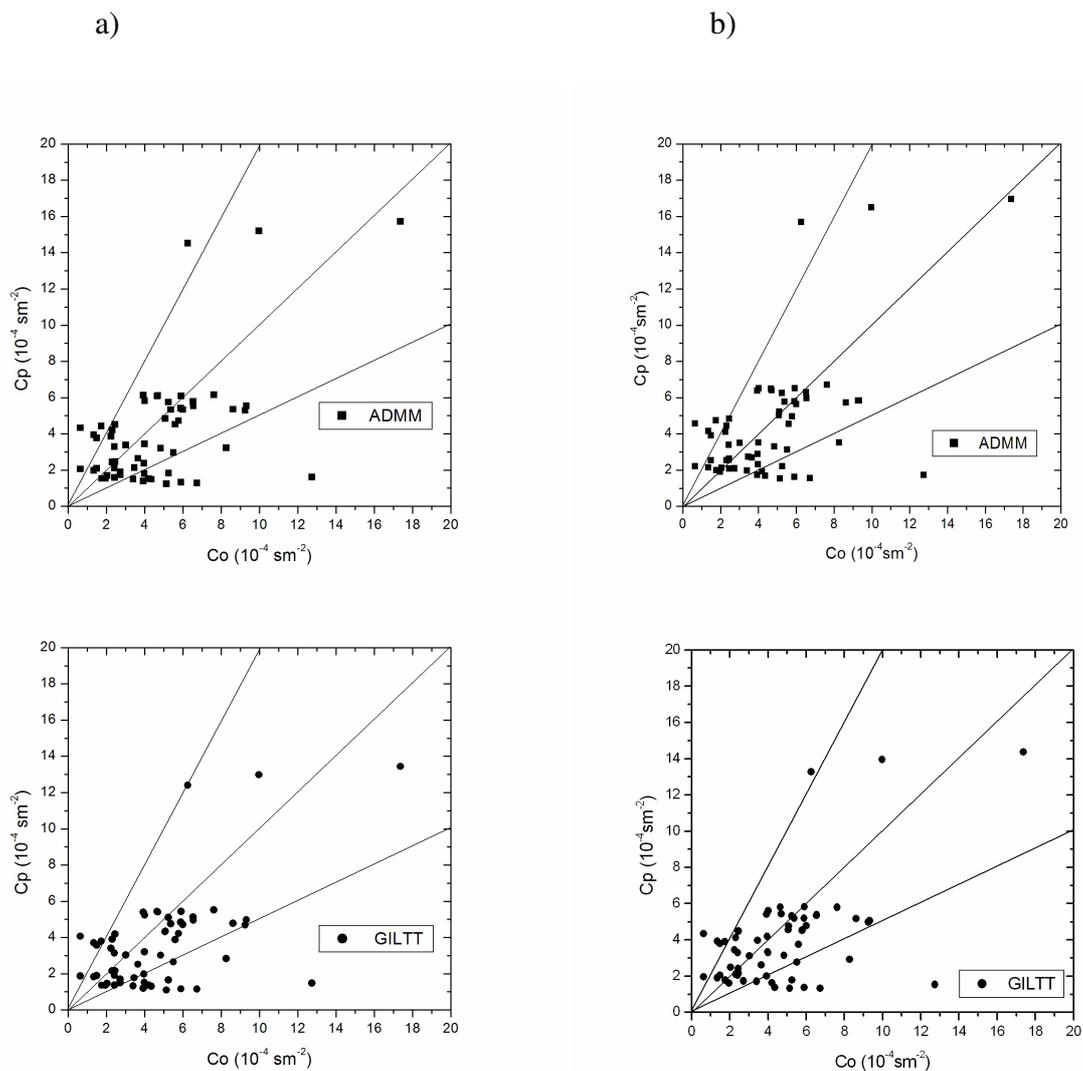


Figura 5.6 - Gráfico de espalhamento das concentrações observadas experimentalmente ao nível do solo e as simuladas pelos modelos ADMM e GILTT, respectivamente, considerando-se em (a) o coeficiente de difusão de Pleim Chang e em (b) o do Degrazia et al., 2001.

Na realização da simulação foi usado um modelo Lagrangeano a *puff* Gaussiano bidimensional transiente, escrito em termos de função de *Green* unidimensional transiente e uma gaussiana em x , caracterizando a difusão nesta direção, onde o baricentro de cada *puff* é transportado pelo vento, variando no tempo.

Foi apresentada uma comparação entre os métodos ADMM e GILTT para simular a dispersão de poluentes na camada limite planetária resolvendo um problema Advectivo-difusivo bidimensional transiente, com termo fonte, descrevendo o modelo a *puff*. Nesta comparação foi possível observar uma boa concordância entre as concentrações medidas e as concentrações geradas, por ambos os métodos de resolução do problema bem como por ambos os coeficientes de difusão.

Tabela 5.10 – Concentração observadas e as previstas nos modelos ADMM e GILTT, considerando o $K(z)$ de Degrazia, 2001, nos diferentes períodos de medição e com $\Delta t_1(s) = 120$ e $\Delta t_2(s) = 120$

| Exp | Dist. (m) | I periodo | | | II periodo | | | III periodo | | |
|-----|--------------|-----------|-------|-------|------------|-------|-------|-------------|-------|-------|
| | | Co | Cp | | Co | Cp | | Co | Cp | |
| | | | ADMM | GILTT | | ADMM | GILTT | | ADMM | GILTT |
| 1 | 1900. | 5.60 | 4.56 | 3.76 | 8.27 | 3.52 | 2.92 | 5.51 | 3.12 | 2.78 |
| 1 | 3700. | 1.74 | 4.74 | 3.90 | 2.25 | 4.11 | 3.45 | 3.02 | 3.51 | 3.12 |
| 2 | 2100. | 4.36 | 1.68 | 1.37 | 5.14 | 1.54 | 1.33 | 6.73 | 1.55 | 1.33 |
| 2 | 4200. | 2.72 | 2.09 | 1.73 | 1.96 | 1.91 | 1.62 | 4.20 | 1.92 | 1.62 |
| 3 | 1900. | 6.00 | 5.65 | 4.77 | 9.26 | 5.85 | 4.98 | 9.32 | 5.85 | 5.05 |
| 3 | 3700. | 4.70 | 6.41 | 5.43 | 6.53 | 6.29 | 5.34 | 7.62 | 6.72 | 5.80 |
| 3 | 5400. | 3.93 | 6.39 | 5.42 | 5.24 | 6.25 | 5.31 | 4.01 | 6.51 | 5.61 |
| 4 | 4000. | 6.26 | 15.69 | 13.27 | 9.97 | 16.50 | 13.95 | 17.37 | 16.95 | 14.37 |
| 5 | 2100. | 5.78 | 4.97 | 4.53 | 8.62 | 5.72 | 5.18 | 5.89 | 5.80 | 5.20 |
| 5 | 4200. | 5.09 | 5.22 | 4.75 | 6.55 | 5.98 | 5.39 | 5.91 | 6.51 | 5.82 |
| 5 | 6100. | 5.07 | 5.03 | 4.57 | 5.37 | 5.77 | 5.20 | 4.65 | 6.49 | 5.80 |
| 7 | 2000. | 2.72 | 2.10 | 1.75 | 12.74 | 1.73 | 1.54 | 5.25 | 2.22 | 1.79 |
| 7 | 4100. | 2.31 | 2.54 | 2.11 | 1.34 | 2.14 | 1.90 | 2.42 | 2.56 | 2.06 |
| 7 | 5300. | 2.45 | 2.62 | 2.16 | 0.64 | 2.21 | 1.97 | 1.49 | 2.54 | 2.04 |
| 8 | 1900. | 4.00 | 3.53 | 3.29 | 4.84 | 3.31 | 3.13 | 3.65 | 2.70 | 2.63 |
| 8 | 3600. | 2.31 | 4.45 | 4.13 | 1.34 | 4.15 | 3.93 | 2.42 | 3.40 | 3.31 |
| 8 | 5300. | 2.45 | 4.83 | 4.49 | 0.64 | 4.58 | 4.34 | 1.49 | 3.91 | 3.80 |
| 9 | 2100. | 3.98 | 2.32 | 3.34 | 3.93 | 1.74 | 2.00 | 5.90 | 1.62 | 1.37 |
| 9 | 4200. | 3.46 | 2.75 | 3.96 | 2.44 | 2.09 | 2.41 | 3.40 | 1.98 | 1.71 |
| 9 | 6000. | 3.96 | 2.88 | 4.19 | 2.04 | 2.12 | 2.48 | 1.76 | 2.00 | 1.77 |

6. CONCLUSÃO

Resolver problemas de poluição do ar, que inferem na solução de problemas de valor contorno, problema aqui apresentado são sempre considerados pelos pesquisadores da área como um desafio. Este desafio é no sentido de se obter uma metodologia adequada, que mais se aproxime da situação real (física e/ou química) para solução do problema proposto. Este fato é constatado pela variedade de metodologias encontradas na literatura.

Neste trabalho buscou-se contribuir para o aumento das possibilidades metodológicas adotadas na construção de um modelo matemático para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. Para tanto, foram desenvolvidas duas metodologias distintas para a resolução de um mesmo problema bidimensional transiente não-homogêneo com termo fonte, que são respectivamente GILTT e ADMM. Ambos os métodos consistiram em encontrar a função de Green para solucionar a equação de advecção-difusão unidimensional transiente $G(z,t ; z', t')$, que resolve parte do problema proposto. A solução final do problema bidimensional transiente é determinada multiplicando-se a função de Green construída por uma gaussiana em x , que representa a difusão nessa direção.

Os resultados das simulações, apresentados no capítulo 5, mostram que os objetivos deste trabalho foram alcançados, pois o comportamento do poluente em condições meteorológicas não homogênea e não estacionária de emissão instantânea, ou seja, o modelo a *puff* foi corretamente simulado.

A tarefa de resolver analiticamente um problema bidimensional transiente, com fonte de posição arbitrária e produzindo uma extensão dos modelos GILTT e ADMM foi concluída.

Um estudo comparativo entre os métodos ADMM e GILTT para simular a dispersão de poluentes na camada limite planetária resolvendo um problema advectivo-difusivo bidimensional transiente, com termo fonte descrevendo o modelo a *puff* foi apresentado. Os resultados obtidos pelas metodologias adotadas foram validados com acuidade, o que comprova os cálculos desenvolvidos bem como os códigos computacionais apresentados.

Finalmente, é relevante mencionar que tanto ADMM como GILTT são métodos robustos do ponto de vista computacional e que podem ser aplicados como ferramenta auxiliar para o controle da qualidade do ar.

Para trabalhos futuros, propõe-se que a metodologia aqui apresentada seja desenvolvida para problemas tridimensional transiente:

- aplicando GILTT [Wortman et al., 2005] duplamente para resolver a equação de advecção - difusão bidimensional transiente com fonte arbitrária e transformada de Laplace no tempo, e uma gaussiana na terceira dimensão.
- usar o método GIADMT (Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique) [Costa et al, 2006], que combina o método ADMM e a técnica GILTT para simular o modelo a *puff*, ou seja, resolver a equação de advecção-difusão tridimensional dependente do tempo com fonte arbitrária e transformada de Laplace no tempo.

6. CONCLUSÃO

Resolver problemas de poluição do ar, que inferem na solução de problemas de valor contorno, problema aqui apresentado, são sempre considerados pelos pesquisadores da área como um desafio. Este desafio é no sentido de se obter uma metodologia adequada, que mais se aproxime da situação real (física e/ou química) para solução do problema proposto. Este fato é constatado pela variedade de metodologias encontradas na literatura.

Neste trabalho buscou-se contribuir para o aumento das possibilidades metodológicas adotadas na construção de um modelo matemático para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. Para tanto, foram desenvolvidas duas metodologias distintas para a resolução de um mesmo problema bidimensional transiente não-homogêneo com termo fonte, que são respectivamente GILTT e ADMM. Ambos os métodos consistiram em encontrar a função de Green para solucionar a equação de advecção-difusão unidimensional transiente $G(z,t ; z', t')$, que resolve parte do problema proposto. A solução final do problema bidimensional transiente é determinada multiplicando-se a função de Green construída por uma gaussiana em x , que representa a difusão nessa direção.

Os resultados das simulações, apresentados no capítulo 5, mostram que os objetivos deste trabalho foram alcançados, pois o comportamento do poluente em condições meteorológicas não homogênea e não estacionária de emissão instantânea, ou seja, o modelo a *puff* foi corretamente simulado.

A tarefa de resolver analiticamente um problema bidimensional transiente, com fonte de posição arbitrária e produzindo uma extensão dos modelos GILTT e ADMM foi concluída.

Um estudo comparativo entre os métodos ADMM e GILTT para simular a dispersão de poluentes na camada limite planetária resolvendo um problema advectivo-difusivo bidimensional transiente, com termo fonte descrevendo o modelo a *puff* foi apresentado. Os resultados obtidos pelas metodologias adotadas foram validados com acuidade, o que comprova os cálculos desenvolvidos bem como os códigos computacionais apresentados.

Finalmente, é relevante mencionar que tanto ADMM como GILTT são métodos robustos do ponto de vista computacional e que podem ser aplicados como ferramenta auxiliar para o controle da qualidade do ar.

Para trabalhos futuros, propõe-se que a metodologia aqui apresentada seja desenvolvida para problemas tridimensional transiente:

- aplicando GILTT [Wortman et al., 2005] duplamente para resolver a equação de advecção - difusão bidimensional transiente com fonte arbitrária e transformada de Laplace no tempo, e uma gaussiana na terceira dimensão.
- usar o método GIADMT (Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique) [Costa et al, 2006], que combina o método ADMM e a técnica GILTT para simular o modelo a *puff*, ou seja, resolver a equação de advecção-difusão tridimensional dependente do tempo com fonte arbitrária e transformada de Laplace no tempo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Almeida, G. L. de, 2005. **“Análise da Dispersão de Poluentes na Atmosfera Usando A Técnica da Transformada Integral Generalizada”**. Tese. Engenharia Mecânica. UFRJ.

Avaltroni, Alessandro, 2002. **“Agenda 21 locale e sostenibilita’: indicatori di qualita’ dell’aria per un rapporto stato ambiente. Caso studio di pesaro”**. Tesi di Laurea. Universita’ Degli Studi di Urbino – Facolta’ di Scienze Ambientali.

Anfossi, Domenico, 2005. **“Dispersão lagrangeana na camada limite planetária”**. Do livro “Tópicos em Turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária”. Editora da UFRGS. P. 81-102.

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

Boubel, R.W., Fox, D.L., Turner, D.B. and Stern, A.C., 1994. **“Fundamentals of Air Pollution”**. Academic Press. Third Edition.

Buske, D., Wortmann, S. and Vilhena, M.T., 2003. **“Solução Analítica para dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária pelo Método GITT”**. Revista Ciência e Natura, p. 83-86.

Buske, D., Costa, C. P., Moreira, D. M., and Vilhena, M.T., 2005. **“Simulação da dispersão de poluentes na CLE pelos métodos GILTT e ADMM”**, IX Congresso Argentino de Meteorologia.

Buligon, L. 2004. **“Solução da equação de advecção-difusão unidimensional transiente para o estudo da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária”**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS.

Carvalho, J.C., 1996. **“Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva”**, Dissertação (Mestrado em Meteorologia), Universidade de São Paulo.

Carvalho, J.C., 1999. **“Estudo dos processos de transporte e difusão na camada limite planetária utilizando os modelos RAMS e SPRAY: Aplicacao ao caso do experimento TRACT”**. Tese de doutorado, IAG-USP.

Cheroto, S.; Mikhailov M.D.; Kakac S. and Cotta, R.M., 1999. **“Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms”**. International Journal of Thermal Sciences. Paris, v.38, p. 613-621.

Chrysikopoulos, C.V., Hildmann, L. M., Roberts, P. V., 1992. “**A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source**”, *Atmos. Environ.*, vol. 26A, pp. 747-757.

Catalano, G.D., 1982. “**An analytical solution to the turbulent diffusion equation with mean vertical wind**”. In. *SOUTHEASTERN SEM. THERMAL. SCI.*, 16, 19-21. 1982. *Proceedings...Miami: [s.e.]*,. p.143-151.

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

Costa, Camila P., 2004. “**Influência de efeitos não locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**”. Dissertação de mestrado. Universidade federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre. p.78.

Costa, Camila P., Moreira, D.M., and Vilhena, M.T., 2005. “**Contaminant dispersion simulation by solving the three-dimensional advection-diffusion equation combining the GILTT and ADMM methods**”, 18th COBEM.

Costa, C.P, Vilhena, M.T., Moreira, D.M. , Tirabassi, T., 2006. “**Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer**”. *Atmospheric Environment* **40**, 5659-5669.

Cotta, R. M.; Pérez, Gerrero, J. S.; Scofano Neto, F., 1992.”**Hybrid solution of the incompressible navier-stokes equations via integral transformation**”. In: *International Conference in Advanced Computational Methods in Heat Transfer*, 2., Southampton. *Proceedings... Southampton: Computational Mechanics Publications*, p. 735-750.

Cotta, R. M., 1993. “**Integral Transforms in computational heat and fluid flow**”. CRC Press, Boca Raton, Florida.

Cotta, R. M., 1994a.”**Benchmark Results in Computational Heat and Fluid Flow: - The integral Transform Method**”. *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 37(1), p. 381-394.

Cotta, R. M., 1994b. “**The integral Transform Method in Computational Heat and Fluid Flow**”, *Proc. Of the 10th Int. Heat Transfer Conf.*, Brighton, UK, vol 1(SK-3), p.43-60.

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

Degrazia, G.A. and Moraes, O., 1992. ”**A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer**”. *Boundary-Layer Meteorology*, vol 58, pp. 91-115.

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

Degrazia, G.A, Velho, H. F. C., Carvalho, J.C.,1997. “**Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties**”, Contributions to Atmosph. Phys., p. 57-64.

Degrazia, G. A., Moreira, D. M. and Vilhena, M.T.M.B., 2001. “**Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically in homogeneous turbulence in a convective boundary layer**”, Journal of Applied Meteorology, p 1233-1240.

Demuth, C.A, 1978. “**Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources**”, Atmos. Environ., v. 12, p. 1255-1258.

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

Gryning, S. E., and Lyck, E., 1984. “**Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations**”. American Meteorological Society 23, 651–660.

Gryning, S. E., Hostslag, A., Irwing, . and Silversten, B., 1987. “**Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. Atmos. Environment**” Atmos. Environment 21 , 79–89.

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

Heinen, I. R., 2005. “**Solução Analítica da Equação da Energia Estacionária e Bidimensional para Simulação de Escoamento Plenamente Desenvolvido em Placa Plana Paralela pelo Método da GILTT**”. Dissertação de Mestrado. Universidade federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Kerrigan, J. F., 1993. ” **Migrating to Fortran 90**”. O’Reilly and Associates, Inc., Sebastopol/CA.

Kock, W., 1989. “**A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption**”, Atmos. Environ., v. 23, p. 1729-1732.

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

Longhetto, A., 1980. “**Atmospheric Planetary Boundary Layer Physics**”. New York, Elsevier.

Machado, H. A.; Cotta, R. M., 1995. “**Integral transform method for the boundary layer equations in simultaneous heat and fluid flow problems**”. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, Bradford, v.5, n.3, 225-237.

Maliska, C.R., 1995.” **Transferencia de Calor e Mecanica dos Fluidos Computacional**”. Editora LTC.

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

Moraes, O. L. L., 2000. “**Turbulence Characteristics in the Surface Boundary Layer over the South American Pampa**”. Kluwer Academic Publishers, Boundary- Layer Meteorology, **96**, 317-335.

Moraes, M.R., Campos Velho, H.F. Ramos, F.M. e Degrazia, G.A., 2001. “**Determination of the vertical turbulent diffusivity using na implicit inversion Technique**”. Revista brasileira de Geofisica.

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

Moreira, D.and Tirabassi, T., 2004. “**M4PUFF: Um modelo matemático não-Gaussiano a puff para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera**”. *Report R1*. Universidade Luterana do Brasil, Canoas. p.27.

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

Moreira, D. M., Ferreira Neto, P.V., and Carvalho, J.C., 2005a. “**Analytical solution of the Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation**”. Environmental Modelling and Software, vol. 20, p. 1159-1165.

Moreira, D. M., Vilhena, M.T., Tirabassi, T. Buske, D. and Cotta, R. M., 2005b. “**Near source atmospheric pollutant dispersion using the new GILTT method**”, Atmospheric Environment, vol. 39, p. 6289-6294.

Moreira, D. M., Vilhena, M.T., 2005. “**Modelagem matemática da dispersão de poluentes atmosféricos: O modelo ADMM**”. Do livro “Tópicos em Turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária”. Editora da UFRGS. P. 119-144.

Monin, A.S. and Obukhov, A.M., 1954. “**Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground**”, Tr. Akad. Nauk, SSSR, Geofiz. Inst., No. 24 (151), p. 1963-1987.

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

Moura, A.B.D., 1999. “**Modelos Multidimensionais Analíticos de Dispersão de contaminantes na Atmosfera: Coeficientes de Difusão Dependentes da Distância da fonte**” Tese de doutorado. Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Nieuwstadt, F.T.M., 1980. “**An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equatiuon in the atmospheric boundary layer**”, Atmos. Environ., v. 14, p. 1361-1364.

Nieuwstadt, F.T.M. and Haan, B.J., 1981. “**An analytical solution of one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation**”, Atmos. Environ., v. 15, p. 845-851.

Nieuwstadt, F.T.M. and Ulden, Van., 1978. “**A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer**”, Atmos. Environ., v. 12, p. 2119-2124.

Özisik, M., 1980. “**Heat Conduction**”. John Wiley & Sons, New York, 2^a edition.

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

Pasquill, F. e Smith, F.B., 1983. “**Atmospheric diffusion**”. New York; John Wiley & Sons.

Pérez Gerrero, J.S.; Cotta, R.M., 1992. “**Integral transform method for the Navier – Stokes equations in stream-function only formulation**”. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, Bradford, v.15, p.399.

Pérez Gerrero, J.S. and Cotta, R.M., 1995. “**Integral transform solution of developing laminar duct flow in Navier-Stokes formulation**”. International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, Bradford, v.20, p.1203.

Pérez Gerrero, J.S. and Cotta, R.M., 1996. “**Benchmark integral transform result for flow over a backward – facing step**”. Computers & Fluids, Oxford, v.25, n.5, p.527-540.

Pimentel, L. C. G. and Cotta, R.M., 1999. “**Fully developed turbulent flow in ducts with symmetric and asymmetric rough walls**”. Chemical Engineering Journal, Lausanne, v. 74, n.147-153.

Pires, C.S., 1996. “**Um estudo analítico da dispersão de poluentes abandonados por fontes áreas em uma camada limite convectiva**”, Dissertação (Mestrado em Sensoriamento Remoto), Centro Estadual de Pesquisas em Sensoriamento Remoto e Meteorologia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Pleim, J.E. and Chang, J. S., 1992. “**A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer**”. Atmospheric Environment, Oxford, v.26, n.6, p.965-981.

Reis, Fabio Gonçalves dos, 2007. <http://www.escolanautica.com.br/fabio.htm>. 2007. Acesso em Junho.

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

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

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

Rounds, W., 1955. "**Solutions of the two-dimensional diffusion equation**", Trans. Am. Geophys. Union, v. 36, p. 395-405.

Santos, C.A.C.S., 1990. Soluções analíticas para a convecção forçada laminar em tubos circulares externamente aletados. Tese (Doutorado). Instituto Tecnológico da Aeronáutica (ITA), São José dos Campos.

Scire, J.S., Strimaitis D.G. and Yamartino, R.J., 2000. "**A user's guide for the CALPUFF dispersion Model (Version 5)**". Earth Tech. Inc. 196 Baker Avenue, Concord, MA 01742.

Scriven, R.A. and Fisher, B.A., 1975. "**The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout-II. The effect of turbulent diffusion**", Atmos. Environ., v. 9, p. 59-65.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T. M. B., 1999. "**The State-of-the-art of the LTSN Method**", **Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications**". International Conference, Madrid, Spain, vol.2, pp. 1618-1631.

Sertori, Marco, 2001. "**Un modello matematico a Puff non-gaussiani per lo studio della dispersione in atmosfera**". Tesi di Laurea. Universita' Degli Studi di Urbino – Facolta' di Scienze Ambientali.

Sharan, M., Singh, M.P. and Yadav, A. K., 1996a. "**A mathematical model for the dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance**", Atmospheric Environment, vol. 30, p. 1137-1145.

Sharan, M., Singh, M.P. and Yadav, A. K. Agarwal, P., and Nigam, S., 1996b. "**A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions**". Atmospheric Environment, vol. 30, p. 1209 – 1220.

Silva, E.F. Da; Pérez Gerrero, J.S.; Cotta, R. M., 1999. "**Integral transform solution of boudary layer equatinas in streamfunction-only formulation**". International Journal of Non-Linear Mechanics, Oxford,v.34, p.51-61.

Smith, F.B., 1957. "**The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere**", J. Fluid Mech., v. 2, p. 49-76.

Souto, M.J., Souto, J.A, Perez-Munuzuri, V., Casares, J.J., Bermudez, J.L., 2001. "**A comparison of operational lagrangian particle and adaptative puff models for plume dispersion forecasting**". Atmospheric Environment, 35, 2349-2360.

Souza, Lúcio Silva, 2004. "**Implementação do modelo de qualidade do ar OCD – Offshore and Coastal Dispersion Model – Para a bacia de Campos – RJ**". Dissertação de mestrado em engenharia. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

Storch, R. and Pimentel, L., 2003. **“Desenvolvimento de um modelo euleriano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos”**. Revista Ciência e Natura, p. 103-106.

Stern, A.C., 1976. **“Air pollution”**. New York: Academic Press.

Stroud, A. H., and Secrest, D., 1966. Gaussian Quadrature Formulas. Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J..

Stull, R. B., 1988. **“Introduction to Boundary Layer Meteorology”**. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht(Olanda).

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

Tirabassi, T., Tagliazucca, M., and Paggi, P., 1989. **“A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer”**, Atmos. Environ., v. 23, p. 857-862.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1992. **“An analytical model for a screen evaluation of the environmental impact from a single point source”**, Il Nuovo Cimento, v. 15C, p. 181-190.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1993. **“An air pollution model for complex terrain”**, In Air Pollution (ed. Zannetti P., Brebbia, C.A., Garcia, J.E. and Ayala Milian, G., pp. 149-156, Proceeding of air Pollution conference, Monterrey, Mexico. Computational Mechanics Pub. (Southampton) and Elsevier (Amsterdam).

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1994. **“Applied dispersion modelling for ground-level concentrations from elevated sources”**. Atmospheric Environment.] Vol. 28, no. 4, pp. 611-615.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1996. **“A non gaussian puff model”**. Il Nuovo Cimento, vol.20c, p.453-459.

Tirabassi, T., 2005. **“Dispersão euleriana na camada limite planetária”**. Do livro “Tópicos em Turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária”. Editora da UFRGS. P. 59-77.

Van Ulden, A.P., 1978. **“Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground”**, Atmos. Environ, v. 12, p. 2125-2129.

Van Ulden A.P.E and Holstlag A.A.M., 1992. **“A surface layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground”**, Atmos. Environ, v. 26A, p. 681-692.

Velloso, M., Barbarioli, A., Guerrero, J. and Pimentel, L., 2003. **“Desenvolvimento de um modelo computacional para o estudo do efeito do mecanismo de deposição sobre a dispersão de poluentes atmosféricos”**. Revista Ciência e Natura, p. 25-28.

Venkatran, A. and Wyngaard, J. C., 1988. **“Lectures on Air Pollution Modeling”**, Amer. Meteor. Society, Boston.

Vilhena, M. T. B.; Rizza, U., Degrazia, G., Mangia, C., Moreira, D., and Tirabassi, T., 1998. **“An analytical air pollution model: Development and evaluation”**, Contrib. Atmos. Phys, vol. 71, pp. 818-827.

Vilhena, M. T. M. B. and Wortmann, Sérgio, 2005. **“Solução analítica de problemas em física-matemática pela transformada de Laplace”**. Tópicos em Turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária. Editora UFRGS.

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

Wortmann, S, Vilhena, M.T.M.; Moreira, D.;and Buske, D., 2005. **“A new analytical approach to simulate the pollutant in the PBL”**. Atmospheric Environment, vol. 39, pp. 2171-2178.

Yeh, G.T. and Huang, C.H., 1975. **“Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere”**, Boun. Layer Meteor, v. 9, p. 381-390.

Zanetti, P., 1990. **“Air Pollution Modeling”**. Comp. Mech. Publications, Southampton (UK).

ANEXO I

Função de Green – Conceitos básicos

Considerando-se uma equação diferencial linear escrita na sua forma geral:

$$L_a(x) u(x) = S \quad (1)$$

onde, $L_a(x)$ é o operador diferencial linear, $u(x)$ é a função que satisfaz à equação diferencial não homogênea (1), com condições de contorno especificadas e $u(x)$ definida em $[a,b]$. $S=f(x)$ é um termo conhecido. Matematicamente, pode-se escrever uma solução para equação (1) como:

$$u(x) = L_a^{-1}(x)f(x) \quad (2)$$

onde L_a^{-1} é o operador inverso do operador diferencial L_a . Como L_a é um operador diferencial linear, seu inverso também é um operador linear.

$$L_a L_a^{-1} = L_a^{-1} L_a = I \quad (3)$$

onde I é o operador *identidade*. Mais especificamente defini-se o operador inverso como:

$$L_a^{-1}(x)f(x) = \int_a^b G(x;x')f(x')dx' \quad (4)$$

onde $G(x;x')$ é a *função de Green* associada ao operador diferencial L_a . $G(x;x')$ é uma função dependente de dois parâmetros: o primeiro x se refere ao efeito; o segundo x' , ao impulso. Para terminar a idéia do operador inverso L_a , introduz-se a função do delta de Dirac $\delta(x)$, cujas propriedades são:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x')f(x')dx' = f(x) \quad (5-a)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x')dx' = 1 \quad (5-b)$$

A função Green $G(x,x')$ satisfaz a equação:

$$L_a(x)G(x,x') = \delta(x-x') \quad (6)$$

A solução à equação (1) pode ser escrita diretamente nos termos da função Green como:

$$u(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x') f(x') dx' \quad (7)$$

Para provar que a equação (7) é uma solução da equação (1), aplica-se o operador L_a a ambos os membros desta equação e considerando-se que é relativo à variável x e é linear, obtém-se:

$$L_a u(x) = L \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x') f(x') dx' \quad (8-a)$$

e

$$L_a u(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} L_a(x) G(x, x') f(x') dx' \quad (8-b)$$

e substituindo-se (6) na equação (8-b) tem-se:

$$L_a u(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x') f(x') dx' \quad (8-c)$$

e, pela propriedade da função Delta de Dirac (5-a), tem-se:

$$L_a u(x) = f(x) \quad (9)$$

demonstrando que a equação (7) é a solução da equação (1), como se queria demonstrar.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)