

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

**MODELOS MULTIDIMENSIONAIS ANALÍTICOS DE DISPERSÃO DE
CONTAMINANTES NA ATMOSFERA: COEFICIENTES DE DIFUSÃO
DEPENDENTES DA DISTÂNCIA DA FONTE**

por

ANGELA BEATRICE DEWES MOURA

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, 30 de Novembro de 1999

ESCOLA DE ENGENHARIA
BIBLIOTECA

**MODELOS MULTIDIMENSIONAIS ANALÍTICOS DE DISPERSÃO DE
CONTAMINANTES NA ATMOSFERA: COEFICIENTES DE DIFUSÃO
DEPENDENTES DA DISTÂNCIA DA FONTE**

por

ANGELA BEATRICE DEWES MOURA

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 Tullio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia

Aprovada por:

Prof. Tiziano Tirabassi, PhD.

Prof. Domenico Anfossi, PhD.

Prof. César Antônio Leal, PhD.

Prof. Dr. Sergio Viçosa Möller
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 30 de Novembro de 1999

AGRADECIMENTOS

Agradeço, de forma especial, aos Professores orientadores Dr. Marco Tullio M. B. de Vilhena e Dr. Gervásio Annes Degrazia, não só pela oportunidade de compartilhar da sua competência e experiência profissional, mas pelos grandes incentivadores e amigos que sempre tem sido.

Aos colegas e amigos do PROMEC pelo auxílio carinho e amizade; em especial, Orenge, Martin, Paulo e Ivanise cujas amizades enriqueceram-me tanto na formação pessoal quanto acadêmica.

Às amigas e companheiras de jornada Alice e Denise, pelo apoio auxílio e amizade.

À CAPES pelo suporte financeiro.

Ao PROMEC, coordenação, corpo docente e funcionários, pelo inestimável apoio.
Ao Roberto, pela colaboração, pelo companheirismo e paciência, mas sobretudo pelo amor.

Ao Marcelo, pela alegria e amor.

Aos meus pais, Léo e Martha, por tudo...desde o princípio.

Ao Criador.

RESUMO

MODELOS MULTIDIMENSIONAIS ANALÍTICOS DE DISPERSÃO DE CONTAMINANTES NA ATMOSFERA: COEFICIENTES DE DIFUSÃO DEPENDENTES DA DISTÂNCIA DA FONTE

Neste trabalho são apresentados modelos de dispersão analíticos de qualidade do ar, baseados nas equações de difusão e advecção estacionárias bidimensional e tridimensional, na geometria cartesiana. Estes modelos são válidos para um contaminante passivo, sujeito a situações de turbulência homogênea e com velocidades do vento médio uniformes, ou seja, para abandonos elevados que ocorrem em condições de estabilidade intermediária e na ausência de fortes empuxos.

As soluções são alcançadas com o uso do método da Transformada Integral Generalizada e são analíticas no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo de sua derivação. A idéia básica do método consiste: elaboração de um par de transformadas pela solução do problema de Sturm-Liouville; aplicação da transformada integral e solução do sistema de equações diferenciais ordinárias resultantes e aplicação da transformada inversa. Simulações numéricas e comparações com resultados disponíveis na literatura são apresentadas. Nestas simulações foram considerados coeficientes de dispersão dependentes da distância da fonte (caso bidimensional e tridimensional) e o valor assintótico do coeficiente de dispersão (caso bidimensional).

Autor: ANGELA BEATRICE DEWES MOURA

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, 30 de Novembro de 1999.

ABSTRACT

ANALYTICAL MULTIDIMENSIONAL DISPERSION MODELS FOR ATMOSPHERIC CONTAMINANTS: EDDY DIFFUSIVITIES DEPENDING ON SOURCE DISTANCE

In this work, analytical dispersion models for air quality are reported. The models are based upon the multidimensional steady-state diffusion-advection equation, in the cartesian geometry. They are valid for a passive contaminant and for physical conditions of homogeneous turbulence and uniform mean wind speed, that means, for elevated contaminant releases that occur in intermediate stability conditions without strong buoyancy. The solutions are obtained using the Generalized Integral Transform Technique; they are analytical in the sense that no approximation is made along their derivation. The main idea consists of the steps: construction of a pair of transformation through the solution of a Sturm-Liouville problem, application of the integral transform and solution of result system of ordinary differential equations followed by the application of the inverse transform. Numerical simulations and comparisons with available results in the literature are presented. In these simulations the dispersion coefficients were assumed to be dependent on the distance of the source (two and three dimensional cases) as well its asymptotic behaviour (two dimensional case).

Autor: ANGELA BEATRICE DEWES MOURA

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, 30 de Novembro de 1999.

RIASSUNTO

MODELLI ANALITICI MULTIDIMENSIONALI DI DISPERSIONE DI CONTAMINANTI IN ATMOSFERA: COEFFICIENTI DI DISPERSIONE DIPENDENTI DALLA DISTANZA DALLA SORGENTE.

In questo lavoro vengono presentati dei modelli di dispersione analitici, per la qualità dell'aria, basati sulle equazioni di diffusione ed avvezione multidimensionali, in geometria Cartesiana. Questi modelli sono validi per un contaminante passivo e per condizioni di turbolenza omogenea e uniforme e velocità del vento uniforme, che equivale ad emissioni a quote elevate che si verificano in condizioni di stabilità intermedia e in assenza di una forte forza di "buoyancy". Le soluzioni sono ottenute con l'uso del metodo della Trasformata Integrale Generalizzata e sono analitiche nel senso che nessuna approssimazione è fatta nella derivazione. L'idea di base del metodo si sviluppa nelle fasi seguenti: costruzione di un paio di trasformate attraverso la soluzione di un problema di Sturm-Liouville; applicazione della trasformata e della soluzione del sistema di equazioni differenziali ordinarie risultanti; applicazione della trasformata inversa. Sono presentati le simulazioni numeriche e i confronti con risultati disponibili in letteratura. In queste simulazioni i coefficienti di dispersione sono stati considerati dipendenti sia dalla distanza dalla sorgente (caso bidimensionale e tridimensionale) sia dal loro valore asintotico (caso tridimensionale).

Autor: ANGELA BEATRICE DEWES MOURA

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, 30 de Novembro de 1999.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão Bibliográfica.....	2
2	MODELOS DE DIFUSÃO	7
2.1	Modelo de Pluma Gaussiano.....	7
2.2	Modelos K	8
3	COEFICIENTES DE DIFUSÃO TURBULENTOS	11
4	SOLUÇÃO BIDIMENSIONAL DA EQ. DE DIFUSÃO ADVECÇÃO ...	16
5	SOLUÇÃO TRIDIMENSIONAL DA EQ. DE DIFUSÃO ADVECÇÃO ..	20
6	RESULTADOS NUMÉRICOS	27
7	CONCLUSÕES:	43
7.1	Sugestões Para Trabalhos Futuros:	44
	ANEXO	45
A	SOLUÇÃO TRIDIMENSIONAL DA EQ. DE DIFUSÃO E ADVECÇÃO: FONTE LINHA	45
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	50

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

- $(fm)_i$ Frequência do pico espectral na estratificação neutra, veja a equação (3.4), página 11
- $(fm)_u$ Frequência do pico espectral referente a velocidade u , veja a equação (3.22), página 15
- $(fm)_v$ Frequência do pico espectral referente a velocidade v , veja a equação (3.22), página 15
- $(fm)_w$ Frequência do pico espectral referente a velocidade w , veja a equação (3.16), página 14
- $(fm^*)_w$ Frequência do pico espectral, veja a equação (3.16), página 14
- c [gm^{-3}] Concentração média de um contaminante passivo, página 2
- c_i Parâmetro de dispersão, veja a equação (3.1), página 11
- $c_y(x, z)$ [gm^{-2}] Concentração média integrada transversalmente ao vento, veja a equação (4.2), página 16
- f Frequência adimensional, veja a equação (3.4), página 11
- $F_i^E(n)$ [m^2s^{-1}] Valor do espectro Euleriano de energia, veja a equação (3.1), página 11
- f_v Função de difusão vertical universal, veja a equação (2.3), página 8
- H [m] Altura de uma camada limite planetária, usado normalmente para camadas limite estáveis, veja a equação (1.2), página 3
- H_s [m] Altura da fonte, veja a equação (4.4), página 17
- i Termo subscrito na eq. indicativo das velocidades u, v, w , veja a equação (3.1), página 11
- K_0 Constante usada por Smith no cálculo do coeficiente de difusão K_z , veja a equação (1.2), página 3
- K_α [m^2s^{-1}] Coeficiente de difusão turbulento genérico onde $\alpha = x, y, z$, veja a equação (3.2), página 11
- K_x [m^2s^{-1}] Coeficiente de difusão turbulento na direção coordenada x , página 2

K_y	$[m^2s^{-1}]$	Coeficiente de difusão turbulento na direção coordenada y , página 2
K_z	$[m^2s^{-1}]$	Coeficiente de difusão turbulento na direção coordenada z , página 2
L	$[m]$	Comprimento de Monin-Obukhov , página 28
n	$[s^{-1}]$	Frequência, veja a equação (3.1), página 11
$N(\beta_m)$		Norma da função β_m , veja a equação (5.19), página 24
$N(\gamma_n)$		Norma da função γ_n , veja a equação (5.19), página 24
q		Função de estabilidade, veja a equação (3.4), página 11
Q	$[gs^{-1}]$	Taxa de emissão do termo fonte, veja a equação (4.4), página 17
R		Termo de remoção de um contaminante passivo, veja a equação (5.1), página 20
S		Termo de fonte de um contaminante passivo, veja a equação (5.1), página 20
$S_i^E(n)$		Espectro de velocidade Euleriano, veja a equação (3.4), página 11
t	$[s]$	Tempo, página 2
Tl	$[s]$	Escala de tempo Lagrangeana , veja a equação (2.3), página 8
U	$[ms^{-1}]$	Velocidade média do vento na direção x , veja a equação (4.1), página 16
u	$[ms^{-1}]$	Componente do vento médio na direção coordenada x , página 2
u_*	$[ms^{-1}]$	Velocidade de fricção, página 4
v	$[ms^{-1}]$	Componente do vento médio na direção coordenada y , página 2
V_g	$[gs^{-1}]$	Velocidade de deposição de um contaminante passivo, veja a equação (1.2), página 4
w	$[ms^{-1}]$	Componente do vento médio na direção coordenada z , página 2
w_*	$[ms^{-1}]$	Escala de velocidade convectiva (veloc. turbulenta na direção vertical) , veja a equação (3.4), página 11
X		Escala de tempo adimensional, veja a equação (3.11), página 13
x	$[m]$	Coordenada cartesiana, página 2
y	$[m]$	Coordenada cartesiana, página 2

z	$[m]$	Coordenada cartesiana, página 2
z_i	$[m]$	Altura da camada limite planetária convectiva , veja a equação (3.4), página 11
z_i/L		Parâmetro de estabilidade , página 28
<i>Letras Gregas</i>		
α		Termo subscrito na eq. indicativo das coordenadas x,y,z , veja a equação (3.1), página 11
α_i		Constante do modelo espectral , página 11
α_u		Constante do modelo espectral , página 11
β_i		Taxa entre as escalas de tempo integral Lagrangeana e Euleriana, veja a equação (3.1), página 11
δ		Função generalizada Delta de Dirac, veja a equação (4.4), página 17
κ		Constante de Von Karmann , veja a equação (3.1), página 11
ψ		Função taxa de dissipação molecular adimensional , veja a equação (3.4), página 11
σ_i^2	$[m^2 s^{-2}]$	Variância da velocidade Euleriana, veja a equação (3.1), página 11
σ_v^2	$[m^2 s^{-2}]$	Variância das flutuações de velocidades verticais turbulentas , veja a equação (2.3), página 8
σ_y^2	$[m^2 s^{-2}]$	Variância, na direção y, associada aos modelos gaussianos , veja a equação (2.3), página 8
ε	$[m^2 s^{-3}]$	Taxa média de amostragem da dissipação da energia cinética turbulenta. , veja a equação (3.4), página 11

ÍNDICE DE FIGURAS

6.1	Os coeficientes de difusão adimensionalizados $(\frac{K_z}{w_* z_i}, \frac{K_y}{w_* z_i}, \frac{K_x}{w_* z_i})$ das equações(3.17, 3.23, 3.24) em função da distância adimensionalizada $X = x w_* / u z_i$	36
6.2	Perfis da concentração integrada c_y como uma função da altura z e da distância adimensionalizada $X = x w_* / u z_i$ para o experimento 1 de Copenhagen (Gryning et al., 1987).....	37
6.3	Perfis verticais da concentração integrada c_y como uma função da altura adimensionalizada z/z_i e da distância adimensionalizada $X = x w_* / u z_i$ para o experimento 1 de Copenhagen (Gryning et al., 1987).	38
6.4	Diagrama de espalhamento entre as concentrações integradas $c_y(x, 0)/Q$, a nível do solo, observadas e simuladas para os experimentos de Copenhagen (Gryning et al., 1987).	39
6.5	Diagrama de espalhamento entre as concentrações $c(x, 0, 0)/Q$ a nível do solo, observadas e simuladas para os experimentos de Copenhagen (Gryning et al., 1987).	40
6.6	Desenho explicativo das figuras (6.7) e (6.8).	40
6.7	Campo de concentração no plano z-y, dados pelas Eq.(5.20, 3.17, 3.23) simulado para o experimento 01 de Copenhagen e distâncias da fonte de 100m (fig A) e 150m (figB) de Copenhagen (Gryning et al., 1987).....	41
6.8	Campo de concentração no plano z-y, dados pelas Eq.(5.20, 3.17, 3.23) simulado para o experimento 01 de Copenhagen e distâncias da fonte de 500m (fig C) e 1000m (figD) de Copenhagen (Gryning et al., 1987).	42

ÍNDICE DE TABELAS

6.1	Condições Meteorológicas dos experimentos de Copenhagen.(Gryning et al., 1987).....	32
6.2	Concentrações integradas $c_y(x, 0)/Q$ observadas e simuladas nas diferentes distâncias da fonte dos experimentos de Copenhagen.....	33
6.3	Concentrações a nível do solo $c(x, 0, 0)/Q$ observadas e simuladas nas diferentes distâncias da fonte dos experimentos de Copenhagen.....	34
6.4	Avaliação estatística dos resultados dos modelos.....	35

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, vem aumentando consideravelmente a preocupação mundial com os problemas ambientais, conseqüentes do rápido desenvolvimento industrial e tecnológico. Com isso as leis que regulamentam a qualidade do ar estão se tornando cada vez mais exigentes. Por outro lado, devido a problemas operacionais e aos grandes custos envolvidos na realização de experimentos de campo, as simulações numéricas e de laboratório são ferramentas importantes no estudo e na compreensão dos processos de dispersão. Por isso são necessários novos modelos que forneçam resultados mais rápidos, reais e precisos, de forma que se possa estimar realisticamente as ações necessárias para manter o ar dentro de padrões adequados.

A modelagem completa da camada limite planetária (CLP) tanto do ponto de vista da meteorologia quanto do estudo da dispersão de contaminantes é um processo extremamente difícil, onde se deve levar em conta os forçantes atuantes, que podem ser: aquecimento solar, resfriamento radiativo, mudanças de fase da água, provocando expansão e concentração de massas de gás, e correntes convectivas, envolvendo também conversões de energia de uma forma para outra.

Segundo o "Workshop: Objectives for Next Generation of Practical Short- Range Atmospheric Dispersion Models" (1992), a busca de soluções analíticas para os problemas de dispersão é atualmente um dos três principais objetivos da pesquisa nesta área. Na investigação da dispersão e do transporte de poluentes na camada limite planetária, as soluções analíticas dos modelos de dispersão atmosférica devem ser capazes de reproduzir os principais padrões das distribuições espaciais de concentrações de poluentes.

A vantagem da solução analítica, afora a possibilidade de controle do erro computacional, consiste na dependência explícita da solução com os parâmetros envolvidos, per-

mitindo desse modo a investigação de suas influências. Além disso soluções analíticas também são usadas para testar e dar confiabilidade a modelos numéricos. Pode-se citar ainda que, atualmente, muitos modelos operacionais de qualidade do ar incorporam soluções analíticas, entre outros, os modelos KAPPAG, KAPPA-LT, CISP e MAOC na Itália [Tirabassi, 1997].

O objetivo deste trabalho consiste na obtenção de soluções analíticas para os problemas de difusão turbulenta bidimensionais e tridimensionais estacionários em uma geometria cartesiana, com controle do erro associado ao método, e na simulação numérica do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera. Para tanto é considerado a emissão de um contaminante passivo a partir de uma fonte pontual contínua elevada, no interior de uma camada limite planetária. Os campos de concentração são reproduzidos com o emprego de coeficientes de difusão turbulentos (ou simplesmente difusividades, como também costumam ser chamados), derivados da teoria de similaridade e da teoria da difusão estatística da turbulência. Os resultados numéricos são comparados com dados observacionais disponíveis na literatura. Neste sentido este trabalho é apresentado com a seguinte organização: Uma visão geral dos modelos eulerianos é mostrada no capítulo 02. No capítulo 03 é descrito de forma detalhada a dedução dos coeficientes de difusão turbulentos, que, neste trabalho, são funções da distância da fonte, como em Sharan et al., 1996b. Segue-se com as demonstrações de obtenção das soluções analíticas bidimensional e tridimensionais nos capítulos 04 e 05 respectivamente. A partir daí, as simulações e comparações com dados experimentais são apresentados no capítulo 06 e as conclusões no capítulo 07.

Para melhor situar o método proposto no contexto dos métodos analíticos de dispersão de contaminantes, disponíveis na literatura, apresenta-se na seção abaixo uma revisão bibliográfica.

1.1 Revisão Bibliográfica

A dispersão de contaminantes passivos em um meio turbulento é normalmente descrita, no caso mais geral, pela seguinte equação da difusão [Monin e Yaglom, 1971; Pasquill, 1974]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + S, \quad (1.1)$$

onde t é o tempo, x , y e z são as coordenadas espaciais, c a concentração média de contaminantes passivos, e u , v e w os componentes do vento médio nas três direções, S é o termo de fonte e K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulentos longitudinal, lateral e vertical, respectivamente. Estes coeficientes de difusão (com seus componentes K_x , K_y , e K_z) modelam a dispersão pela turbulência. A homogeneidade horizontal é normalmente considerada para as variáveis meteorológicas, de forma que a velocidade do vento e o coeficiente K sejam funções somente da altura z , do vento médio em uma só direção; Considera-se ainda o vento vertical médio como zero.

Ainda não é conhecida nenhuma solução exata de (1.1) e abrangente para todos estes parâmetros. Entretanto, com poucas expressões simples para a velocidade do vento e os coeficientes K como funções da altura, uma solução analítica pode ser encontrada. Roberts, 1923, apresentou uma solução bidimensional, somente para fontes superficiais, nos casos em que tanto a velocidade do vento (u) quanto o coeficiente de difusão vertical K_z seguem uma lei de potência como função da altura z , ou seja:

$$u = u_1(z/z_1)^\alpha \quad e \quad K_z = K_1(z/z_1)^\beta,$$

onde z_1 é a altura para a qual u_1 é avaliado.

Rounds, 1955, obteve uma solução bidimensional válida somente para fontes elevadas utilizando o mesmo perfil de vento acima, mas somente para perfis lineares de K_z .

Smith, 1957b, resolveu a equação bidimensional do transporte e da difusão com u e K_z sendo funções de potência da altura com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$). Smith, 1957a, também apresentou uma solução para o caso de u constante, mas com o seguinte K_z :

$$K_z = K_0 Z^a (H - z)^b, \tag{1.2}$$

onde K_0 é uma constante e a e b são valores arbitrários dependentes da altura z dentro de uma Camada Limite Planetária (PBL) de altura H .

Scriven e Fischer, 1975, propõe uma solução com u e K_z constante como:

$$K_z \equiv z \quad \text{para } 0 \leq z \leq z_t,$$

$$K_z \equiv K_z(z_t) \quad \text{para } z_t \leq z \leq H,$$

onde z_t é uma altura pré-determinada (geralmente a altura da Camada Superficial) e H a altura da camada limite. Esta solução tem, como uma condição de contorno, o fluxo bruto de material em direção ao solo:

$$K_z = V_g c,$$

onde V_g é a velocidade de deposição. A solução de Scriven e Fisher foi amplamente utilizada no Reino Unido para o transporte de longa escala de emissão de poluentes.

Yeh e Huang, 1975 apud Tirabassi, 1989, e Berlyand, 1975 apud Tirabassi, 1989, publicaram soluções bidimensionais para fontes elevadas com u e K_z seguindo os perfis de potência, mas para uma atmosfera sem contorno superior (ou seja, $K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$). Soluções estas dadas em termos de funções de Green. Já Demuth, 1978, obteve uma solução, em termos de funções de Bessel, considerando uma camada limite planetária (PBL) limitada verticalmente ($K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$ em $z = H$).

Com a aplicação da teoria da similaridade de Monin-Obukhov para a difusão, van Ulden, 1978, derivou uma solução para a difusão vertical bidimensional para fontes contínuas próximas ao solo, onde supôs que u e K_z seguissem perfis de potência da altura. Seus resultados são similares aos de Roberts, 1923, mas o seu modelo é aplicável a fontes não a nível do solo, mas ainda localizadas dentro da camada superficial atmosférica (CS.).

Nieuwstadt, 1980, apresentou uma solução para o problema unidimensional dependente do tempo e para uma velocidade u constante e K_z como função da altura e da velocidade de fricção u_* , utilizando os polinômios de Legendre, que foi um caso particular de Smith, 1957a, acima citado. Mais adiante, Nieuwstadt e Haan, 1981, estenderam esta solução (dada agora em termos de polinômios de Jacobi) prevendo aí o caso do crescimento da altura da camada limite. Catalano, 1982, por sua vez, estendeu esta solução para o caso de um perfil de vento médio vertical diferente de zero.

Após, Lupini e Tirabassi, 1983, propõe uma solução da equação de difusão-advectação pelo método do momento. Este método utiliza-se de uma fórmula de expansão do tipo de Gram-Charlier para o campo de concentração, e é válido para fontes pontuais e estruturas

de camada limite horizontalmente homogêneas. Tirabassi et al., 1986, e Tirabassi e Rizza, 1995, propõem modelos de dispersão baseados nas soluções de Demuth e de Yeh e Huang, respectivamente, revisadas, mas ainda com difusividades do tipo perfis de potência.

Koch, 1989, chegou a uma solução analítica para o problema bidimensional para uma fonte a nível do solo onde o vento e as difusividades ainda seguem perfis de potência, incluindo efeitos de absorção do contaminante pelo solo. A deposição foi imaginada aí em termos de funções hipergeométricas. Mais tarde Lin e Hildemann, 1997, estenderam as soluções de Yeh e Huang, 1975, e de Berlyand, 1975, para casos com ocorrência de deposição seca no solo. Estas soluções são apresentadas em termos de funções modificadas de Bessel.

Moura et al., 1995, propôs uma solução analítica para a dispersão vertical turbulenta de contaminantes passivos em uma camada limite estável, com aplicação da Transformada de Laplace e fazendo uso também de um coeficiente de difusão como função da altura da camada limite estável [Degrazia e Moraes, 1992]. Nesta solução os contaminantes foram abandonados a partir de uma fonte área instantânea. Foi considerando K_z constante, mas essa hipótese foi contornada aí pela primeira vez, com o seccionamento do domínio em sub regiões de forma a manter a dependência de K_z com a altura z . Por sua vez, Pires, 1996, apresentou uma solução similar, agora para uma camada limite convectiva, e mais tarde Moreira, 1996, ainda para uma camada limite convectiva, propôs a solução para o caso bidimensional estacionário, fazendo uso da mesma técnica dos trabalhos anteriores.

Quanto à soluções tridimensionais, a primeira que se tem conhecimento é a de Chrysikopoulos et al., 1992. Esta solução desenvolvida para uma fonte área contínua a nível do solo, para velocidade do vento u e difusividades do tipo funções de potência da altura e contém também um termo de deposição seca. As funções de Bessel e funções hipergeométricas estão incorporadas à esta solução, sendo a mesma recomendável para condições atmosféricas neutras ou estáveis.

Sharan et al., 1996a, e Sharan et al., 1996b, desenvolveram modelos matemáticos para a dispersão tridimensional atmosférica, usando coeficientes de difusão constantes e parametrizadas em termos da distância da fonte respectivamente. A parametrização turbulenta do segundo trabalho é apresentada em termos de parâmetros "sigmas" calculados ou relações empíricas. Neste mesmo ano Lin e Hildemann, 1996, apresentaram soluções analíticas para problemas de difusão atmosférica tridimensionais também em termos de

funções de Bessel e suas obtenções são alcançadas através de combinações lineares de funções de Green.

Como se pode ver, são muitas as tentativas no intuito de se chegar a uma solução mais abrangente de 1.1 , e espera-se com este trabalho, que mais um passo seja dado nesta direção.

CAPÍTULO 2

MODELOS DE DIFUSÃO

Os modelos de dispersão, que são utilizados na determinação de campos de concentração de poluentes, geralmente fazem uso da equação de difusão e advecção. Dentre os quais destacam-se os modelos Eulerianos, que, genericamente, podem ser divididos em dois grandes grupos: Os modelos de Pluma Gaussianos e os modelos K.

Nos modelos K, os termos turbulentos e desconhecidos da equação de difusão e advecção são fechados pelo emprego da hipótese da transferência do gradiente. Esta parametrização, que constitui um fechamento de primeira ordem, relaciona os fluxos turbulentos com quantidades médias através de um coeficiente de difusão. Estes coeficientes de difusão podem variar no tempo e no espaço, são funções da estrutura turbulenta e dos movimentos convectivos presentes na camada limite. Desta maneira, este esquema fecha o conjunto de equações apenas em um certo nível, pois, ainda se faz necessário a determinação dos coeficientes de difusão.

Conforme citado anteriormente a outra aproximação muito utilizada no cálculo do campo de concentração de contaminantes é conhecida como modelo de pluma Gaussiano. Este modelo é obtido a partir da equação dos modelos K, tomada para grandes tempos, considerando os coeficientes de difusão constantes.

2.1 Modelo de Pluma Gaussiano

A função de distribuição Gaussiana ou Normal fornece uma solução fundamental para a equação de difusão de Fick, e tem sido considerada, por muitos pesquisadores, como um modelo de difusão de contaminantes para fontes contínuas.

A combinação da suposição Gaussiana com a expressão para a média quadrática da difusão de uma partícula (Lyons e Scott, 1990) mostra que, no caso vertical, por exemplo:

$$\sigma_y^2 = 2K_\alpha t, \quad (2.1)$$

$$\sigma_y^2 = \sigma_v^2 t^2, \quad (2.2)$$

ou

$$\sigma_y = \sigma_v f_v(t/Tl), \quad (2.3)$$

onde f_v é uma função de difusão vertical e Tl é a escala de tempo Lagrangeana. Estas equações formam a base da maioria das formulações de difusão de pluma gaussiana (Lyons e Scott, 1990).

Estritamente falando, o modelo de difusão Gaussiano se aplica somente para grandes tempos de difusão e condições estacionárias, homogêneas, para as quais o modelo pode ser estabelecido na forma da simples equação diferencial de Fick (Lyons e Scott, 1990). Ainda assim, a função Gaussiana, como Batchelor, 1949 conjecturou, pode fornecer uma descrição geral de uma pluma de difusão média, devido a natureza essencialmente aleatória deste fenômeno, por analogia com o teorema estatístico do limite central (Lyons e Scott, 1990). Apesar das simplificações na obtenção dos modelos gaussianos, eles foram e são ainda amplamente usados e freqüentemente com bons resultados, mas o seu uso é ainda limitado para outras situações como ventos fracos e condições variáveis de vento.

2.2 Modelos K

A equação resultante, da aplicação da teoria dos modelos K na equação da continuidade é:

$$\frac{dc}{dt} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial c}{\partial x} (K_x \frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{\partial c}{\partial y} (K_y \frac{\partial c}{\partial y}) + \frac{\partial c}{\partial z} (K_z \frac{\partial c}{\partial z}), \quad (2.4)$$

na qual foi considerada a hipótese do transporte de gradiente é válida. Ou seja, como por exemplo para o caso vertical (direção z):

$$\overline{-w'c'} = K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (2.5)$$

onde o primeiro termo é o fluxo turbulento na direção vertical, que é considerado proporcional ao gradiente médio de concentração na mesma direção, e assim por diante para as demais direções. Esses fluxos turbulentos surgem da derivação da equação do transporte de gradiente quando se usa a suposição de que a concentração total é a soma de uma componente média com uma turbulenta ($c = \bar{c} + c'$), advindo daí o aparecimento de termos incógnitos de segunda ordem como $\overline{w'c'}$, $\overline{v'c'}$ na equação da continuidade. Pela hipótese em (2.2), agora o valor médio de c é a única incógnita da equação uma vez que o coeficiente de difusão K_z é considerado conhecido, e por isso esse método é chamado de fechamento de primeira ordem.

É importante ressaltar que certas escalas de tempo estão implícitas na equação da difusão. As componentes do vento médio (u, v, w) e a concentração média representam a média ao longo da escala espacial. As flutuações de velocidade com escalas de tempo e espaço menores que estes valores são consideradas turbulência e estão implicitamente incluídas nos coeficientes de difusão K . Existem algumas objeções teóricas ao uso desta equação; Corrsin (1974) apud Lyons e Scott, 1990, estabeleceu que em uma camada limite simulada em laboratório, as escalas de tempo e comprimento da ação do transporte deveriam ser suficientemente uniformes e pequenas comparadas com as escalas de tempo e comprimento da variação das componentes médias dos gradientes de uma propriedade sujeita a tal transporte. Apesar desta objeção o método fornece bons resultados para a transferência de momentum na camada limite atmosférica (Lyons e Scott, 1990). É muito bem conhecido também, que a equação da difusão turbulenta, considerada pela teoria K , descreve a dispersão de um aditivo passivo de concentração e é estritamente válida para variações pequenas de concentração ao longo da distância comparadas às dimensões dos vórtices dominantes. Assim, por exemplo, não descreve com precisão o comportamento de uma pluma perto da fonte quando os gradientes são grandes. Seu uso em uma camada limite convectiva muito instável é evitado, pois variações rápidas na concentração conduzem a fenômenos interessantes, por exemplo, fluxos em sentido contrário dos gradientes.

A vantagem do modelo K é que condições realísticas (variação tridimensional dos campos de vento e dos coeficientes de difusão) podem ser simuladas. Geralmente, a desvantagem deste modelo reside no fato de que, na maioria das aplicações, ele não assume um aumento de K com o aumento do tempo de viagem da pluma, em virtude do aumento do

tamanho da pluma. Mas devido à flexibilidade do modelo K, isso pode ser superado tendo-se em mente que os coeficientes de difusão K_x , K_y , e K_z podem ser especificados como uma função não somente da estabilidade, mas também da distância da fonte (Sharan et al., 1996b; Arya, 1995; Moura et al., 1999).

A teoria K (modelos K) é bastante empregada como um modelo prático de estimativa de dispersão de contaminantes na atmosfera.

CAPÍTULO 3

COEFICIENTES DE DIFUSÃO TURBULENTOS

Para obter um coeficiente de difusão turbulento genérico K_α , inicia-se com a fórmula para o parâmetro de dispersão σ_α dada por Pasquill e Smith, 1983 (Degrazia e Moraes, 1992):

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \left[\frac{\sin^2(n\pi t / \beta_i)}{n^2} \right] dn , \quad (3.1)$$

com $\alpha = x, y, z$ e $i = u, v, w$, onde $F_i^E(n)$ é o valor do espectro Euleriano de energia, normalizado pela variância da velocidade Euleriana σ_i^2 , β_i é definida como a taxa entre as escalas de tempo integral Lagrangeana e Euleriana, n é a frequência e t o tempo de viagem.

Batchelor, 1949, derivou uma expressão para o coeficiente de difusão turbulento dependente do tempo:

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt} . \quad (3.2)$$

Assim, com estas duas expressões, conforme Degrazia, 1989 e Fiedler, 1968, chega-se a:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin(2n\pi t / \beta_i)}{n} dn . \quad (3.3)$$

A equação para o espectro de velocidade Euleriano sob condições instáveis pode ser expressa conforme Degrazia, 1998, como segue:

$$\frac{n S_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1.06 c_i (f/q) (\psi/q)^{2/3} (z/z_i)^{2/3}}{(fm)_i^{5/3} [1 + (1.5/(fm)_i)(f/q)]^{5/3}} , \quad (3.4)$$

onde $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi\kappa)^{-2/3}$, $\alpha_u = 0.5 \pm 0.05$ e α_i assume os valores de 1, 4/3 e 4/3 para as componentes u, v e w respectivamente (Champagne et al., 1977); $\kappa = 0.4$ é a constante de Von Karmann, $f = (nz)/u$ é a frequência adimensional, z é a altura acima do solo, u é a

velocidade média do vento, $(fm)_i$ é a frequência do pico espectral na estratificação neutra, $q = (fm^*)_i (fm)_i^{-1}$ é uma função de estabilidade, onde $(fm^*)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral em relação a estratificação; z_i é a altura da camada limite instável; w_* é a escala de velocidade convectiva (velocidade turbulenta na direção vertical) e, finalmente, a função taxa de dissipação molecular adimensional é dada por:

$$\psi = \frac{\varepsilon z_i}{w_*} . \quad (3.5)$$

Lembrando que ε é a taxa média de amostragem da dissipação da energia cinética turbulenta.

Os valores de α_i acima são derivados da turbulência isotrópica no subintervalo inercial.

Integrando-se $S_i^E(n)$ em (3.1) ao longo de todo o intervalo de frequência, obtém-se a seguinte variância da velocidade Euleriana:

$$\sigma_i^2 = \frac{1.06}{(fm)_i^{5/3}} \left(\frac{\psi}{q}\right)^{2/3} \frac{z w_*^2}{u q} \int_0^\infty \left[1 + \frac{1.5}{(fm)_i} \frac{n z}{u q}\right]^{-5/3} dn , \quad (3.6)$$

e finalmente

$$\sigma_i^2 = \frac{1.06 c_i}{(fm)_i^{2/3}} \left(\frac{\psi}{q}\right)^{2/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2 , \quad (3.7)$$

$$F_i^E(n) = \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2} = \frac{1}{(fm)_i} \frac{z}{u q} \left[1 + \frac{1.5}{(fm)_i} \frac{f}{q}\right]^{-5/3} . \quad (3.8)$$

Substituindo-se (3.6) em (3.8) e considerando-se $\beta_i = 0.55 u / \sigma_i$ (Corrsin, 1963; Hanna, 1981 e Degrazia e Anfossi, 1998), na expressão (3.3) chega-se a:

$$K_\alpha = \frac{0.09 c_i^{1/2} \psi^{1/3}}{(fm)_i^{4/3} q^{4/3}} \frac{z^{4/3}}{z_i^{1/3}} w_* \int_0^\infty \frac{\sin(an)}{\left[1 + \frac{1.5 n z}{(fm)_i u q}\right]^{5/3}} \frac{dn}{n} , \quad (3.9)$$

onde agora os seguintes termos em (3.3) são:

$$\frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} = \frac{0.09 u c_i^{1/2} w_*}{(fm)_i^{1/3}} \left(\frac{\psi}{q}\right)^{1/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/3}, \quad (3.10)$$

e,

$$\frac{2\pi t}{\beta_i} \equiv a = 11.76 \frac{c_i^{1/2}}{(fm)_i^{1/3}} \left(\frac{\psi}{q}\right)^{1/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{1/3} \frac{z_i}{u} X. \quad (3.11)$$

Onde $X = x w_* / u z_i$ pode ser considerado como uma escala de tempo adimensional, uma vez que ela é dada pela taxa do tempo de viagem (x/u) e dividida pela escala de tempo convectiva (z_i/w_*), não esquecendo que x é a distância dimensional na direção do vento.

Definindo-se agora:

$$n' = bn \quad (3.12)$$

onde

$$b = \frac{1.5 z}{(fm)_i u q}. \quad (3.13)$$

Com isso a equação (3.9) pode ser reescrita como:

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = \frac{0.09 c_i^{1/2} \psi^{1/3} (z/z_i)^{4/3}}{(fm)_i^{4/3} q^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin\left(\frac{a}{b} n'\right) dn'}{[1+n']^{5/3} n'}, \quad (3.14)$$

e, finalmente:

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = \frac{0.09 c_i^{1/2} \psi^{1/3} (z/z_i)^{4/3}}{(fm)_i^{4/3} q^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin\left[\frac{7.84 c_i^{1/2} \psi^{1/3} (fm)_i^{1/3} q^{2/3} n' X}{(z/z_i)^{2/3}}\right]}{[1+n']^{5/3} n'} dn'. \quad (3.15)$$

A equação (3.15), que é a expressão geral para os coeficientes de difusão, contém a função desconhecida ψ que representa a dissipação de energia. Isto significa que a energia de

dissipação é importante para quantificar os parâmetros de dispersão uma vez que a ordem de magnitude de ψ é determinada somente pelas quantidades que caracterizam os grandes vórtices.

Esta equação foi derivada primeiramente por Degrazia et al., 1996, considerando que a forma espectral para velocidades turbulentas fornece uma boa descrição da distribuição da energia cinética turbulenta em uma camada limite convectiva.

Para abandonos elevados foi considerada a turbulência homogênea de forma que o comprimento do pico espectral pode ser escrito como $(\lambda_m)_w = z_i$ de forma a se obter

$$q = \frac{(fm^*)_w}{(fm)_w} = \frac{z}{(\lambda_m)_w 0.35} = 2.86 \frac{z}{z_i} , \quad (3.16)$$

onde $(fm)_w$ é igual a 0.35 (Olesen et al., 1984).

Agora, substituindo-se a expressão (3.16) em (3.15) e usando-se ainda $c_w = 0.36$ e $(fm)_w = 0.35$, pode-se reescrever a expressão (3.15) como:

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.054 \psi^{1/3} \int_0^{\infty} \frac{\sin[4.71 \psi^{1/3} X n']}{[1 + n']^{5/3} n'} dn' . \quad (3.17)$$

E a equação (3.17) representa o coeficiente de difusão vertical dependente da distância da fonte, usada no presente trabalho.

O comportamento assintótico da equação (3.3) para grandes tempos de viagem ($t \rightarrow \infty$), quando o coeficiente de difusão perde a memória das condições iniciais é (Degrazia et al., 1996):

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(0)}{4} . \quad (3.18)$$

Juntando-se a expressão acima com a de $\beta_i = 0.55(u/\sigma_i)$ e as Eqs (3.6) e (3.8) chega-se a:

$$K_\alpha = \frac{0.55}{4} \frac{\sigma_i z}{(fm)_i q} . \quad (3.19)$$

Finalmente de (3.16) para o coeficiente de difusão vertical chega-se a :

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 0.085 \psi^{1/3} \quad (3.20)$$

A equação (3.20) é o coeficiente de difusão vertical independente da distância da fonte, usada neste trabalho.

Para as demais direções procede-se de maneira análoga, levando-se em consideração os seguintes fatores:

$$(\lambda_m)_{u,v} = 1.5 z_i \quad , \quad (3.21)$$

$$(fm^*)_{u,v} = \frac{z}{(\lambda_m)_{u,v}} = \frac{z}{1.5 z_i} \quad , \quad (3.22)$$

$$c_y = 0.36 \quad \text{e} \quad c_x = 0.27 \quad .$$

E partindo-se da expressão (3.15) chega-se às seguintes expressões para os coeficientes de difusão longitudinal e transversal que são consideradas nesse trabalho na solução da equação de difusão e advecção:

$$\frac{K_y}{w_* z_i} = 0.093 \psi^{1/3} \int_0^{\infty} \frac{\sin[3.59 \psi^{1/3} X n']}{[1 + n']^{5/3} n'} dn' \quad , \quad (3.23)$$

$$\frac{K_x}{w_* z_i} = 0.0804 \psi^{1/3} \int_0^{\infty} \frac{\sin[3.11 \psi^{1/3} X n']}{[1 + n']^{5/3} n'} dn' \quad . \quad (3.24)$$

CAPÍTULO 4

SOLUÇÃO BIDIMENSIONAL DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ADVECÇÃO

O estudo do transporte e dispersão de poluentes na atmosfera é freqüentemente descrito pela equação de difusão e advecção, obtida da equação da continuidade, através da parametrização dos fluxos turbulentos de concentração empregando-se o modelo do transporte do gradiente ou teoria K (Moura et al., 1999).

Para um sistema de coordenadas cartesianas na qual a direção x coincide com a direção do vento médio, a equação de difusão estacionária pode ser escrita como (Arya, 1995):

$$U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad , \quad (4.1)$$

onde c denota a concentração média do contaminante passivo, U é a velocidade média do vento na direção x e K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulentos nas direções x , y e z respectivamente (Pasquill e Smith, 1983; Seinfeld, 1986).

Desprezando-se o termo da difusão longitudinal em relação ao termo da advecção do vento nesta direção (ou seja, supõe-se que a velocidade média do vento é muito maior que a velocidade turbulenta nesta direção). Considera-se ainda um coeficiente de difusão turbulento vertical K_z (deduzido no capítulo anterior), dependente da distância longitudinal a juzante da fonte, x , e procedendo-se a integração transversal ao vento da equação (4.1) chega-se ao problema bidimensional :

$$U \frac{\partial c_y(x, z)}{\partial x} = K_z(x) \frac{\partial^2 c_y(x, z)}{\partial z^2} \quad c_y(x, z); \quad 0 < z < z_i; \quad 0 < x < \infty \quad , \quad (4.2)$$

onde $c_y(x, z)$ representa a concentração média integrada transversalmente ao vento e z_i a altura da camada limite planetária convectiva.

As condições de contorno do problema são de fluxo zero na superfície do solo e no topo da camada limite, e sujeita a uma fonte com taxa de emissão Q localizada a uma altura H_s , que são respectivamente:

$$K_z(x) \frac{\partial c_y(x, z)}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0, z_i \quad , \quad (4.3)$$

$$U c_y(0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad . \quad (4.4)$$

Aqui δ representa a função generalizada delta de Dirac.

Seguindo-se a idéia do método da Transformada Integral Generalizada (Cotta e Mikhaylov, 1997), a solução do problema (Eqs.4.2, 4.3, 4.4) pode ser escrita como:

$$c_y(x, z) = \sum_{n=0}^N A_n(x) Z_n(z) \quad . \quad (4.5)$$

Ou seja, a solução do problema da concentração integrada $c_y(x, z)$ é suposta como um somatório do produto de duas funções ($A_n(x)$ e $Z_n(z)$), dependentes agora de x e z respectivamente. Cumpre observar que as funções $Z_n(z)$ são obtidas resolvendo o seguinte problema de Sturm-Liouville:

$$\frac{d^2 Z_n(z, \beta_n)}{dz^2} + \beta_n^2 Z_n(z, \beta_n) = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad (4.6)$$

$$\frac{d Z_n(z, \beta_n)}{dz} = 0 \quad \text{em } z = 0 \quad , \quad (4.7)$$

$$\frac{d Z_n(z, \beta_n)}{dz} = 0 \quad \text{em } z = z_i \quad , \quad (4.8)$$

onde \mathbb{N} é o conjunto dos números naturais. A solução do problema de Sturm-Liouville é conhecida (Özsisik, 1980). Aqui, os autovalores β_n e as autofunções $Z(z, \beta_n)$ foram tomados da tabela 2.4 de Özsisik, 1980, e para as condições de contorno citadas são:

$$Z_n(z, \beta_n) = \cos(\beta_n z) \quad , \quad (4.9)$$

onde, os autovalores β_n , são as raízes positivas de $\sin(\beta_n z_i) = 0$.

Determina-se neste ponto, a função desconhecida $A_n(x)$, que satisfaça ao problema, substituindo-se a equação (4.5) na equação (4.2) e tendo em mente que as autofunções $Z_n(z)$ constituem um conjunto de funções linearmente independentes, obtendo-se :

$$U \frac{d A_n}{d x} = -\beta_n^2 K_z(x) A_n(x) \quad , \quad (4.10)$$

para $n \in \mathbb{N}$, onde \mathbb{N} denota o conjunto dos números naturais. A solução da equação (4.10) também é conhecida (Boyce e Prima, 1965) e tem a seguinte forma:

$$A_n(x) = a_n \exp\left(\frac{\beta_n^2}{U} \int K_z(x) dx\right) \quad , \quad \forall n \in \mathbb{N} . \quad (4.11)$$

Neste ponto, pode-se concluir que a suposição feita na Eq.4.5 estava correta, uma vez que as funções $A_n(x)$ foram determinadas unicamente, com exceção da constante arbitrária a_n , que será obtida a seguir em função da condição em $x = 0$. Para tal, substitui-se a Eq (4.11) na Eq (4.5), e a solução do problema toma a seguinte forma:

$$c_y(x, z) = \sum_{n=0}^N a_n Z_n(z, \beta_n) \exp\left(\frac{\beta_n^2}{U} \int K_z(x) dx\right) \quad (4.12)$$

E finalmente, com a aplicação da condição de contorno (4.4) e fazendo-se uso da propriedade da ortogonalidade das autofunções $Z_n(z, \beta_n)$, determinam-se os coeficientes arbitrários a_n :

$$a_n = \frac{Q Z_n(H_s)}{N(\beta_n)} . \quad (4.13)$$

Com isso, a solução do problema(4.2) está totalmente determinada, ou seja:

$$c_y(x, z) = \frac{Q}{z_i} + \frac{2Q}{z_i} \sum_{n=1}^N \cos(\beta_n H_s) \cos(\beta_n z) \exp\left(-\frac{\beta_n^2}{U} \int_0^x K_z(\zeta) d\zeta\right) . \quad (4.14)$$

Cabe, neste ponto, ressaltar algumas considerações:

A solução analítica (4.14) para o problema bidimensional é válida para turbulência homogênea quando a velocidade média do vento é uniforme, tipicamente para abandonos elevados, onde a estrutura de turbulência vertical pode ser idealizada como próxima à homogênea.

A equação (4.14) é analítica no sentido em que nenhuma aproximação foi feita ao longo de sua derivação. E é também válida para qualquer perfil de U , seja ele constante ou uma função dependente da altura .

O coeficiente de difusão vertical K_z , dependente da distância da fonte e cuja dedução foi mostrada no capítulo anterior, usado aqui é o seguinte:

$$K_z(x) = 0.054 \psi^{1/3} w_* z_i \int_0^\infty \frac{\sin[4.71 \psi^{1/3} X n']}{n' (1 + n')^{5/3}} dn'. \quad (3.17)$$

onde w_* é a escala de velocidade convectiva, $\psi = (\varepsilon z_i) / (w_*)^3$ é a função taxa de dissipação molecular, e $X = (x w_*) / (U/z_i)$, pode ser definido como um tempo adimensional uma vez que é a taxa do tempo de viagem x/U pela escala de tempo convectiva z_i/w_* , n' é uma frequência adimensional e ε é a taxa média da dissipação da energia cinética turbulenta.

Os resultados das simulações numéricas com a formulação apresentada e a comparação com resultados experimentais disponíveis na literatura são apresentadas no capítulo 6.

CAPÍTULO 5

SOLUÇÃO TRIDIMENSIONAL DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ADVECÇÃO

A equação da difusão atmosférica, considerando-se um fluido incompressível e a teoria do transporte de gradiente, em um sistema de coordenadas retangulares tem a forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + S + R. \quad (5.1)$$

onde c é a concentração média de um poluente; S e R são os termos de fonte e remoção, respectivamente; u, v, w e K_x, K_y, K_z são as componentes da velocidade do vento e as difusividades nas direções ortogonais x, y, z respectivamente, em um referencial Euleriano.

As seguintes hipóteses simplificativas são feitas:

- a) condições são consideradas estacionárias, i.e. $\partial c / \partial t = 0$.
- b) A magnitude da componente da velocidade vertical é muito menor que a da horizontal, assim o termo $w \frac{\partial c}{\partial z}$ pode ser negligenciado.
- c) o eixo x está orientado na direção do vento médio ($u = U$ e $v = 0$).
- d) A remoção (física/química) dos poluentes é ignorada de forma que $R = 0$

Desta forma a equação acima se reduz a :

$$U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + S. \quad (5.2)$$

Esta equação forma a base da maioria dos modelos de qualidade do ar (Sharan et al., 1996a). A natureza da solução desta equação depende da especificação de U , K e S . Normalmente U é considerado constante (Smith, 1957b, Nieuwstadt, 1980), ou mais realisticamente, como uma função de potência dependente altura z (Pasquill e Smith, 1983). Da

mesma forma as difusividades K são também assumidas constantes (Roberts, 1923; Sharan et al., 1996a,b), funções de potência da altura z ou tomadas como funções de coordenadas espaciais (Berkowics e Prahm, 1979; Tirabassi et al., 1987; Bartzis, 1989). Baseando-se na localização da fonte com respeito ao sistema de coordenadas usada, pode-se ainda especificar uma forma explícita para S .

Nesse trabalho, para a dedução da solução analítica, U será tomado como uma função qualquer da altura z e as difusividades são especificadas como funções da distância da fonte, já deduzidas em capítulo anterior (capítulo 3). Explicitando a dependência da concentração média c com a posição tridimensional e formulamos as hipóteses adicionais:

- e) a magnitude da componente de difusão longitudinal é muito menor que a componente de advecção na mesma direção, ou seja $|\frac{\partial}{\partial x}(K_x \frac{\partial c}{\partial x})| \ll |U \frac{\partial c}{\partial x}|$, e pode ser negligenciado,
 f) o termo referente a fonte elevada será considerado nas condições de contorno, o problema tridimensional estacionário pode ser reescrito da seguinte forma:

$$U \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} = K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2} + K_y(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2}. \quad (5.3)$$

Sujeito às condições de contorno do tipo:

- 1) Os poluentes não são absorvidos no solo e nem no topo da camada limite, e por isso não há fluxo de difusão nestes pontos:

$$\frac{\partial c(x, y, z)}{\partial z} = 0 \quad z = 0, z_i. \quad (5.4)$$

- 2) A fonte pontual elevada é assumida estar na origem dos eixos coordenados (x, y) e a uma altura H_s .

$$U \frac{c(x, y, z)}{Q} = \delta(z - H_s) \delta(y - y_0) \quad x = 0. \quad (5.5)$$

- 3) A concentração dos poluentes é considerada nula para distâncias suficientemente grandes da fonte, $\pm b$, onde esta condição é satisfeita:

$$c(x, y, z) = 0 \quad y = \pm b. \quad (5.6)$$

Observe-se que a equação acima expressa a condição imposta na direção y . Em outros trabalhos (Sharan et al., 1996a) a concentração é suposta tendendo a zero a medida que y também tende a infinito, e por isso, na prática b deve ser suficientemente grande para que esta condição seja satisfeita.

Para a solução do problema dado pela Eq.(5.3), pelo método da Transformada Integral Generalizada (Cotta e Mikhaylov, 1997) supõe-se que a solução do problema tridimensional é descrita como uma série dupla com a seguinte forma:

$$c(x, y, z) = \sum_m \sum_n \phi_{n,m}(\varphi_{n,m}, x) \cdot Y_n(\gamma_n, y) \cdot Z_m(\beta_m, z), \quad (5.7)$$

onde as funções $Y_n(\gamma_n, y)$ e $Z_m(\beta_m, z)$ são obtidas da solução de problemas de Sturm-Liouville. Assim sendo, $Z_m(\beta_m, z)$ é solução do problema:

$$\frac{d^2 Z_m(\beta_m, z)}{dz^2} + \beta_m^2 Z_m(\beta_m, z) = 0 \quad , \quad (5.8)$$

sujeito às condições de contorno:

$$\frac{dZ_m(\beta_m, z)}{dz} = 0 \quad z = 0, z_i \quad , \quad (5.9)$$

cuja solução é conhecida e dada por:

$$Z_m(\beta_m, z) = \cos(\beta_m \cdot z) \quad , \quad (5.10)$$

onde as autofunções $Z_m(\beta_m, z)$ e os autovalores β_m , que são as raízes positivas de $\sin(\beta_m \cdot z_i) = 0$, foram tomados da tabela 2.4 de Özisik, 1980.

Por outro lado, $Y_n(\gamma_n, y)$ resulta da solução de:

$$\frac{\partial^2 Y_n(\gamma_n, y)}{\partial y^2} + \gamma_n^2 \cdot Y_n(\gamma_n, y) = 0 \quad \forall y \in [-b, +b] \quad , \quad (5.11)$$

$$Y_n(\gamma_n, y) = 0 \quad y = \pm b \quad , \quad (5.12)$$

que devido à simetria em y pode ser simplificado como o problema abaixo:

$$\frac{\partial^2 Y_n(\gamma_n, y)}{\partial y^2} + \gamma_n^2 \cdot Y_n(\gamma_n, y) = 0 \quad \forall y \in [0, b], \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial Y_n(\gamma_n, y)}{\partial y} = 0 \quad y = 0, \quad (5.14)$$

$$Y_n(\gamma_n, y) = 0 \quad y = b. \quad (5.15)$$

Cuja solução também é conhecida (Özisik, 1980) e descrita por:

$$Y_n(\gamma_n, y) = \cos(\gamma_n \cdot y). \quad (5.16)$$

E, γ_n são raízes positivas de $\cos(\gamma_n \cdot b) = 0$.

Substituindo-se as soluções (5.10) e (5.16) na equação (5.7) e observando que as funções $Y_n(\gamma_n, y)$ e $Z_m(\beta_m, z)$ constituem um conjunto de funções independentes, obtém-se a seguinte equação diferencial para $\phi_{n,m}(x)$:

$$\frac{\partial \phi_{n,m}(x)}{\partial x} + \frac{\beta_m^2 K_z(x) + \gamma_n^2 K_y(x)}{U} \cdot \phi_{n,m}(x) = 0 \quad \forall n, m \in \mathbb{N}. \quad (5.17)$$

Cuja solução (Boyce e Prima, 1965) é apresentada abaixo:

$$\phi_{n,m}(x) = \varphi_{n,m} e^{-\int_0^x \frac{\beta_m^2 K_z(x) + \gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx} \quad \forall n, m \in \mathbb{N}. \quad (5.18)$$

Neste ponto confirma-se estar correta a suposição de solução inicial Eq.(5.7), pois a função $\phi_{n,m}(x)$ foi unicamente determinada, embora $\varphi_{n,m}$ ainda seja desconhecida. Para determiná-la aplica-se as condições de contorno em $x = 0$ na Eq.(5.7) e se faz uso das propriedades de ortogonalidade das funções $Z_m(z, \beta_m)$ e $Y_n(\gamma_n, y)$, chegando-se a seguinte expressão para $\varphi_{n,m}$:

$$\varphi_{n,m} = \frac{Q Z_m(H_s) Y_n(y_0)}{N(\beta_m) N(\gamma_n)}, \quad (5.19)$$

onde $N(\beta_m)$ $N(\gamma_n)$ são, respectivamente, as normas de β_m e γ_n .

E, finalmente, com todos os termos incógnitos conhecidos pode-se proceder a construção da solução final do problema descrito a partir de (5.3), que é:

$$c(x, y, z) = \frac{2Q}{z_i bU} \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \cos(\beta_m \cdot H_s) \cdot \cos(\beta_m \cdot z) \cdot \cos(\gamma_n \cdot y_0) \cdot \cos(\gamma_n \cdot y) \cdot e^{-\int_0^z \frac{\beta_m^2 K_z(x) + \gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx} + \frac{Q}{z_i bU} \sum_{n=1}^N \cos(\beta_0 \cdot z) \cdot \cos(\gamma_n \cdot y) \cdot e^{-\int_0^z \frac{\gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx}. \quad (5.20)$$

Neste ponto deve-se ressaltar o fato de que a solução obtida desta forma admite um perfil de U , não só constante mas também como função da altura. A solução acima é válida para qualquer perfil assumido de difusividade dependente da distância da fonte. Além disso, a solução apresentada permite a vantagem adicional de se poder calcular o erro inerente ao método, ou seja, o erro relativo ao truncamento do somatório. A solução analítica (Eq.5.20) para o problema tridimensional é válida para abandonos elevados, onde a estrutura de turbulência vertical pode ser idealizada como próxima à homogênea.

Cabe lembrar ainda as expressões de $K_z(x)$ e $K_y(x)$, deduzidas no capítulo 3:

$$K_z(x) = 0.09 \cdot c^{1/2} \psi^{1/3} \cdot w_* z_i \int_0^\infty \frac{\sin(7.84 c^{1/2} \psi^{1/3} X n')}{(1 + n')^{5/3} n'} dn', \quad (3.17)$$

$$K_y(x) = 0.1546 \cdot c^{1/2} \psi^{1/3} \cdot w_* z_i \int_0^\infty \frac{\sin(5.98 c^{1/2} \psi^{1/3} X n')}{(1 + n')^{5/3} n'} dn'. \quad (3.23)$$

E desta forma mostrou-se a obtenção da solução tridimensional para o problema de advecção e difusão atmosférica descrito nas equações (5.3) a (5.6).

Uma outra solução para este mesmo problema também foi desenvolvida, com a suposição agora de condições de contorno em y diferentes e conseqüentemente, um problema auxiliar na variável y também diferente. Isto é, continua-se a admitir a simetria em y , uma

máxima no ponto central nesta mesma coordenada, e além disto, como a medida que y tende a infinito, a concentração tende a zero, e isso geraria uma ausência de fluxo também neste ponto. Este problema, na variável y , é então definido como o problema de Sturm-Liouville mostrado abaixo:

$$\frac{\partial^2 Y_n(\gamma_n, y)}{\partial y^2} + \gamma_n^2 \cdot Y_n(\gamma_n, y) = 0 \quad \forall y \in [0, b], \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial Y_n(\gamma_n, y)}{\partial y} = 0 \quad y = 0, b \quad (5.22)$$

e que também tem uma solução bem conhecida, que é:

$$Y_n(\gamma_n, y) = \cos(\gamma_n \cdot y). \quad (5.23)$$

Neste caso, γ_n são raízes positivas de $\sin(\gamma_n \cdot b) = 0$, (Özisik, 1980).

A partir daí, o procedimento para se alcançar a nova solução é idêntico ao anteriormente feito: determina-se o problema auxiliar $\phi_{n,m}(x)$, e com as condições de contorno e aplicando-se a propriedades de ortogonalidade das funções $Z_m(z, \beta_m)$ e $Y_n(\gamma_n, y)$, $\varphi_{n,m}$ é alcançada. Por fim a solução para este novo problema é:

$$\begin{aligned} c(x, y, z) = & \frac{Q}{z_i bU} \quad (5.24) \\ & + \frac{4Q}{z_i bU} \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \cos(\beta_m \cdot z f) \cdot \cos(\beta_m \cdot z) \cdot \cos(\gamma_n \cdot y) \cdot e^{-\int_0^z \frac{\beta_m^2 K_z(x) + \gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx} \\ & + \frac{2Q}{z_i bU} \sum_{n=1}^N \cos(\gamma_n \cdot y) \cdot e^{-\int_0^z \frac{\gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx} \\ & + \frac{2Q}{z_i bU} \sum_{m=1}^N \cos(\beta_m \cdot H_s) \cdot \cos(\beta_m \cdot z) \cdot e^{-\int_0^z \frac{\beta_m^2 K_z(x)}{U} dx}. \end{aligned}$$

E assim chega-se a nova solução para o problema tridimensional da equação de difusão e advecção atmosférica.

Neste ponto, cumpre ainda ressaltar que a convergência das soluções bi e tridimensionais apresentadas para a concentração de poluentes é baseada no estudo da convergência

da série de Fourier, devendo, portanto, satisfazer as condições de convergência da mesma, uma vez que essas soluções consistem, respectivamente, em séries simples e dupla de Fourier.

No capítulo seguinte, mostram-se os resultados das simulações destas soluções. Além disto no apêndice I é mostrado também uma solução para uma nova variante do problema tridimensional, que é deduzido para uma fonte linha, ao invés de uma fonte pontual.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos e a validação com resultados experimentais. O desempenho dos modelos bidimensional (Eq.4.14) e tridimensional (Eq.5.20, e 5.24) foi avaliado com os dados experimentais de concentrações a nível do solo. Estes experimentos de dispersão foram realizados ao norte de Copenhagen, onde foi usado como traçador o SF₆, e são descritos em Gryning et al., 1987. O traçador foi abandonado, sem empuxo, a partir de uma torre com altura de 115m, e coletados em posições a nível do solo em unidades de amostragem localizadas em três arcos transversais. Neste experimento a liberação do SF₆ ocorre a níveis de concentração muito pequenos de forma que o peso molecular da mistura liberada é próximo ao peso molecular do ar e assim os efeitos gravitacionais sobre o traçador podem ser desconsiderados. As unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância de 2 a 6 Km a partir do ponto de abandono. Os abandonos do traçador iniciavam tipicamente 1h após o início da amostragem e terminavam no final do período de amostragem; o tempo de amostragem média foi de 1h. O local era principalmente residencial com um comprimento de rugosidade de 0.6m.

A tabela (6.1) mostra os dados referentes às condições meteorológicas deste conjunto experimental (Gryning e Lyck, 1984, Gryning et al., 1987), utilizados para a validação dos modelos propostos. Os dados meteorológicos foram, igualmente, coletados próximo ao solo, e desta forma pode ser feita a comparação com valores fornecidos pelos modelos. O conjunto de dados de Copenhagen foi escolhido porque a maioria destes experimentos ocorreram sob condições de estabilidade intermediária, e sem grande empuxo, de forma que a concentração integrada transversalmente e a concentração tridimensional podem ser simuladas pela equação de difusão e advecção. Por outro lado, neste conjunto de dados experimental os abandonos, (digno de nota aqui, que a expressão abandono é usada para evidenciar que

a emissão é realizada sem empuxo), foram realizados a partir de uma fonte elevada, que é escopo do modelo proposto neste trabalho.

O parâmetro de estabilidade z_i/L , onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, indica casos onde a camada limite atmosférica instável apresenta convecção de fraca a moderada. As equações (3.23) e (3.17) contém a função desconhecida ψ . Essa dissipação média de energia é importante para quantificar os parâmetros de dispersão uma vez que a ordem de magnitude da dissipação média da energia, por unidade de tempo, por unidade de massa de fluido, ε , é determinada somente pelas quantidades que caracterizam os grandes turbilhões. Por isso, para abandonos elevados em uma camada limite instável, ε é descrita em termos de w_* e z_i que são as escalas de velocidade e comprimento dos turbilhões mais energéticos, respectivamente. Observações e simulações numéricas nas regiões centrais de uma camada limite atmosférica instável mostram que $\psi \simeq 0.4$ (Moeng e Wyngaard, 1989 ; Schmidt e Schumann, 1989; Caughey, 1982). Apesar disso, muitos experimentos em camadas limites atmosféricas instáveis (Kaimal et al., 1976; Caughey e Palmer, 1979; Druilhet et al., 1983; Guillemet et al., 1983) enfatizam que para alturas adimensionais na faixa de $0.05 < z/z_i < 0.3$ os valores de ψ são muito maiores que 0.4.

De acordo com Druilhet et al., 1983, o perfil de ψ pode ser aproximado pela lei exponencial

$$\psi = 1.26 \exp\left[-\frac{z}{0.8 z_i}\right], \quad 0 < -z/z_i < 0.8 . \quad (6.1)$$

Por outro lado, baseado nos dados experimentais de Minnesota e Aschurch (Caughey, 1982), a função de dissipação ψ pode ser descrita como segue (Luhar e Britter, 1989):

$$\psi = 1.5 - 1.2(z/z_i)^{1/3} . \quad (6.2)$$

Finalmente, Guillemet et al., 1983, sugerem a seguinte curva de ajuste para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta:

$$\psi = [0.55 + 0.05(z/z_i)^{-2/3}]^{3/2} , \quad 0.03 < z/z_i < 0.3 . \quad (6.3)$$

Considerando a altura adimensional da fonte (H_s/z_i) de Copenhagen (Tabela 6.1), é possível selecionar para H_s/z_i uma média igual a 0.11. Agora, calculando ψ das equações (6.1), (6.2) e (6.1) para esta altura média adimensional de fonte chega-se a um valor médio de $\psi^{1/3}$ igual a 0.97.

O comportamento dos coeficientes de difusão nas três direções ortogonais, dadas pela Eqs.(3.24, 3.23, 3.17), é apresentado na figura (6.1).

Se observa da figura (6.1) e das tabelas (6.2 e 6.3), que, para várias distâncias X do experimento de Copenhagen, o valor assintótico de K_z (Eq. 3.20) não é alcançado. Como consequência, a Eq. (3.17) representa uma fórmula apropriada para descrever a dispersão nos campos próximos e intermediários de uma fonte elevada.

Como um teste para o modelo dado pela Eq. (4.14), no caso bidimensional, onde se calcula a concentração integrada transversal a nível do solo c_y e também para analisar a influência do efeito de memória no transporte turbulento, a parametrização Eq. (3.17), e seu limite assintótico Eq. (3.20), com $\psi^{1/3} = 0.97$, foram usados para simular as concentrações de Copenhagen. Da mesma forma para o caso tridimensional que é fornecido pelas equações (5.20), (5.24), com as parametrizações (3.17), (3.23).

Nas tabelas (6.2) e (6.3) estão apresentadas as concentrações experimentais medidas conjuntamente com as calculadas pelos modelos para os casos bi e tridimensional respectivamente.

As simulações foram feitas com auxílio do software Mathcad 5.0 (Mathsoft Inc.) em um equipamento AMD-K6, 32 Mb RAM. Para estas simulações U foi tomado constante, embora as soluções admitam uma variação do mesmo com a altura. O tempo médio para cada simulação foi inferior a 10s. Todos os resultados apresentados tem uma precisão de 10 dígitos significativos. O número de termos considerados nos somatórios das soluções, para garantir essa precisão, foi de $N = 100$ termos para o caso bidimensional e $M = 200$ e $N = 400$ para o caso tridimensional. O valor do parâmetro b usado, escolhido de forma a que a condição de contorno de concentração nula na fronteira se verificasse em todos os experimentos simulados, é de 2000 m.

Analisando as tabelas (6.2) e (6.3) pode-se ver que os resultados descrevem muito bem a dispersão ocorrida nestes experimentos. Além do mais, com relação à mudança nas condições de contorno no problema tridimensional, que deu origem às duas soluções simuladas

neste trabalho, não foi verificada nenhuma alteração significativa de desempenho. As duas apresentaram índices estatísticos muito próximos.

Nestes conjuntos de dados simulados e experimentais, foram aplicados ainda os índices estatísticos abaixo (Hanna, 1989). Estes índices estatísticos são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental Americana (USEPA), pela Força Aérea Americana (US Air Force), pelo Instituto Americano do Petróleo (API) bem como pela comunidade científica após o Workshop "Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assesments in Europa, realizado em Mol, Bélgica em 1994.

Nas expressões abaixo o subscrito 0 e p se referem a quantidades observadas e previstas (simuladas), e a barra sobreposta indica uma média:

$$\text{nmse (normalized mean square error)} = \frac{\overline{(c_0 - c_p)^2}}{\overline{c_0 c_p}},$$

que fornece informações sobre todos os desvios entre concentrações observadas e as previstas pelo modelo(simuladas). É uma estatística adimensional e seu valor deve ser tão pequeno quanto possível para um bom modelo.

$$\text{cor (correlation)} = \frac{\overline{(c_0 - \bar{c}_0)(c_p - \bar{c}_p)}}{\sigma_0 \sigma_p},$$

onde, σ_0 e σ_p são os desvios padrões das concentrações observadas e simuladas, respectivamente. Seu valor situa-se entre 0 e 1 e para um bom desempenho seu valor deve estar próximo à unidade.

$$\text{fb (fractional bias)} = \frac{\bar{c}_0 - \bar{c}_p}{0.5(\bar{c}_0 + \bar{c}_p)}.$$

Um bom modelo deve ter um valor de fb próximo a zero (Sharan e Yadav, 1998).

$$\text{fs (fractional standard deviation)} = 2 \frac{\sigma_0 - \sigma_p}{\sigma_0 + \sigma_p},$$

onde, σ_0 e σ_p são os desvios padrões das concentrações observadas e simuladas, respectivamente. Seus valores variam de -2 a +2 com valor ideal zero.

fa2 = fração de dados para os quais $0.5 \leq c_p/c_0 \leq 2c$.

O resultado da aplicação destes índices estatísticos é mostrado na tabela (6.4). Além destes, nesta tabela, foram acrescentados também os resultados obtidos com o uso de modelos

gaussianos de última geração por Hanna e Paine, 1989 e Berkowicz et al., 1986 (cujos valores de σ são funções da velocidade de fricção e do comprimento de Monin Obhukov, como ocorre com as difusividades empregadas neste trabalho). Observando-se esta tabela se confirma mais uma vez o bom comportamento dos resultados previstos pelos modelos.

Adicionalmente, na figura (6.4) bem como na figura(6.5) são mostrados os diagramas de espalhamento entre as concentrações observadas e as medidas para os casos bi e tridimensionais respectivamente. Nestas figuras fica evidenciado novamente o bom desempenho dos resultados simulados pelos modelos propostos.

Na figura (6.2) são mostrados os perfis de concentração integrada c_y em função da altura z e da distância adimensionalizada $X = xw_*/uz_i$ para o experimento 01 de Copenhagen. Referente ao mesmo experimento, na figura (6.3) são mostrados os perfis verticais da concentração integrada c_y em função da altura adimensionalizada z/z_i e da distância adimensionalizada $X = xw_*/uz_i$. Estes gráficos confirmam que o modelo bidimensional reproduz corretamente a estrutura da turbulência e que esta solução obtida da equação de difusão e advecção, exibe um comportamento Gaussiano simulando um campo de concentração uniforme para grandes distâncias X .

Na sequência seguinte de figuras (figuras (6.6), (6.7) e (6.8)), são mostrados os campos de concentração no plano yz para quatro distâncias da fonte (100m, 150m, 500m e 1000m) referentes ao experimento 01 do conjunto de dados de Copenhagen. Nelas pode-se ver o comportamento do modelo tridimensional. Observando-se as isolinhas de concentração que representam a pluma de contaminantes, a 100m da fonte (figura (6.7A)), pode-se ver que a mesma ainda não tocou o solo, o que acontece por volta dos 150m (figura (6.7B)) e se mostra de forma evidente nas seguintes (figuras (6.8A) e (6.8B)) distantes 500m e 1000m da fonte, respectivamente.

Tabela 6.1 – Condições Meteorológicas dos experimentos de Copenhagen. (Gryning et al., 1987)

Exp No.	U (ms^{-1})	u^* (ms^{-1})	L (m)	w^* (ms^{-1})	z_i (m)	H_s/z_i	z_i/L
1	3.40	0.37	-46	1.76	1980	0.058	-43
2	10.60	0.74	-384	1.72	1920	0.060	-5
3	5.00	0.39	-108	1.15	1120	0.103	-10
4	4.60	0.39	-173	0.69	390	0.295	-2.3
5	6.70	0.46	-577	0.70	820	0.140	-1.42
6	13.20	1.07	-569	1.91	1300	0.088	-2.3
7	7.60	0.65	-136	2.11	1850	0.062	-14
8	9.40	0.70	-72	2.13	810	0.142	-11
9	10.50	0.77	-382	1.84	2090	0.055	-5.5

Tabela 6.2 – Concentrações integradas $c_y(x,0)/Q$ observadas e simuladas nas diferentes distâncias da fonte dos experimentos de Copenhagen

Exp. No.	Distance (km)	$X = xw_*/uz_i$	Data ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	Model (Eqs (4.14,3.17)) ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)	Model (Eqs.4.14,3.20) ($\cdot 10^{-4} sm^{-2}$)
1	1.9	0.496	6.48	6.29	4.06
	3.7	0.967	2.31	4.014	2.94
2	2.1	0.177	5.38	3.74	2.16
	4.2	0.355	2.95	2.60	1.57
3	1.9	0.39	8.20	7.56	5.18
	3.7	0.76	6.22	5.54	3.86
	5.4	1.11	4.30	4.26	3.24
4	4.0	1.54	11.66	8.53	7.47
5	2.1	0.27	6.71	5.85	5.53
	4.2	0.53	5.84	5.83	4.38
	6.1	0.78	4.97	4.98	3.76
6	2.0	0.22	3.96	3.18	2.18
	4.2	0.47	2.22	2.38	1.59
	5.9	0.66	1.83	1.95	1.36
7	2.0	0.3	6.70	4.12	2.45
	4.1	0.62	3.25	2.59	1.75
	5.3	0.79	2.23	2.18	1.55
8	1.9	0.53	4.16	4.19	3.16
	3.6	1.01	2.02	3.14	2.42
	5.3	1.48	1.52	2.54	2.04
9	2.1	0.18	4.58	3.64	2.03
	4.2	0.35	3.11	2.45	1.47
	6.0	0.52	2.59	1.92	1.22

Tabela 6.3 – Concentrações a nível do solo $c(x, 0, 0)/Q$ observadas e simuladas nas diferentes distâncias da fonte dos experimentos de Copenhagen

Exp.	Distance	$X = xw_*/uz_i$	Data	Model	Model
No.	(km)		($\cdot 10^{-7} sm^{-3}$)	Eqs (5.20, 3.17, 3.23) ($\cdot 10^{-7} sm^{-3}$)	Eqs (5.24, 3.17, 3.23) ($\cdot 10^{-7} sm^{-3}$)
1	1.9	0.496	10.50	5.29	6.80
	3.7	0.967	2.14	2.06	3.02
2	2.1	0.177	9.85	7.73	8.64
	4.2	0.355	2.83	2.94	3.56
3	1.9	0.39	16.33	13.82	15.66
	3.7	0.76	7.95	5.80	7.08
	5.4	1.11	3.76	3.52	4.55
4	4.0	1.54	15.71	16.55	18.64
5	2.1	0.27	12.11	21.06	22.57
	4.2	0.53	7.24	11.43	12.85
	6.1	0.78	4.75	7.32	8.53
6	2.0	0.22	7.44	8.10	8.89
	4.2	0.47	3.37	3.22	3.80
	5.9	0.66	1.74	2.03	2.50
7	2.0	0.3	9.48	5.58	6.57
	4.1	0.62	2.62	1.98	2.60
	5.3	0.79	1.15	1.38	1.90
8	1.9	0.53	9.76	8.36	9.39
	3.6	1.01	2.64	3.87	4.63
	5.3	1.48	0.98	2.39	3.00
9	2.1	0.18	8.52	6.934	7.82
	4.2	0.35	2.66	2.57	3.15
	6.0	0.52	1.98	1.52	1.98

Tabela 6.4: Avaliação estatística dos resultados dos modelos

	NMSE	COR	FB	FS	Fa2
$c_y(x, 0)$ - Eqs (4.14,3.17)	0.07	0.917	0.099	0.292	1.00
$c_y(x, 0)$ - Eqs (4.14,3.20)	0.31	0.872	0.420	0.428	0.783
$c_y(x, 0)$ - HPDM model*	0.16	0.78	0.16	0.39	1.00
$c_y(x, 0)$ - OML model†	0.52	0.89	0.57	0.58	0.56
$c(x, 0, 0)$ - Eqs.(5.20 ,3.17, 3.23)	0.19	0.842	0.00	-0.112	0.957
$c(x, 0, 0)$ - Eqs (5.24,3.17, 3.23)	0.19	0.855	-0.144	-0.182	0.957

*(Hanna,1989)

†(Berkowicz et al.,1986)

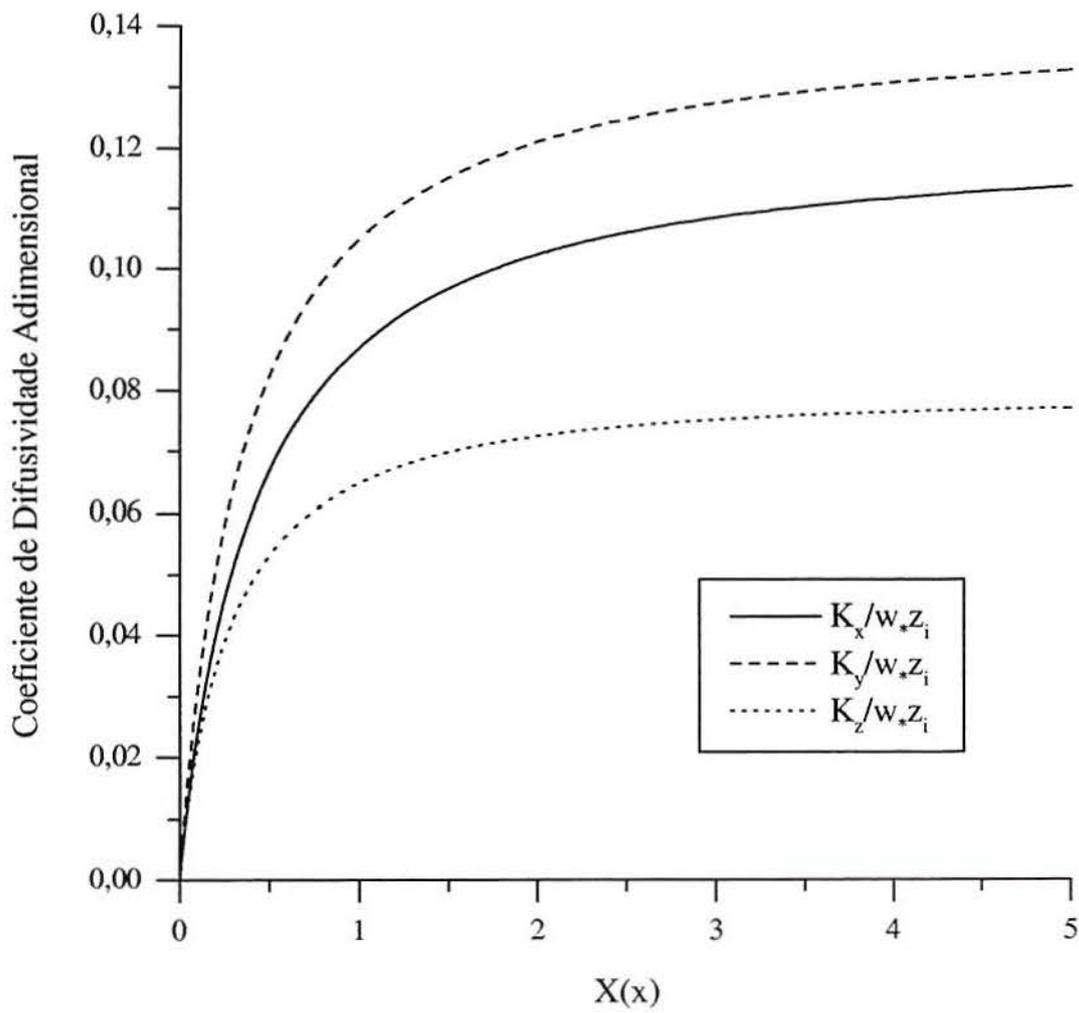


Figura 6.1 – Os coeficientes de difusão adimensionalizados $(\frac{K_x}{w_* z_i}, \frac{K_y}{w_* z_i}, \frac{K_z}{w_* z_i})$ das equações(3.17, 3.23, 3.24) em função da distância adimensionalizada $X = x w_* / u z_i$.

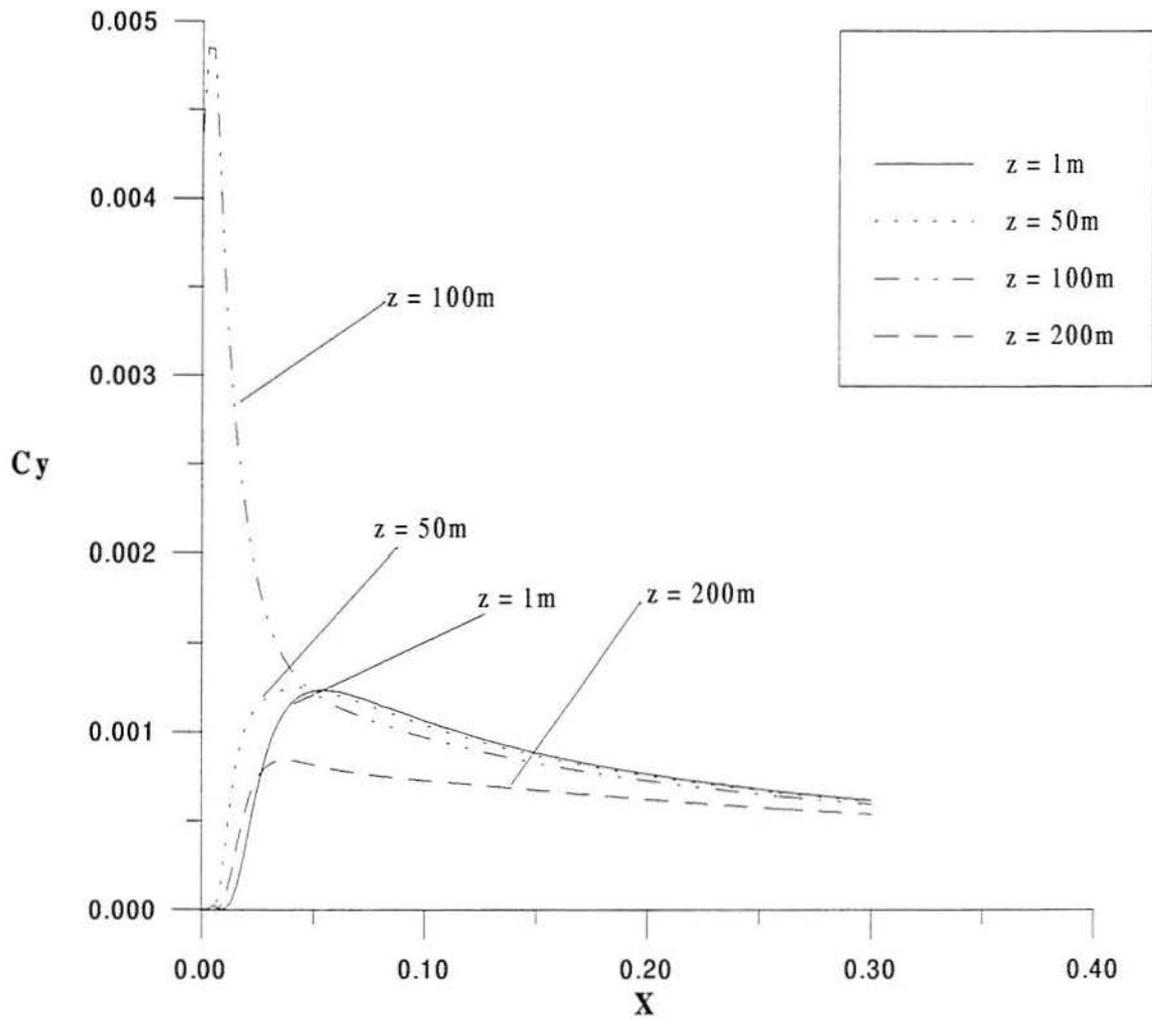


Figura 6.2 – Perfis da concentração integrada c_y como uma função da altura z e da distância adimensionalizada $X = x w_* / u z_i$ para o experimento 1 de Copenhagen (Gryning et al., 1987).

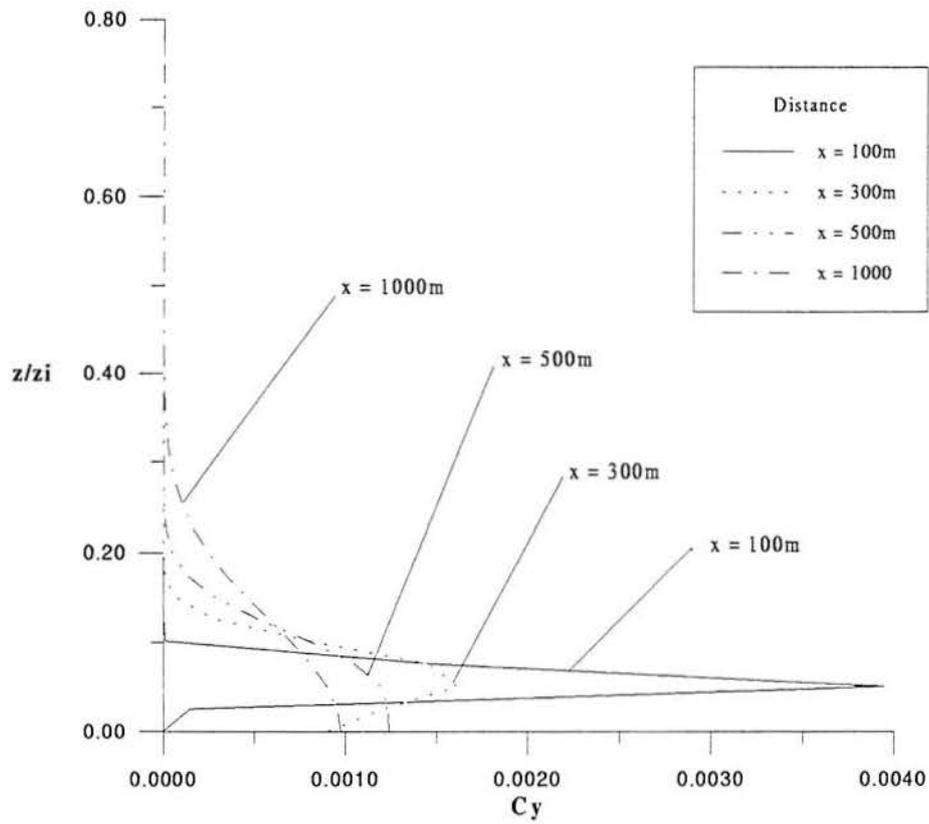


Figura 6.3 – Perfis verticais da concentração integrada c_y como uma função da altura adimensionalizada z/z_i e da distância adimensionalizada $X = x w_* / u z_i$ para o experimento 1 de Copenhagen (Gryning et al., 1987).

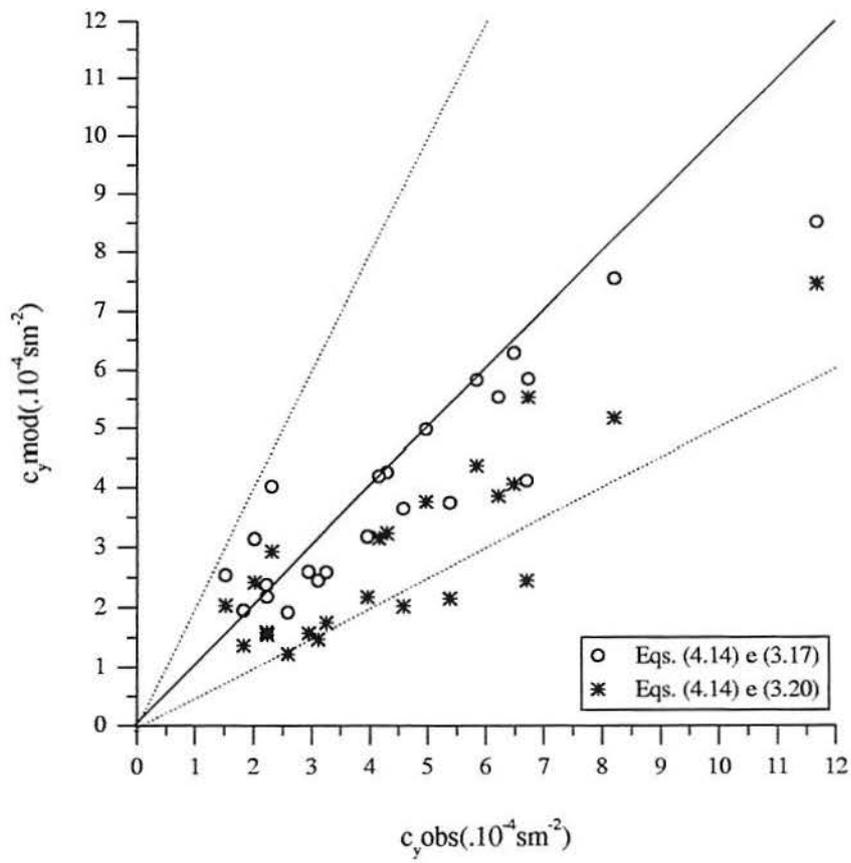


Figura 6.4 – Diagrama de espalhamento entre as concentrações integradas $c_y(x, 0)/Q$, a nível do solo, observadas e simuladas para os experimentos de Copenhagen (Gryning et al., 1987).

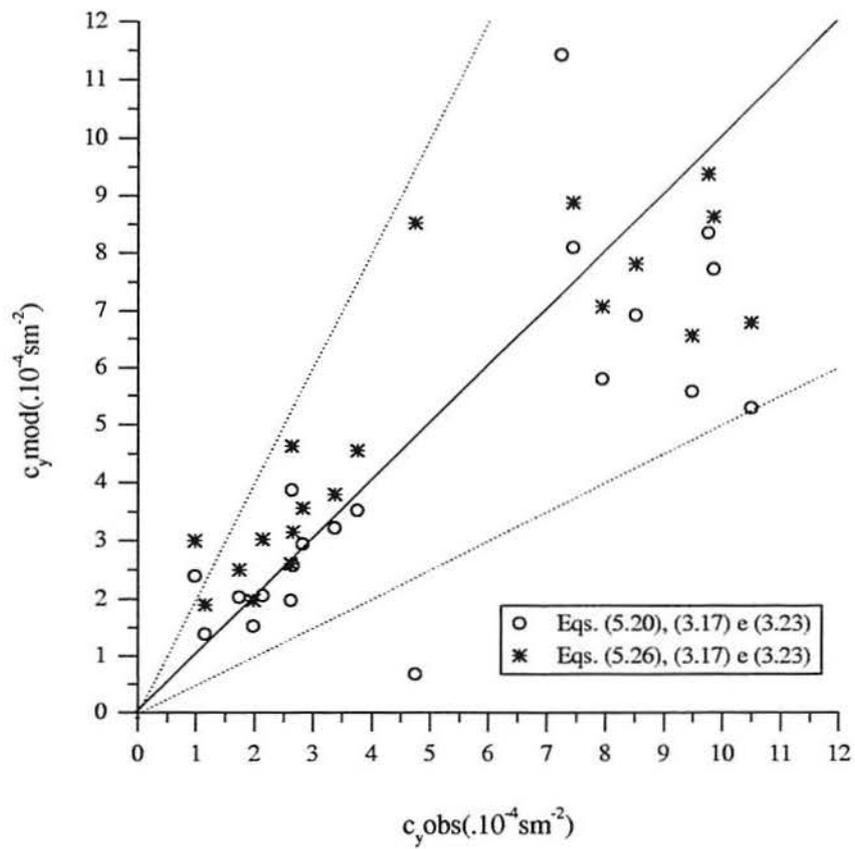


Figura 6.5 – Diagrama de espalhamento entre as concentrações $c(x, 0, 0)/Q$ a nível do solo, observadas e simuladas para os experimentos de Copenhagen (Gryning et al., 1987).

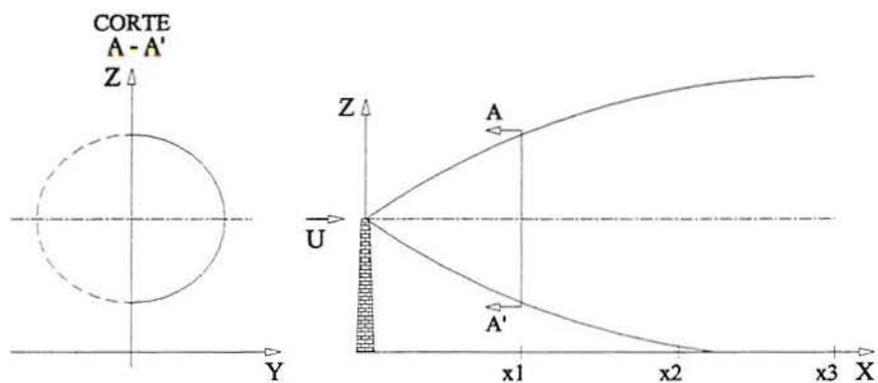


Figura 6.6: Desenho explicativo das figuras (6.7) e (6.8).

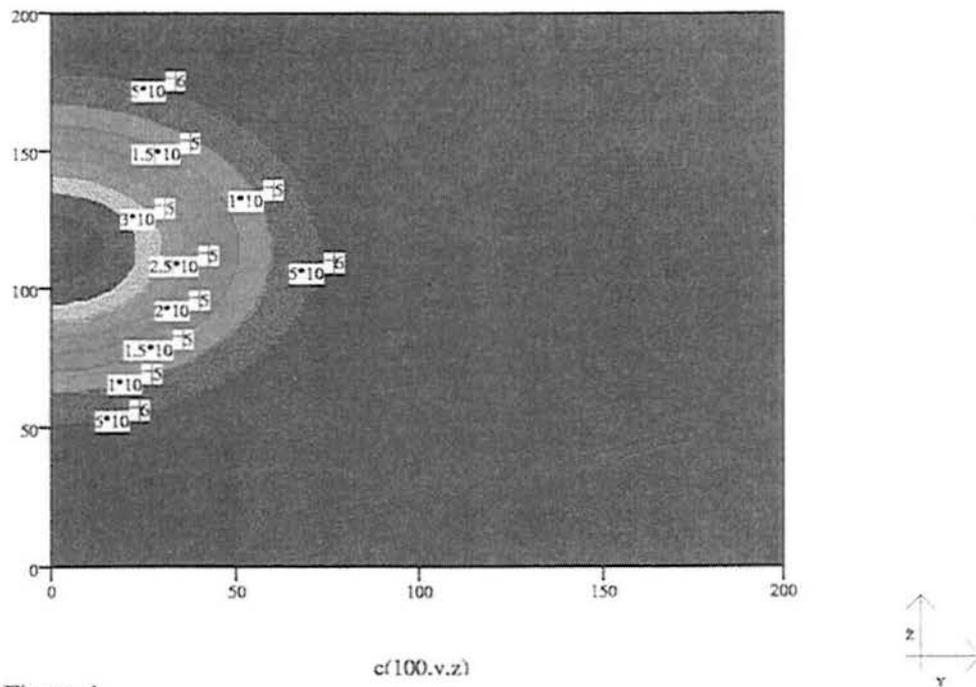


Figura A

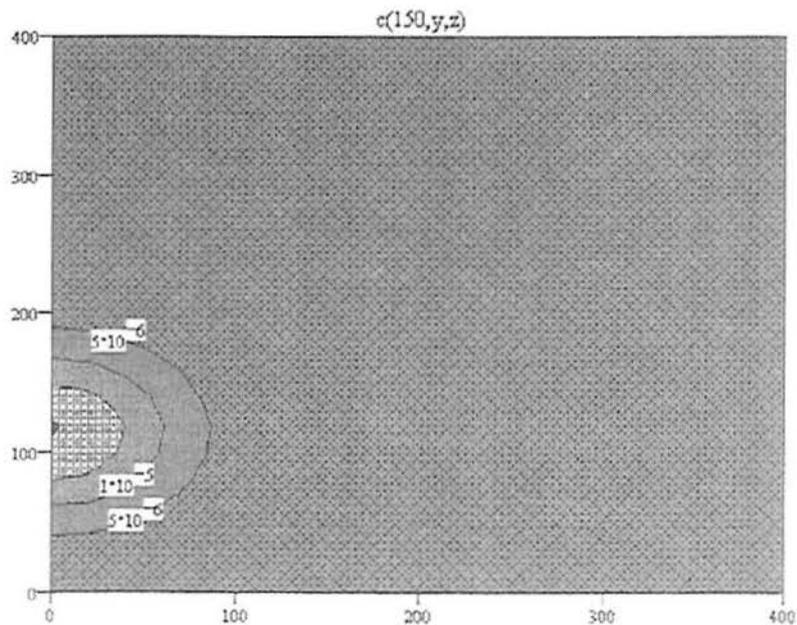


Figura B

Figura 6.7 – Campo de concentração no plano z - y , dados pelas Eq.(5.20, 3.17, 3.23) simulado para o experimento 01 de Copenhagen e distâncias da fonte de 100m (fig A) e 150m (figB) de Copenhagen (Gryning et al., 1987).

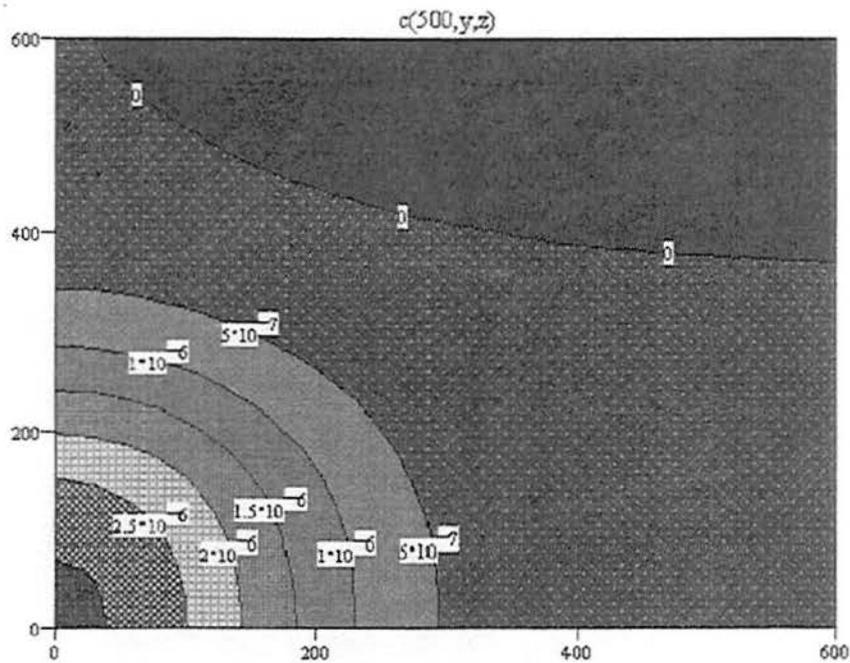


Figura C

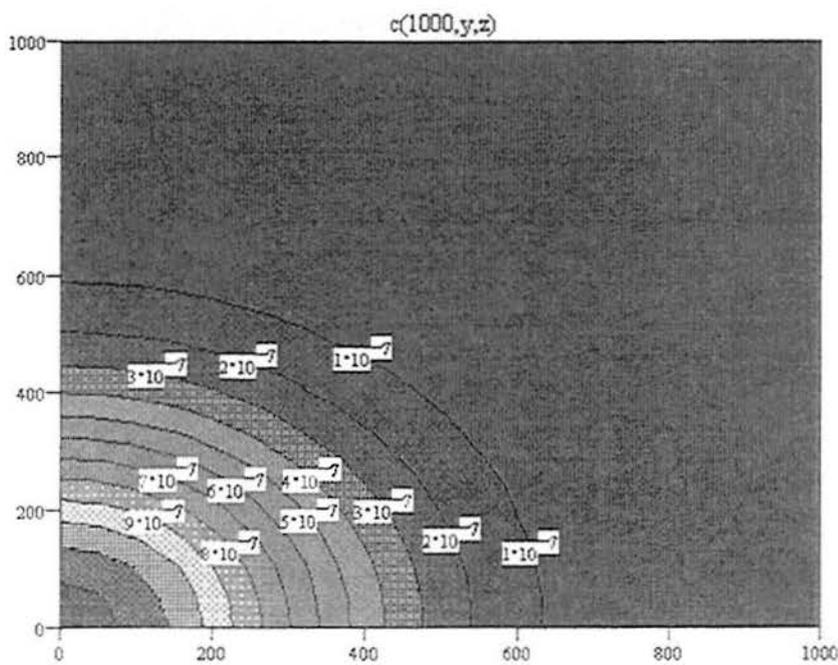
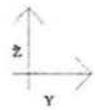


Figura D

Figura 6.8 – Campo de concentração no plano z - y , dados pelas Eq.(5.20, 3.17, 3.23) simulado para o experimento 01 de Copenhagen e distâncias da fonte de 500m (fig C) e 1000m (figD) de Copenhagen (Gryning et al., 1987).

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES:

Neste trabalho é descrito o desenvolvimento e teste de modelos bidimensional e tridimensional analíticos que simulam a dispersão de contaminantes passivos na camada limite planetária, abandonados a partir de uma fonte pontual contínua elevada. Os modelos são baseados na equação de difusão advecção e as suas soluções são obtidas pelo método da Transformada Integral Generalizada. É importante ressaltar que as soluções encontradas são analíticas, uma vez que nenhuma aproximação foi feita ao longo de sua derivação. Por isso, devido a forma analítica destas soluções, é possível controlar a precisão dos resultados aumentando-se o número de termos das séries truncadas. Todos os resultados apresentados tem uma precisão de 10 dígitos significativos. As soluções também são válidas para perfis da velocidade do vento dependentes da altura ou constantes.

Os modelos propostos consideram coeficientes de difusão turbulenta que variam com a distância da fonte em condições de turbulência homogênea com velocidades médias de vento uniformes e foram validados com dados dos experimentos de Copenhagen.

Para investigar o efeito de memória, que é consistente com as previsões da teoria da difusão estatística de Taylor e, por isso, reforça a confiança nos modelos, é também feita uma comparação numérica com resultados provenientes da simulação numérica usando-se a constante assintótica do coeficiente de difusão vertical (Eq. 3.20) que é válida para grandes tempos de difusão.

A análise dos resultados estatísticos mostrou uma boa relação entre os dados experimentais e os simulados para Copenhagen. Além disso, é importante enfatizar que os resultados obtidos com os coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte (Eqs.3.17, 3.23) são melhores que os resultados alcançados com a constante assintótica do coeficiente de difusão (Eq. 3.20), válido somente para locais distantes de uma fonte elevada. Os resul-

tados sugerem que a inclusão do efeito de memória, como é modelado pela teoria de Taylor, melhora a descrição do processo de transporte turbulento de um contaminante atmosférico passivo abandonado a partir de uma fonte pontual contínua. Estes resultados melhores, mostrados na tabela (6.4) (Nm_{se} , cor, F_b , F_s , F_{a2}), são uma consequência dos coeficientes de difusão turbulentos descritos em termos dos turbilhões energéticos e isto é uma função da distância, a juzante, da fonte.

Com o que foi mostrado, pode-se apontar ainda, que os resultados derivados aqui, sugerem que, para abandonos elevados em condições de convecção fraca à moderada (sem empuxo), as propriedades da turbulência na altura da fonte são as mais representativas do campo ambiental.

Finalmente pode-se ressaltar que neste trabalho foram desenvolvidos modelos, baseados em soluções analíticas, para os quais não foi necessário o emprego da hipótese Gaussiana.

7.1 Sugestões Para Trabalhos Futuros:

- Obtenção de uma nova solução incluindo o termo de remoção ou sumidouro na equação de difusão e advecção de forma a levar em consideração a deposição de contaminantes no solo.
- Tornar as soluções apresentadas dependentes da altura, fazendo uso do artifício usado em Moura et al., 1995, de segmentação da altura.
- Extensão do modelo para um modelo tipo 24 horas, com a substituição do coeficiente de difusão.
- Incluir termos de entranhamento no topo da camada limite nas soluções propostas.
- Incluir nas soluções propostas, correções para elevação da pluma (plume rising).
- Alterar a condição de contorno no topo da camada limite, para extensão infinita, para os casos em que o topo da camada limite não está bem definido, como é feito em outros trabalhos (Sharan e Yadav, 1998).

ANEXO A

SOLUÇÃO TRIDIMENSIONAL DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO E ADVECÇÃO: FONTE LINHA

A equação da difusão atmosférica, considerando-se um fluido incompressível e a teoria do transporte de gradiente, em um sistema de coordenadas retangulares tem a forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + S + R. \quad (\text{A.1})$$

onde c é a concentração média de um poluente; S e R são os termos de fonte e remoção, respectivamente; u, v, w e K_x, K_y, K_z são as componentes da velocidade do vento e as difusividades nas direções ortogonais x, y, z respectivamente, em um referencial Euleriano.

As seguintes hipóteses simplificativas são feitas:

- a) condições são consideradas estacionárias, i.e. $\partial c / \partial t = 0$.
- b) A magnitude da componente da velocidade vertical é muito menor que a da horizontal, assim o termo $w \frac{\partial c}{\partial z}$ pode ser negligenciado.
- c) o eixo x está orientado na direção do vento médio ($u = U$ e $v = 0$).
- d) A remoção (física/química) dos poluentes é ignorada de forma que $R = 0$

Desta forma a equação acima se reduz a :

$$U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) + S. \quad (\text{A.2})$$

Esta equação forma a base da maioria dos modelos de qualidade do ar (Sharan et al., 1996a). A natureza da solução desta equação depende da especificação de U , K e S . Normalmente U é considerado constante (Smith, 1957b, Nieuwstadt, 1980), ou mais realisticamente, como uma função de potência dependente altura z (Pasquill e Smith, 1983). Da

mesma forma as difusividades K são também assumidas constantes (Roberts, 1923; Sharan et al., 1996a,b), funções de potência da altura z ou tomadas como funções de coordenadas espaciais (Berkowics e Prahm, 1979; Tirabassi et al., 1987; Bartzis, 1989). Baseando-se na localização da fonte com respeito ao sistema de coordenadas usada, pode-se ainda especificar uma forma explícita para S .

Nesse trabalho, para a dedução da solução analítica, U será tomado como uma função qualquer da altura z e as difusividades são especificadas como funções da distância da fonte, já deduzidas em capítulo anterior (capítulo 3). Explicitando a dependência da concentração média c com a posição tridimensional e formulamos as hipóteses adicionais:

e) a magnitude da componente de difusão longitudinal é muito menor que a componente de advecção na mesma direção, ou seja $|\frac{\partial}{\partial x}(K_x \frac{\partial c}{\partial x})| \ll |U \frac{\partial c}{\partial x}|$, e pode ser negligenciado,

f) o termo referente a fonte elevada será considerado nas condições de contorno, o problema tridimensional estacionário pode ser reescrito da seguinte forma:

$$U \frac{\partial c(x, y, z)}{\partial x} = K_z(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial z^2} + K_y(x) \frac{\partial^2 c(x, y, z)}{\partial y^2}. \quad (\text{A.3})$$

onde $c(x, y, z)$ é a concentração média de um poluente; U e $K_y(x)$, $K_z(x)$ são a componente da velocidade do vento médio e as difusividades nas direções ortogonais y, z respectivamente, em um referência Euleriana. A fonte linha elevada será considerada nas condições de contorno.

Aqui U pode ser assumido como uma constante ou como uma função qualquer da altura z e as difusividades são especificadas como funções da distância da fonte, já deduzidas no capítulo 3.

Este problema está sujeito às condições de contorno do tipo:

1) Os poluentes não são absorvidos no solo e nem no topo da camada limite, e por isso não há fluxo de difusão nestes pontos:

$$\frac{\partial c(x, y, z)}{\partial z} = 0 \quad z = 0, z_i. \quad (\text{A.4})$$

2) A fonte linha infinita elevada é assumida a uma altura z_f na origem dos eixos coordenados (x, y) :

$$\frac{c(x, y, z)}{Q} = \delta(z - zf) \quad x = 0. \quad (\text{A.5})$$

3) A concentração dos poluentes é imaginada ser zero para distâncias suficientemente grandes da fonte $\pm b$ onde esta condição é satisfeita:

$$c(x, y, z) = 0 \quad y = \pm b. \quad (\text{A.6})$$

Observe-se que a equação acima expressa a condição imposta na direção y . Em outros trabalhos (Sharan et al., 1996a) a concentração é suposta tendendo a zero a medida que y também tende a infinito, e por isso, na prática b deve ser suficientemente grande para que esta condição seja satisfeita.

Para a solução do problema dado pela Eq.(5.3), pelo método da Transformada Integral Generalizada (Cotta e Mikhaylov, 1997) supõe-se que a solução do problema tridimensional é descrita como uma série dupla com a seguinte forma:

$$c(x, y, z) = \sum_m \sum_n \phi_{n,m}(x, \varphi_{n,m}) \cdot Y_n(\gamma_n, y) \cdot Z_m(\beta_m, z), \quad (\text{A.7})$$

onde as funções $Y_n(\gamma_n, y)$ e $Z_m(\beta_m, z)$ são obtidas da solução de problemas de Sturm-Liouville. Assim sendo, $Z_m(\beta_m, z)$ é solução do problema:

$$\frac{d^2 Z_m(\beta_m, z)}{dz^2} + \beta_m^2 Z_m(\beta_m, z) = 0, \quad (\text{A.8})$$

sujeito às condições de contorno:

$$\frac{\partial Z_m(z)}{\partial z} = 0 \quad z = 0, z_i. \quad (\text{A.9})$$

cuja solução já é conhecida (Özsisik, 1980) e da forma :

$$Z_m(\beta_m, z) = \cos(\beta_m \cdot z). \quad (\text{A.10})$$

Onde β_m são as raízes positivas de $\sin(\beta_m \cdot z_i) = 0$.

O problema na variável y é descrito como:

$$\frac{\partial^2 Y_n(y)}{\partial y^2} + \gamma_n^2 \cdot Y_n(y) = 0 \quad \forall y \in [-b, +b], \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial Y_n(y)}{\partial y} = 0 \quad y = 0, \quad (\text{A.12})$$

$$Y_n(y) = 0 \quad y = \pm b. \quad (\text{A.13})$$

Note-se que como nos problemas anteriores, foi admitido uma simetria em y . Chega-se, para este problema auxiliar, facilmente a seguinte solução:

$$Y_n(\gamma_n, y) = \cos(\gamma_n \cdot y). \quad (\text{A.14})$$

Aqui, γ_n são raízes positivas de $\cos(\gamma_n \cdot b) = 0$.

Substituindo-se estas soluções na equação da solução do problema (A.7) e depois na equação inicial do problema (A.3) chega-se a seguinte expressão para $\phi_{n,m}(x)$:

$$\frac{\partial \phi_{n,m}(x)}{\partial x} + \frac{\beta_m^2 K_z(x) + \gamma_n^2 K_y(x)}{U} \cdot \phi_{n,m}(x) = 0. \quad (\text{A.15})$$

Sendo que a solução deste problema é apresentada abaixo:

$$\phi_{n,m}(x) = \varphi_{n,m} e^{-\int_0^x \frac{\beta_m^2 K_z(x) + \gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx}. \quad (\text{A.16})$$

Neste ponto ainda tem-se a função $\varphi_{n,m}$ desconhecida. Para determiná-la aplica-se as condições de contorno em $x = 0$ na Eq.(A.7) e se faz uso das propriedades de ortogonalidade das funções $Zm(z, \beta_m)$ e $Yn(y)$, chegando-se a seguinte expressão para $\varphi_{n,m}$:

$$\varphi_{n,m} = \frac{Q Zm(zf) \int_0^b Yn(y0)}{N(\beta_m) N(\gamma_n)}, \quad (\text{A.17})$$

onde $N(\beta_m)$ $N(\gamma_n)$ são, respectivamente, as normas das funções β_m e γ_n .

E, finalmente, com todos os termos incógnitos conhecidos, pode-se proceder a construção da solução final do problema descrito em (A.3), que é:

$$c(x, y, z) = \frac{2Q}{z_i} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\beta_m \cdot z f) \cdot \cos(\beta_m \cdot z) \cdot \cos(\gamma_n \cdot y) \cdot e^{-\int_0^x \frac{\beta_m^2 K_z(x) + \gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx} + \frac{Q}{z_i} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\gamma_n \cdot y) \cdot e^{-\int_0^x \frac{\gamma_n^2 K_y(x)}{U} dx} \quad (\text{A.18})$$

A solução acima, como as anteriormente determinadas, permite a vantagem da determinação do erro inerente ao método, ou seja, relativo ao truncamento do somatório.

Cabe lembrar ainda as expressões de $K_z(x)$ e $K_y(x)$, deduzidas no capítulo 3:

$$K_z(x) = 0.09 \cdot c^{1/2} \psi^{1/3} \cdot w_* z_i \int_0^{\infty} \frac{\sin(7.84 c^{1/2} \psi^{1/3} X n')}{(1 + n')^{5/3} n'} dn' \quad (3.17)$$

$$K_y(x) = 0.1546 \cdot c^{1/2} \psi^{1/3} \cdot w_* z_i \int_0^{\infty} \frac{\sin(5.98 c^{1/2} \psi^{1/3} X n')}{(1 + n')^{5/3} n'} dn' \quad (3.23)$$

E desta forma mostrou-se a obtenção da solução tridimensional para o problema de advecção e difusão atmosférica adequado para uma fonte linha infinita e para condições convectivas, uma vez que as difusividades foram deduzidas para estas condições.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Arya, P., 1995. "Modeling and Parameterization of Near-Source Diffusion in Weak Winds", **J. Applied Meteorology**, vol. 34, pp. 2231–2234.

Batchelor, G., 1949. "Diffusion in a Field of Homogeneous Turbulence", **Aust. J. Sci Res.**, vol. 2, pp. 437.

Berkowickz, R. R., Olesen, H. R., and Torp, U., 1986. "The Danish Gaussian air pollution model (OML): description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications.", **Proc. NATO-CCMS 16th Int. Meeting on Air Poll. Modelling and Its Applications**, C. De Wispelaere, F.A. Schiermeier and N.V.Gillani Eds.; Plenum Press, NY,USA, pages 453–481. New York, USA.

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

Boyce, W. and Prima, R. D., 1965. "Ecuaciones Diferenciales y Problemas con Valores en la Frontera". John Wiley & Sons, Inc., Mexico. 564p.

Catalano, G., 1982. "An analytical Solution to the turbulent diffusion equation with mean vertical wind", **Proceedings of 16th Southeastern Sem. Thermal Sci.**, vol. Miami, pp. 143–151.

Caughey, S., 1982, "Observed characteristics of the atmospheric boundary layer", pages 107–158. Reidel Publishing Company. capitulo do livro do Nieuwstadt.

Caughey, S. and Palmer, S., 1979. "Some Aspects of Turbulence Structure Through the Depth of the Convective Boundary Layer", **Quart. J. Roy. Meteor. Soc.**, vol. 105, pp. 811–827.

Champagne, F., Frihe, C., Rue, J. L., and Wyngaard, J., 1977. "Flux measurements, flux estimation techniques, and fine-scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land", **J. Atmos. Science**, vol. 34, pp. 515–530.

Chrysikopoulos, C., Hildemann, L., and Roberts, P., 1992. "A 3-Dimensional Steady State Atmospheric Dispersion Deposition Model for Emissions from a Ground Area Source", **Atmospheric Environment - Part A**, vol. 26A(5), pp. 747–757.

Corrsin, J., 1963. "Estimates of the relations between Eulerian and Lagrangian scales in large Reynolds number turbulence", **J. of Atmospheric Science**, vol. 20, pp. 115–119.

Cotta, R. and Mikhaylov, M., 1997. "**Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**". John Wiley & Sons, Baffins Lane, Chichester, England. 352p.

Degrazia, G., 1989. "**Anwendung von Ähnlichkeitsverfahren auf die Turbulent Diffusion in den Konvektiven und Stablen Grenzschicht**", PhD thesis, Institut F. Meteorologie und Klimaforschung, Univ. Karlsruhe. 98pp.

Degrazia, G., 1998. "Modelling Dispersion from Elevated Sources in a Planetary Boundary Layer Dominated by Moderate Convection", **Il Nuovo Cimento**, vol. 21(3), pp. 345–353.

Degrazia, G. and Anfossi, D., 1998. "Estimation of the Kolmogorov Constant C_0 from Classical Statistical Diffusion Theory", **Atmospheric Environment**, vol. 32(20), pp. 3611–3614.

Degrazia, G. and Moraes, O., 1992. "A Model for Eddy Diffusivity in a Stable Boundary Layer", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 58, pp. 205–214.

Degrazia, G., Vilhena, M., and Moraes, O., 1996. "An Algebraic Expression for the Eddy Diffusivities in the Stable Boundary Layer: a Description of Near-Source Diffusion", **Il Nuovo Cimento**, vol. 19(3), pp. 399–403.

Demuth, C., 1978. "A Contribution to the Analytical Steady Solution of the Diffusion Equation for Line-sources", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 1255–1258.

Druilhet, A., Frangi, J., Guedalia, D., and Fontan, J., 1983. "Experimental Studies of the Turbulence Structure Parameters of the Convective Boundary Layer", **J. Climate Applied Meteorologie**, vol. 22, pp. 594-.

Fiedler, F., 1968. "Untersuchung ber die Ausbreitung von atmosphrichen Eigenschaften und Luftbeimengungen;", Dr., Naturwissenschaftlichen Fakultt der Ludwig-Maximilians-Universitt in Mnchen, Mnchen.

Gryning, S., Holtslag, A., Irwing, J., and Silversten, B., 1987. "Applied Dispersion Modelling Based on Meteorological Scaling Parameters", **Atmospheric Environment**, vol. 21(1), pp. 79-89.

Gryning, S. and Lyck, E., 1984. "Atmospheric Dispersion from Elevated Sources in an Urban Area: Comparison Between Tracer Experiments and Model Calculations.", **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 23(4), pp. 651-660.

Guillemet, B., Isaka, H., and Mascart, P., 1983. "Molecular Dissipation of Turbulent Fluctuations in the Convective Mixed Layer", **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 27, pp. 141-.

Hanna, S., 1989. "Confidence limit for air quality models as Estimated by Bootstrap and Jackknife Resampling Methods", **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1385-1395.

Hanna, S. and Paine, R., 1989. "Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) development and evaluation", **J. Applied Meteorology**, vol. 28, pp. 206-224.

Hanna, S. R., 1981. "Lagrangian and Eulerian time scale in daytime boundary layer", **J of Applied Meteorology**, vol. 20, pp. 242-249.

Kaimal, J., Wyngaard, J., Haugen, D., Cote, O., Izumi, Y., Caughey, S., and Reading, C., 1976. "Turbulence Structure in the Convective Boundary Layer", **Journal of Atmospheric Science**, vol. 33, pp. 2152-2169.

Koch, W., 1989. "A Solution of the Two-Dimensional Atmospheric Diffusion Equation with Height-Dependent Diffusion Coefficients Including Ground Level Absorption", **Atmospheric Environment**, vol. 23(8), pp. 1729-1732.

Lin, J. and Hildemann, L., 1996. "Analytical Solutions of the Atmospheric Diffusion Equation with Multiple Sources and Height-Dependent Wind Speed and Eddy Diffusivities", **Atmospheric Environment**, vol. 30(2), pp. 239–254.

Lin, J. and Hildemann, L., 1997. "A Generalized Mathematical Scheme to Analytically Solve the Atmospheric Diffusion Equation with Dry Deposition", **Atmospheric Environment**, vol. 31(1), pp. 59–71.

Luhar, A. and Britter, R., 1989. "A Randomwalk Model for Dispersion in Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer", **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1191–.

Lupini, R. and Tirabassi, T., 1983. "Solution of the Advection-diffusion Equation by the Moments Method", **Atmospheric Environment**, vol. 17(5), pp. 965–971.

Lyons, T. J. and Scott, W., 1990. "**Principles of Air Pollution Meteorology**". Belhaven Press. 224p.

Moeng, C. and Wyngaard, J., 1989. "Evaluation of Turbulent Transport and Dissipation Closures in Second-Order Modeling", **J. Atmospheric Science**, vol. 46, pp. 2311–2330.

Monin, A. and Yaglom, A., 1971. "**Statistical Fluid Mechanics**". Mit Press, Cambridge. 769p.

Moreira, D., 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**", Master's thesis, Curso de Mestrado em Física- UFSM, Santa Maria. 53p.

Moura, A., Degrazia, G., and Vilhena, M., 1999. "Two Dimensional Dispersion Analytical Model: Eddy diffusivities depending on source distance", **submetido publicao - Journal of Applied Meteorology**, vol. .

Moura, A., Vilhena, M., and Degrazia, G., 1995. "Solução Analítica para a Dispersão Vertical Turbulenta em uma Camada Limite Estável", **Proceedings - COBEM - Congresso Bras. Eng. Mecânica**, vol. .

Nieuwstadt, F., 1980. "An Analytic Solution of the Time-dependent, One Dimensional Diffusion Equation in the Atmospheric Boundary Layer", **Atmospheric Environment**, vol. 14, pp. 1361-1364.

Nieuwstadt, F. and Haan, B., 1981. "An Analytic Solution of One-Dimensional Diffusion Equation in the Non-Stationary Boundary Layer with an Application to Inversion Rise Fumigation", **Atmospheric Environment**, vol. 15(5), pp. 845-851.

Olesen, H., Larsen, S., and Hojstrup, J., 1984. "Modelling velocity spectra in the lowest part of the planetary boundary layer", **Boundary Layer Meteorology**, vol. 29, pp. 285-312.

Özisik, M., 1980. "**Heat Conduction**". John Wiley & Sons, Inc. 692p.

Pasquill, F., 1974. "**Atmospheric Diffusion**". John Wiley & Sons, New York, 2nd edition.

Pasquill, F. and Smith, F., 1983. "**Atmospheric Diffusion**". Ellis Horwood Ltda, Chichester. 473p.

Pires, C., 1996. "**Um estudo analítico de dispersão de contaminantes abandonados por fontes áreas em uma camada limite convectiva**", Master's thesis, Curso de Pos Graduação em Sensoriamento Remoto - UFRGS, Porto Alegre.

Roberts, O., 1923. "The Theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere", **Proc. Roy. Soc.**, vol. 104, pp. 640-648.

Rounds, W., 1955. "Solutions of two-dimensional diffusion equation", **Transactions American Geophysical Union**, vol. 36, pp. 395-405.

Schmidt, H. and Schumann, U., 1989. "Coherent Structure in the Convective Boundary Layer", **J. Fluid Mechanics**, vol. 200, pp. 511-562.

Scriven, R. and Fischer, B., 1975. "The Long Range Transport of Airborne Material and Its Removal by Deposition and Washout -II- The Effect of Turbulent Diffusion", **Atmospheric Environment**, vol. 9, pp. 59-68.

Seinfeld, J., 1986. "Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution". John Wiley & Sons. 738p.

Sharan, M., Singh, M., and Yadav, A., 1996a. "Mathematical Model for Atmospheric Dispersion in Low Winds with Eddy Diffusivities as a Linear functions of Downwind Distance.", **Atmospheric Environment**, vol. 30(7), pp. 1137-1145.

Sharan, M. and Yadav, A., 1998. "Simulation of Diffusion Experiments under Light Wind Stable Conditions by Variable K-Theory Model", **Atmospheric Environment**, vol. 38(20), pp. 3481-3492.

Sharan, M., Yadav, A., Singh, M., Agarwal, P., and Nigam, S., 1996b. "A Mathematical Model for the Dispersion of Air Pollutants in Low Wind conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 30(8), pp. 1209-1220.

Smith, F., 1957a. "Convection-Diffusion processes below a stable layer", **Meteorological Research Committee**, vol. (1048 e 1073).

Smith, F., 1957b. "The diffusion of Smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere", **J. Fluid Mechanics**, vol. 2, pp. 49-76.

Tirabassi, T., 1989. "Analytical Air Pollution Advection and Diffusion Models", **Water, Air and Soil Pollution**, vol. 47, pp. 19-24.

Tirabassi, T., 1997. "Solutions of the Advection-Diffusion Equation", **Air Pollution V - Modelling, Monitoring and Management computational Mechanics Publications**, vol. proceedings.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1995. "Operational Short-Range Analytical Air Pollution Modelling", **Int. J. Environment and Pollution**, vol. 5(4-6), pp. 593-601.

Tirabassi, T., Tagliazucca, M., and Galliani, G., 1987. "Easy to Use Air Pollution Model for Turbulent Shear Flow", **Environmental Software**, vol. 2(1), pp. 37-44.

Tirabassi, T., Tagliazucca, M., and Zannetti, P., 1986. "KAPPA-G, a non-Gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements", **JAPCA**, vol. 36, pp. 592-596.

van Ulden, A., 1978. "Simple Estimates for Vertical Dispersion from Sources near the ground", **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 2115-2129.

Yeh, G. and Huang, C., 1975. "Three-Dimensional Air Pollutant Modeling in the Lower Atmosphere", **Boundary Layer Meteorology**, vol. 9, pp. 381-390.