UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Solução da Equação de Difusão Unidimensional Transiente para o Estudo da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária

por

Lidiane Buligon

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Marco Túllio M. B. de Vilhena,
Orientador

Prof. Dr. Davidson M. Moreira
Co-orientador

Porto Alegre, Fevereiro de 2004.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Buligon, Lidiane

Solução da Equação de Difusão Unidimensional Transiente para o Estudo da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária / Lidiane Buligon.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2004.

72 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2004.
Orientador: Vilhena, Marco Túllio M. B. de; Co-orientador: Moreira, Davidson M.

Dissertação: Matemática Aplicada
Matemática, Camada Limite Planetária, Equação difusão-advecção, Transformada de Laplace, Equações Diferenciais

Solução da Equação de Difusão Unidimensional Transiente para o Estudo da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária

por

Lidiane Buligon

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte e Transformadas Integrais

Orientador: Prof. Dr. Marco Túllio M. B. de Vilhena,

Co-orientador: Prof. Dr. Davidson M. Moreira

Banca examinadora:

Profa. Dra. Ângela Beatrice Dewes Moura
ICET/Feevale

Profa. Dra. Cynthia Feijó Segatto
PPGMAp/IM/UFRGS

Prof. Dr. Gervázio Annes Degrazia
PGFis/UFSM

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia
CTA/IEA

Dissertação apresentada e aprovada em
.

Prof. Dr. Vilmar Trevisan
Coordenador

Para meus pais, meus irmãos e meu namorado.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos professores Marco Túllio M. B. de Vilhena e Davidson M. Moreira pelos ensinamentos, apoio, incentivo e dedicação durante o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço à minha mãe Marlene, ao meu pai Alamir e aos meus irmãos Eliane, Alamir Leandro, Ediane Andréia pelo incentivo e carinho que sempre me foi dado.

Agradeço em especial ao meu namorado e colega Charles pelo apoio, pela amizade, pela cumplicidade e pelo carinho demonstrado durante todo o curso.

Agradeço a todos os meus amigos e colegas que sempre estiveram ao meu lado, pelo carinho e palavras de incentivo.

Agradeço aos demais professores do PPGMAp pela colaboração em minha formação. Em especial a professora Cynthia F. Segatto.

Agradeço ao PPGMAp pela oportunidade e disponibilização dos recursos, materiais e humanos, necessários para a realização deste trabalho.

Agradeço a CAPES pelo suporte financeiro.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SíMBOLOS

A_n e B_n	constantes de integração
b	matriz dos termos independentes transposta
C	concentração média
C_n	concentração média no subintervalo n
C^*	concentração média adimensional
c_i	constante utilizada no cálculo do coeficiente de difusão
CE	Camada Estável
CI	Camada de Interface ou Entranhamento
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Neutra
CLP	Camada Limite Planetária
CM	Camada de Mistura
CR	Camada Residual
CS	Camada Superficial
$\mathcal{C}_{n_h}$	solução homogênea
$\mathcal{C}_{n_p}$	solução particular
D	taxa de deposição
$(f_m^*)_i$	freqüência adimensional do pico espectral
$(f_m)_i$	freqüência do pico espectral da estratificação neutra
F_{Li}	valor do espectro Lagrangeano de energia normalizado pela variância da velocidade
h	altura da Camada Limite Estável
h_{CLP}	altura da Camada Limite Planetária
H_s	altura da fonte
H_s^*	altura da fonte adimensiional
i	índice que representa as componentes u, v e w (indicam respectivamente a direção horizontal, lateral e vertical)
j	número de inversões feitas no cálculo da concentração de poluentes
K_α	coeficiente de difusão turbulento genérico
K_n	coeficiente de difusão turbulento válido no subintervalo n
K_x	coeficiente de difusão turbulento na direção zonal
K_y	coeficiente de difusão turbulento na direção meridional
K_z	coeficiente de difusão turbulento na direção vertical
L	comprimento de Monin-Obukov
l_{Li}	escala de comprimento Lagrangeana
M	matriz dos coeficientes
m	metro
mm	milímetro
N	número de subintervalos nos quais a CLP foi dividida
n	subintervalo genérico

n	freqüência em Hertz
n^*	seção onde ocorre a emissão
q	função de estabilidade
Q	taxa de emissão de uma fonte área instantânea
R	taxa de transformação química
R_{Li}	função autocorrelação
s	variável complexa
S	termo de fonte
S_i^E	espectro da velocidade Euleriana
S_k	assimetria ou Skewness
S_{Li}	função densidade espectral
Sp_{n^*}	solução particular válida para a região de emissão
Sp'_{n^*}	a derivada da solução particular válida para a região de emissão
t	tempo
t	tempo de viagem
T	período de uma oscilação senoidal
T_{Li}	escala de tempo integral Lagrangeana
T_{Li}^*	escala de tempo integral Lagrangeana adimensional
T_{Lw}	escala de tempo integral Lagrangeana na vertical
T_{Lw_n}	escala de tempo integral Lagrangeana na vertical válido no subintervalo n
U	velocidade média do vento horizontal
U_*	velocidade de fricção local
u_*	velocidade de fricção
U_α	velocidade média do vento genérica
v	componente turbulenta do vento na direção meridional
v_a	velocidade limitante
v_i	velocidade arbitrária da partícula
w	componente turbulenta do vento na direção vertical
w_*	escala de velocidade convectiva
$\overline{w'c'}$	é o fluxo turbulento na vertical
x	coordenada cartesiana (direção zonal)
$\mathbf{x}$	matriz das incógnitas transposta
X_i	posição arbitrária da partícula
x_α	coordenada cartesiana genérica (α pode assumir os valores $\alpha = 1,\ 2,\ 3$ representando, respectivamente, as direções zonal, meridional e vertical)
y	coordenada cartesiana (direção meridional) independente da equação homogênea
z	coordenada cartesiana (direção vertical)
z	altura arbitrária
z^*	altura adimensional
z_i	altura da Camada Limite Convectiva

Símbolos Gregos:

α	índice que representa as direções x, y, z quando assuma os valores 1, 2, 3, respectivamente
β_i	razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana
δ	função generalizada Delta de Dirac
ϵ	difereça de dois tempos
κ	constante de von Karmam
Λ	é o comprimento de Monin-Obukov local
π	pi
ρ_{Li}	coeficiente de correlação
$(\lambda_m)_w$	comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical
λ	raiz da equação característica associada a equação homogênea
σ_i^2	variância da velocidade turbulenta genérica
σ_w	velocidade turbulenta vertical
σ_{w_n}	velocidade turbulenta vertical válido no subintervalo n
τ	tempo de relaxação
ϕ_E	função de dissipação adimensional na CLE
ψ	função taxa de dissipação molecular na CLC
ϑ_1 e ϑ_2	constantes que dependem do estado de evolução da CLE
η	dimensão do sistema linear
Φ_{Li}	espectro de energia Lagrangeano
ω	freqüência

RESUMO

Neste trabalho apresenta-se uma solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma Camada Limite Convectiva e em uma Camada Limite Estável. A equação analisada considera a difusão com velocidades finitas, o que representa o transporte turbulento fisicamente correto. Considerando o caráter não-local, adicionam-se na equação que representa uma fonte área instantânea, termos como: o tempo de relaxação, a assimetria, a escala de tempo Lagrangeana e a velocidade turbulenta vertical. A solução é obtida utilizando-se a técnica da Transformada de Laplace. Os parâmetros que encerram a turbulência são derivados da teoria de difusão estatística de Taylor combinada com a teoria de similaridade. Foram utilizados coeficientes de difusão específicos para cada uma das camadas. A transformada inversa é obtida através do esquema numérico de quadratura Gaussiana.

São apresentadas várias simulações para diferentes alturas de fonte área e obtém-se o valor da concentração para alturas próximas ao solo e próximas ao topo da Camada Limite Planetária. A inserção do termo de contra-gradiente na equação resultou em uma pequena influência na concentração de poluentes, observada de forma mais expressiva na Camada Limite Convectiva.

ABSTRACT

In this work we report an analytical solution for the turbulent vertical dispersion in a Convective Boundary Layer and in a Stable Boundary Layer. The analyzed equation considers the diffusion with finite speeds, what represents the turbulent transport physically correct. Considering the character nonlocal, are added in the equation that represents an instantaneous area source, terms as: the relaxation time, the asymmetry, the Lagrangian time scale and the vertical turbulent speed. The solution is obtained being used the technique of the Laplace Transform. The parameters that contain the turbulence are derived of the Taylor statistical diffusion theory combined with the similarity theory. Specific eddy diffusivity was used for each one of the layers. Inverse transform it is obtained through the schem numeric of Gaussian Quadrature.

Several simulations are presented for different heights of an area source and it is obtained the value of the concentration for close heights to the ground and close to the top of the Planetary Boundary Layer. The insert of the countergradient term in the equation resulted in a small influence in the concentration of pollutant, observed in a more expressive way in the Convective Boundary Layer.

1 INTRODUÇÃO

O desenvolvimento industrial e urbano têm causado em todo mundo o aumento da emissão de poluentes antropogênicos na atmosfera. Os problemas ocasionados pela poluição do ar são complexos e afetam processos naturais, influenciando de forma marcante o equilíbrio ecológico. Por esta razão, é importante estudar e entender o processo de dispersão de poluentes na atmosfera para prever as possíveis consequências do impacto provocado por estas fontes poluidoras sobre os diversos ecossistemas.

Para estudar a dispersão de poluentes na atmosfera utilizam-se dois métodos de investigação: os experimentos de campo ou de laboratório e as simulações computacionais. O fato dos experimentos de campo serem muitas vezes dificultados por problemas operacionais e pelo alto custo financeiro, torna a simulação computacional o método mais utilizado para a compreensão destes processos.

Entre os modelos que podem ser utilizados para simular a dispersão de poluentes na atmosfera destacam-se os modelos Eulerianos e Lagrangeanos, onde a diferança básica entre estes modelos é o sistema de referência, sendo que o sistema de referência Euleriano é fixo (em relação à terra) enquanto o sistema de referência Lagrangeano segue o movimento atmosférico.

Os modelos Eulerianos de dispersão têm como esquema principal a solução da equação de difusão-advecção, a qual é expressa através da parametrização dos fluxos turbulentos. Sob certas condições consegue-se expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma.

Na literatura pode-se encontrar um grande número de soluções numéricas da equação difusão-advecção. No entanto, a solução analítica para estas equações possui várias vantagens sobre a solução numérica, pois toda a influência dos parâmetros, numa solução analítica, é expressa explicitamente em uma forma matematicamente fechada e, conseqüentemente, a análise da sensibilidade sobre os parâmetros pode ser facilmente avaliados. Além disso, códigos numéricos baseados em expressões analíticas precisam menos recursos computacionais.

A solução da equação unidimensional transiente com o fechamento da turbulência tradicional, ou seja, o fluxo é proporcional ao gradiente da concentração é bastante utilizada para o estudo da difusão vertical de poluentes. Neste trabalho, diferentemente do modo tradicional, considera-se a equação genérica para difusão turbulenta (a soma do fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente da concentração) sugerida por van Dop [62]. Esta equação considera a difusão com velocidades finitas, o que representa o transporte turbulento fisicamente correto.

O objetivo do presente trabalho é a obtenção de uma solução analítica da equação unidimensional transiente utilizando no fechamento da turbulência a equação genérica para a difusão turbulenta. O modelo analisará o processo de dispersão vertical de poluentes na Camada Limite Convectiva (CLC) e na Camada Limite Estável (CLE), bem como investigará o efeito do termo de contra-gradiente presente no mesmo. A solução da equação, que representa uma fonte área instantânea, será obtida utilizando-se a técnica da Transformada de Laplace e considerando-se a Camada Limite Planetária (CLP) como um sistema de multicamadas (Vilhena et al. [65] e Moreira et al., [37]). Os parâmetros que encerram a turbulência serão derivados da teoria de difusão estatística de Taylor combinada com a teoria de similaridade (Degrazia et al. [16]) e (Degrazia et al. [17]), válido para grandes tempos de difusão. Finalmente, o modelo será confrontado com os resultados de um modelo Gaussiano.

Este trabalho está estruturado em nove capítulos: no segundo capítulo encontra-se uma revisão bibliográfica. No terceiro capítulo é apresentada uma descrição geral da CLP. No quarto capítulo é descrita a solução analítica da equação genérica para a difusão turbulenta. No quinto capítulo apresenta-se a teoria estatística da turbulência de Taylor. No sexto capítulo são derivados os coeficientes de difusão, dados por Degrazia et al. [16]) e (Degrazia et al. [17]). No sétimo capítulo simula-se o campo de concentração de poluentes para os caso convectivo e para o caso estável e discutem-se os resultados. Neste mesmo capítulo é feito uma comparação entre as soluções do modelo proposto neste trabalho e o Gaussiano. No oitavo capítulo apresentam-se as conclusões e finalmente no nono capítulo são feitas sugestões para futuros trabalhos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A história dos estudos sobre turbulência é bastante rica e tem significativa importância para os trabalhos comtemporâneos. Garratt [21] afirma que a teotia estatística da turbulência, relacionada tanto a problemas de difusão quanto à escala e ao espectro da turbulência, deve muito a Taylor entre os anos de 1915 a 1938. Afirma também que neste período, tanto von Karman quanto Prantdl enunciam hipóteses sobre o comprimento de mistura para a aplicação direta na atmosfera, utilizando conceitos de fluxo-gradiente e coeficientes de difusão baseados na analogia com a transferência molecular. Em 1941, Kolmogorov teve importante contribuição para o entendimento da estrutura de pequena escala da turbulência e do processo de transferência de energia da grande para a pequena escala através da sua teoria de similaridade da turbulência.

Na tentativa de obter relações impíricas entre difusão atmosférica e fatores meteorológicos, foram realizadas nos meados do século passado as primeiras medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e parâmetros meteorológicos. Nesta época os parâmetros de dispersão lateral e vertical eram medidos diretamente ou estimados a partir de medidas de concentração na superficie. O experimento mais importante foi o de Prairie Grass, Barad [1]. Pasquill [45] obteve um modelo para os parâmetros de dispersão lateral baseado na teoria estatística de Hay e Pasquill [26] e nos experimentos de Prairie Grass. O parâmetro de dispersão vertical foi estimado usando medidas de concentração na superfície, assumindo a validade do modelo de dispersão Gaussiano. Após algumas modificações sugeridas por Gifford [23], Pasquill classificou os parâmetros de dispersão de acordo com o regime de estabilidade. Este modelo foi muito utilizado em modelos de dispersão.

A partir da década de setenta as técnicas empregadas em simulação de dispersão turbulenta podem ser divididas em duas categorias: na primeira, a dispersão e o campo de concentração são estimados seguindo as partículas localizadas em um campo de velocidades, que são obtidos resolvendo-se as equações de

Navier-Stokes e considerando-se condições de contorno apropriadas, na segunda, em uma abordagem iniciada por Taylor as trajetórias podem ser geradas diretamente usando um modelo estocástico para velocidades Lagrangeanas.

Em 1958, Monin e Obukhov [35] propuseram uma teoria de similaridade válida para a camada limite superficial que é baseada na suposição de que o regime turbulento é descrito por alguns parâmetros chaves, com os quais é possível construir escalas características do movimento. Em 1970, Deardorff [13] desenvolveu a teoria de similaridade para a camada bem misturada, propondo as escalas de movimentos ca-racterísticas desta região. Nesta década e início da década de oitenta, a compreensão da difusão turbulenta na camada limite planetária convectiva teve considerável avanço a partir dos experimentos de tanque de Willis e Deardorff ([68],[69],[70], [71]), estes experimentos demonstraram que a estrutura vertical da turbulência na camada limite convectiva não obedece a uma distribuição Gaussiana. Os primeiros suportes para as observações de laboratório de Willis e Deardorff foram obtidas a partir de modelos numéricos de Lamb ([30], [31]), que usou resultados do modelo de "Large Eddy Simulation" de Deardorff [14]. No ano de 1985, Briggs [5] propôs uma expressão para a distribuição de concentração vertical obtida a partir dos resultados de laboratório de Willis e Deardorff. Uma teoria de si-milaridade local válida para toda a camada limite planetária estável foi introduzida por Nieuwstadt [42] e Sorbjan [53].

Fick, na metade do século XIX, obteve a primeira solução da equação de difusão-advecção, a conhecida solução Gaussiana, na qual o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura. Esta solução tem como condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = 0 \qquad em \qquad z = 0 \qquad e \qquad z \rightarrow \infty, \tag{2.1}$$

que correspondem a fluxo nulo de contaminantes na parte inferior e superior da camada limite planetária.

Roberts [48], 1923, apresentou uma solução bidimensional da equação de difusão-advecção nos casos onde a velocidade média do vento (U) e o coeficiente de difusão vertical (K_z) seguem uma lei de potência em função da altura (z). Isto é:

$$U = U_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \qquad ; \qquad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \tag{2.2}$$

z_1 é a altura onde U_1 e K_1 são avaliados, m e n variam entre 0 e 1. Esta solução é válida para fontes ao nível do solo.

Em 1955, Rounds [49] obteve uma solução bidimensional válida para fontes elevadas com o perfil de velocidade média do vento descrito acima, mas considerou os perfis de K_z lineares.

Dois anos mais tarde, Smith [51] resolveu a equação bidimensional de transporte e difusão com U e K_z funções de potência da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt $(\alpha = 1 - \beta)$. Posteriormente, Smith apresentou a solução no caso de U constante, mas com K_z da seguinte forma:

$$K_z = K_0 z^\alpha (z_i - z)^\beta, \tag{2.3}$$

onde K_0 é uma constante, α e β variam entre 0 e 1 de acordo com a altura da camada limite z_i . Em 1975, Scriven e Fisher [50] propuseram a solução com U constante e K_z, como segue:

$$K_z = z \qquad para \qquad 0 \leq z \leq z_t, \tag{2.4}$$

$$K_z = K_z(z_t) \qquad para \qquad z_t \leq z \leq z, \tag{2.5}$$

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

Neste mesmo ano, Yeh e Huang [72] e Berlyand [4] publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com U e K_z , seguindo perfis de potência. Demuth [19], em 1978, avançou na solução com as mesmas condições, mas para uma camada verticalmente limitada. Isto é:

$$K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = 0 \qquad em \qquad z = z_i. \tag{2.6}$$

Aplicando a teoria de similaridade de Monin-Obukhov à difusão, van Ulden [63] derivou a solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, somente com a hipótese que U e K_z seguem perfis de potência.

Nieuwstadt [41], em 1980, apresentou uma solução dependente do tempo e o coeficiente de difusão dado por:

$$K_z = G u_* z \left(1 - \frac{z}{z_1} \right), \tag{2.7}$$

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

Um ano depois, Nieuwstadt e Haan [43] estenderam esta solução para o caso de crescimento da altura da camada limite.

Quase no fim da década de oitenta, Kock [29] desenvolveu uma solução analítica bidimensional para o nível do solo com perfis de potência da velocidade do vento e coeficiente de difusão incluindo os efeitos de absorção ao nível do solo.

Em 1992, Chrysikopoulos et al. [12] apresentaram uma solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo de uma fonte área contínua ao nível do solo para os mesmos perfis de U e K_z dados pelas equações (2.2), mas incluindo deposição como um mecanismo de remoção.

Também neste ano, van Ulden [64] apresentou uma solução aproximada que descreve o campo de concentração como a soma de "puffs" (emissão instantânea).

Moura [39] e Pires [47], o primeiro em 1995 e o segundo em 1996, obtiveram a solução analítica da equação de difusão unidimensional dependente do tempo, sem vento, utilizando o coeficiente de difusâo K_z de Degrazia et al. [18] para o caso estável e convectivo, respectivamente.

Nesta mesma época Lin e Hildeman [32] estenderam a solução de Yeh e Huang e Berlyand para o caso de deposição para o solo.

Hinrichsen [27], 1986, utilizando três diferentes parametrizações, desenvolveu um modelo com a solução de Berlyand e tem verificado uma melhor performance comparado com o modelo de pluma Gaussiana.

Brown e Arya [6], 1989, tem comparado a performance do modelo usando as soluções de Yeh e Huang com os dados de Hanford 67 (Nickola [40]), Prairie Grass e medidas de túnel de vento (Snyder [67]), os resultados apresentados concordam com os dados experimentais.

Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de Yeh e Huang, Berlyand e Demuth tem sido adotados: KAPPAG (Tirabassi et al. [61]), KAPPAG-LT (Tirabassi et al. [60]), CISP (Tirabassi e Rizza [58]) e MAOC (Tirabassi e Rizza [59]).

Em 1998, Vilhena et al. [65] e Moreira et al., [37], resolveram analiticamente a equação difusão-advecção estacionária, considerando a turbulência não-homogênea e utilizando o sitema de multicamadas. Este modelo diferentemente dos modelos Gaussianos não considera o coeficiente de difusão constante em toda a CLP. Em mais recente trabalho Moreira et al. [38] resolveu o mesmo modelo para o caso não-estacionário.

Uma grande variedade de soluções numéricas da equação de difusão-advecção pode ser encontrada na literatura (Nieuwstadt e van Ulden [44]; Lamb [30]; Carvalho [8]). Entretanto, uma das principais direções da pesquisa nesta área é buscar soluções analíticas para os problemas de dispersão, pois neste tipo de solução, todos os parâmetros aparecem de forma explícita na solução, facilitando a análise sensitiva sobre os parâmetros do modelo.

3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

Nesta seção é apresentada a definição de Camada Limite Planetária e suas mais importantes características. Além disso, descreve-se as generalidades sobre a dispersão de poluentes nas diversas condições de estabilidade na CLP.

3.1 Camada Limite Planetária e o Processo Dispersão Atmosférica.

A superfície da terra é um limite do domínio da atmosfera. Processos de transporte neste domínio modificam uma região da atmosfera que se estende de 100 a 3000 m, criando a Camada Limite Planetária Stull ([56]). O restante da troposfera é denominado atmosfera livre (Figura 3.1).

Figura 3.1: *Divisão da troposfera em função do efeito do atrito causado pelo contato entre o ar e a superfície.*
Fonte: Stull; 1988, p1. figura adaptada.

A troposfera se estende da superfície até a altitude de 11 km, mas somente os primeiros quilômetros são influenciados pela superfície da terra. De acordo com Stull ([56]), pode-se definir a camada limite como aquela parte da atmosfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra e responde pelos forçantes da superfície com uma escala de tempo na ordem de 1 hora ou menos. Entre estes forçantes estão: arrasto friccional, evaporação e transpiração, transferência de calor, emissão de poluentes e modificações do escoamento induzidas pelo terreno.

A espessura da CLP sofre mudanças no tempo e no espaço, variando de centenas de metros a poucos quilômetros. Indiretamente, toda a troposfera pode ser modificada em resposta as variações ocorridas próximas à superfície, mas esta resposta é relativamente lenta fora da CLP.

O escoamento ar dentro da CLP é basicamente regido pelos forçantes superficiais e estão divididos em três categorias:

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

- *Ondas*, geralmente ocorrem a noite e são geradas localmente pelo cisalhamemto dos ventos médios e pelo escoamento (fluxo) sobre obstáculos. Transportam pouco calor, umidade e outros escalares, mas são efetivas no transporte de momento e energia;

- *Turbulênia* é constituida de turbilhões que se sobrepõem cujos diâmetros variam de 1 mm a 3000 m. A turbulência é gerada pelos forçantes térmico (devido ao aquecimento solar) e mecânico (devido ao cisalhamento do vento junto a superfície). Fora da camada limite, a turbulência é encontrada em nuvens convectivas e nas proximidades de correntes de jato, onde ocorrem intensos cisalhamentos do vento.

A CLP é classificada em três categorias de acordo com a condição de estabilidade: *neutra*, *instável* e *estável*. Esta condição de estabilidade pode ser definida de acordo com a taxa de variação da temperatura potencial com a altura:

- *Camada Limite Neutra* (CLN), a taxa de variação de temperatura potencial é nula. Neste caso, a atmosfera nem inibe nem intensifica a turbulência. A CLN ocorre, principalmente, durante o período de transição do dia para a noite;

- *Camada Limite Convectiva* (CLC), é provocada pelo aquecimento diurno da superfície e, devido à circulação convectiva, alcança uma espessura de 1000 - 3000 m. Neste caso, a taxa de variação de temperatura potencial é negativa, ou seja, a temperatura potencial diminui com a altura. Isto indica uma atmosfera instável, onde a turbulência é intensificada.

- *Camada Limite Estável* (CLE), é, ao contrário, determinada pelo resfriamento noturno da superfície da terra e alcança uma altura de 100 - 300 m. Nesta condição, a taxa de variação de temperatura potencial é positiva, ou seja, a temperatura aumenta com a altura (inversão de temperatura). Isto implica em uma atmosfera estável, onde a intensidade da turbulência é reduzida.

3.1.1 Estratificação da CLP.

Considerando uma descrição mais detalhada, é possível distinguir as seguintes subcamadas da CLP:

3.1.1.1 Camada Superficial (CS).

Encontra-se imediatamente acima da superfície da Terra, onde a variação dos fluxos turbulentos de calor e momento é negligenciada (variam menos de 10% de sua magnitude). Sua espessura varia de 10m a noite (condição estável) à 100 m durante o dia(condição instável). O perfil da temperatura na CS é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura durante o dia, e por um aumento de temperatura com a altura durante a noite. Os parâmetros relevantes na CS são a altura, a tensão do cisalhamento superficial e o fluxo de calor da superfície.

3.1.1.2 Camada de Mistura (CM).

A Camada de Mistura é a região central da CLP onde os perfis verticais de velocidade dos ventos e de temperatura são aproximadamentes constantes, conseqüência da forte mistura produzida pela convecção. Os parâmetros relevantes para sua formação são a sua altura, que pode variar de 1000 à 3000 m, e o fluxo de calor da superfície.

3.1.1.3 Camada Estável (CLE).

Está sobre o continente a noite e sua turbulência é gerada pelo cisalhamento do vento (turbulência mecânica) e sua altura varia de dezenas de metros, sob a condição de baixas velocidades de ventos, a centenas de metros para altas velocidades dos ventos. Os seus parâmetros relevantes são a altura , tensão de cisalhamento e o fluxo de calor.

3.1.1.4 Camada de Interface ou Entranhamento (CI).

Localizada no topo da CLC, é a região que intermedia a CM e a atmosfera livre e é caracterizada por uma inversão de temperatura a qual é limitante dos movimentos verticais que ocorrem na CM.

3.1.1.5 Camada Residual (CR).

Surge mais ou menos 30 min antes do pôr-do-sol, quando as circulações convectivas (termas) cessam, acarretando o decaimento da turbulência na CM. A camada resultante é denominada Camada Residual, pois suas características permanecem as mesmas da CM existente durante o período do dia.

A Figura 3.2 mostra a evolução da CLP durante um período de 24 horas. Acompanhando a evolução da esquerda para a direita da figura, observa-se que existe a formação de uma camada de mistura entre o meio dia e o por do sol. Abaixo da camada de mistura está a camada superficial e acima se encontra a camada de inversão. Com o pôr-do-sol (período de transição), começa a formação de uma camada estável junto à superfície e, logo acima, a formação de uma camada residual, a qual é remanescente da camada de mistura formada durante o dia. Com o amanhecer, a radiação solar aquece a superfície da terra, resultando uma nova camada de mistura.

Figura 3.2: *Evolução temporal da Camada Limite Planetária*
Fonte: Stull; 1988, p11. figura adaptada.

3.1.2 Generalidades sobre a Dispersão na CLP.

No processo de dispersão atmosférica, os poluentes gasosos e particulados emitidos na CLP são dispersos pelo vento médio (responsável pelo transporte) e pela turbulência (responsável pela difusão). Outros fatores importantes para a dispersão são: a presença de obstáculos orográficos ou de edifícios, a altura de emissão, a geometria da fonte, a velocidade de emissão e o tipo de poluente.

Nas regiões urbanas, os maiores prejuízos para a atmosfera são ocasionados pelo tráfego veicular, o qual produz substâncias que reagem quimicamente por efeito da radiação solar.

Os poluentes emitidos em uma camada limite noturna sofrem dispersão, sobretudo, por ação do vento médio horizontal e podem ser transportados por centenas de quilômetros antes de alcançar a superfície (Figura 3.3 e Figura 3.4). Tal situação ocorre devido à baixa capacidade de difusão da atmosfera, uma vez que durante condições estáveis a intensidade da turbulência é consideravelmente reduzida. A Figura 3.3 mostra, ainda, o grau de diminuição de estabilidade com a altura (de fortemente estável, junto à superfície, até aproximadamente neutro na camada residual). Com o amanhecer, uma nova camada de mistura evolui, alcançando pouco a pouco a altura dos poluentes emitidos durante a noite. Estes poluentes são rapidamente misturados e alcançam a superfície por efeito da intensificação da turbulência (Figura 3.5).

□

Figura 3.3: *Situação de dispersão da pluma em uma CLE, destacando a diminuição da estabilidade com a altura*
Fonte: Stull; 1988, p14. figura adaptada.

□

Figura 3.4: *Situação de dispersão da pluma sendo emitida durante a noite, onde existe a formação de uma Camada Residual sobreposta a uma CLE.*
Fonte: Stull; 1988, p18. figura adaptada.

□

Figura 3.5: *Situação de dispersão de uma pluma emitida em uma CLP noturna e interceptada pela evolução de uma Camada de Mistura*
Fonte: Stull; 1988, figura adaptada.

Quando a camada de mistura está formada, o processo de dispersão na CLP ocorre principalmente devido às circulações convectivas (termas) que formam regiões de fluxos de ar ascendente (áreas de updrafts) e regiões de fluxos de ar descendentes (áreas de downdrafts) (Figura 3.6). Enquanto as áreas de updrafts apresentam menor extensão espacial ($\approx$ 40%) e fluxo de ar mais intenso, as áreas de downdrafts apresentam maior extensão espacial ($\approx$ 60%) e fluxo de ar menos intenso. Esta configuração gera uma distribuição assimétrica positiva para a flutuação de velocidade vertical, determinando uma condição de turbulência não-Gaussiana. Neste caso, os poluentes emitidos na camada de mistura encontrarão as áreas de updrafts e downdrafts e exibirão uma característica de looping (Figura 3.6). Devido a forte mistura presente na CLC, o resultado final consiste em uma distribuição uniforme dos poluentes, independente da altura de emissão.

□

Figura 3.6: *Situação de dispersão em condições convectivas onde as termas formam regiões de updrafts e downdrafts*
Fonte: Stull; 1988, p12. figura adaptada.

3.1.2.1 Assimetria

A *assimetria* ou *Skewness* é o grau de desvio ou afastamento da simetria de uma distribuição. Se a curva de freqüência[1] de uma distribuição tem uma "cauda" mais longa à direita da ordenada máxima do que a esquerda, diz-se que a distribuição é *desviada para a direita*, ou que ela tem *assimetria positiva*. Se é o inverso que ocorre, diz-se que ela é *desviada para a esquerda*, ou que tem *assimetria negativa*. Além disso, esse tipo de curva é chamado *unimodal* por possuir um único máximo. Ver Figura 3.7.

□

Figura 3.7: *Curvas assimétricas*
Fonte: Schaum; 1993, p46. figura adaptada.

A assimetria presente na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés na CLC. Além disso, o acréscimo da assimetria em modelos de difusão leva em conta o efeito de transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes, considerando de um modo mais completo a estrutura da turbulência na Camada Limite Planetária. Dessa forma, é importante considerar a assimetria nestes modelos, ainda que, pouca discusão sobre ela é encontrada na literatura.

[1] É uma representação gráfica de distribuição de freqüência.

4 MODELO

Neste capítulo, apresenta-se a metodologia utilizada para a obtenção de uma solução analítica para a dispersão vertical a partir de uma fonte área. A solução é obtida utilizando a técnica da Transformada de Laplace sendo que a transformada inversa é obtida através do esquema numérico de quadratura Gaussiana.

4.1 Modelo para o estudo da dispersão de uma fonte área instantânea

Na aproximação Euleriana a dispersão é estudada em termos de uma equação diferencial baseada na conservação da massa do poluente considerado (equação de difusão-advecção), sendo resolvida em uma grade fixa no tempo e no espaço. A expressão para a aproximação Euleriana é:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U_\alpha \frac{\partial C}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(K_\alpha \frac{\partial C}{\partial x_\alpha}\right) + Q + R + D, \tag{4.1}$$

onde α pode assumir os valores $\alpha = 1,\ 2,\ 3$ representando, respectivamente, as direções x (zonal), y (meridional) e z (vertical), C é a concentração média, U_α é a velocidade média do vento, K_α é o coeficiente de difusão, Q é a taxa de emissão, R é a taxa de transformação química e D é a taxa de deposição.

Valores de concentração são calculados em cada um dos pontos da grade fixa, dessa forma para obter uma boa resolução do campo de concentração é necessária uma resolução de grade bastante fina. Quando se estuda a concentração de poluentes em geral, sem a preocupação com as reações químicas que ocorrem, os termos de transformação R e deposição D podem ser negligenciados na simulação dos processos de dispersão por modelos Eulerianos. No estudo de uma fonte área, o primeiro termo do lado direito da equação (4.1), termo que representa a taxa de advecção pelo vento médio, pode ser desprezado. Sendo assim, para resolver esta equação faz-se necessário determinar apenas os coeficientes de difusão. Como conseqüência, a principal dificuldade na utilização deste tipo de modelo é a determinação do parâmetro K_α.

Segundo Moura [39], um caso especial ocorre na dispersão de uma fonte área instantânea, isto é, na dispersão vertical de uma distribuição de concentração média de área, ficando a equação simplificada para:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \qquad 0 < z < h_{CLP}, \tag{4.2}$$

onde $\overline{w'c'}$ é o fluxo turbulento na vertical e h_{CLP} é a altura da Camada Limite Planetária.

Um modo de solucionar o problema de fechamento da equação (4.2) está baseado na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão molecular, assume que a turbulência é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média (Pasquill e Smith [46]):

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial C}{\partial z} \qquad 0 < z < h_{CLP}, \tag{4.3}$$

em que K_z é o coeficiente de difusão vertical (específico para cada tipo da CLP considerada).

A proposta desta dissertação é considerar a equação genérica para difusão turbulenta, isto é considerar termos adicionais na equação (4.3), conforme sugerido por van Dop [62]. O termo de contra-gradiente utilizado é mostrado na equação seguinte:

$$\left[1 + \left(\frac{S_k\, T_{L_w}\, \sigma_w}{2}\right)\frac{\partial}{\partial z} + \tau\frac{\partial}{\partial t}\right]\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial C}{\partial z}, \tag{4.4}$$

onde S_k é o Skewness, T_{L_w} é a escala de tempo Lagrangeana vertical, σ_w é a velocidade turbulenta vertical e τ é o tempo de relaxação.

Substituindo a equação (4.4) na equação (4.2) obtém-se:

$$\tau \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \frac{\partial C}{\partial t} + \left(\frac{S_k\, T_{L_w}\, \sigma_w}{2} \right) \frac{\partial^2 C}{\partial z\, \partial t} = K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}. \qquad (4.5)$$

Para resolver esta equação faz-se necessário determinar não apenas os coeficientes de difusão, como mensionado anteriormente, mas a escala de tempo Lagrangeana vertical, a velocidade turbulenta na vertical, a assimetria e o tempo de relaxação. Estes parâmetros são obtidos nos capítulos (6) e (7).

A equação (4.5) está relacionada a "equação do telégrafo" (Monin e Yaglom [36]), mediante a mudança de variável:

$$z' = z$$

$$t' = t + \frac{\beta}{2K_z},$$

assim

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 C}{\partial t'^2},$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t'},$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial z\, \partial t} = \frac{\partial^2 C}{\partial z'\, \partial t'} + \frac{\beta}{2K_z} \frac{\partial C}{\partial t'},$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 C}{\partial z'^2} + \frac{\beta}{K_z} \frac{\partial^2 C}{\partial z'\, \partial t'} + \frac{\beta^2}{4K_z^2} \frac{\partial C}{\partial t'},$$

sendo que $\beta = \dfrac{S_k\, T_{L_w}\, \sigma_w}{2}$.

Substituindo as derivadas acima na equação (4.5) obtém-se a *equação do telégrafo*:

$$\left(\tau + \frac{\beta^2}{4K_z}\right)\frac{\partial^2 C}{\partial t'^{\,2}} + \frac{\partial C}{\partial t'} = K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z'^{\,2}}, \tag{4.6}$$

a qual considera a difusão com velocidades finitas, o que representa uma descrição fisicamente correta do transporte turbulento.

A velocidade limitante v_a é expressa por:

$$v_a = \sqrt{\frac{K_z}{\left(\tau + \frac{\beta^2}{4K_z}\right)}}. \tag{4.7}$$

Observa-se que para o caso $\left(\tau + \dfrac{\beta^2}{4K_z}\right) \longrightarrow 0$, a equação (4.6) coincide com a equação de difusão que considera o fechamento da turbuência tradicional, o que conduz a uma velocidade de propagação infinita. Porém, para que a expressão anteriormente escrita tenda para zero é necessário que $\tau \longrightarrow 0$ e $S_k \longrightarrow 0$, isto significa excluir o termo de contra-gradiente adicionado a equação.

4.2 Método de resolução

Neste trabalho utiliza-se dois coeficientes de difusão turbulento, um específico para a CLC e outro para a CLE, ambos funções da altura (z), sendo estes coeficientes obtidos no capítulo (6). Tendo em vista a dependência de K_z com a altura, faz-se necessário discretizar a altura da CLP em N subcamadas (Vilhena et al. [65] e Moreira et al., [37]), de modo que dentro de cada uma delas K_z assuma um valor médio. Com a discretização, K_z passa a ser denominado K_n, uma vez que ele depende do meio n considerado.

A Figura (4.1) mostra um esquema que considera a CLP dividida em N subcamadas em que n^* representa a camada onde ocorre a emissão do poluente.

□

Figura 4.1: *Desenho esquemático da discretização da CLP*

Levando-se em consideração a discussão anterior, a equação (4.5) pode reescrita na seguinte forma:

$$\tau \frac{\partial^{\,2} C_n}{\partial t^{\,2}} + \frac{\partial C_n}{\partial t} + \left(\frac{S_k \, T_{L_{wn}} \, \sigma_{w_n}}{2} \right) \frac{\partial^{\,2} C_n}{\partial z \, \partial t} = K_n \frac{\partial^{\,2} C_n}{\partial z^{\,2}}, \tag{4.8}$$

com $\quad z_{n-1} \leq z \leq z_n \quad , \quad t > 0 \quad$ e $\quad n = 1,\, 2,\, \ldots, N.$

Para que o problema de difusão vertical seja resolvido, toma-se como fronteiras a superfície da terra e a altura da CLP, para as tais supõem-se que não há passagem de qualquer poluente, isto é, o fluxo é zero no solo e no topo da CLP. Com isso, a equação (4.8) fica sujeita ás condições de contorno:

$$k_n \frac{\partial C_n}{\partial z} = 0 \qquad\qquad em \;\; z = 0 \;\; e \;\; z = h_{CLP}. \tag{4.9}$$

Supõe-se também, contato perfeito entre as subcamadas nas quais a CLP foi dividida, sendo assim, consideram-se as condições de continuidade para a concentração e fluxo de concentração na interface, respectivamente:

$$C_n = C_{n+1} \qquad\qquad z = z_n \;\; e \;\; n = 1, 2, \ldots (N-1), \tag{4.10}$$

$$K_n \frac{\partial C_n}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z} \qquad z = z_n \;\; e \;\; n = 1, 2, \ldots (N-1). \tag{4.11}$$

A condição inicial:

$$C_n\,(z, 0) = Q\,\delta(z - H_s) \qquad\qquad em \;\; t = 0, \tag{4.12}$$

representa uma emissão instantânea de uma fonte área, onde $C_n\,(z,0)$ retrata a concentração média de poluentes no instante t igual a zero, Q é a taxa de emissão da fonte área localizada a uma altura H_s e δ é a função generalizada Delta de Dirac.

Portanto, a solução da equação (4.8), está relacionada à solução de N problemas do tipo:

$$\begin{cases} \tau \dfrac{\partial^2 C_n}{\partial t^2} + \dfrac{\partial C_n}{\partial t} + \left(\dfrac{S_k\, T_{L_{wn}}\, \sigma_{w_n}}{2} \right) \dfrac{\partial^2 C_n}{\partial z\, \partial t} = K_n \dfrac{\partial^2 C_n}{\partial z^2}, \\ \\ C_n\,(z,0) = Q\, \delta(z - H_s) \qquad\qquad em \;\; t = 0, \\ \\ k_n \dfrac{\partial C_n}{\partial z} = 0 \qquad\qquad\qquad\qquad em \;\; z = 0 \;\; e \;\; z = h_{CLP}, \end{cases} \tag{4.13}$$

com $z_{n-1} \leq z \leq z_n$, para $n = 1 : N$, onde C_n representa a concentração na enésima subcamada.

Para determinar as $2N$ constantes de integração, considera-se $(2N-2)$ condições de continuidade para a concentração (4.10) e fluxo de concentração na interface (4.11).

A partir deste momento, para facilitar a notação chama-se:

$$\beta_n = \left(\frac{S_k T_{L_{wn}} \sigma_{w_n}}{2} \right).$$

Para resolver a equação (4.13), aplica-se a Transformada de Laplace: $\mathcal{L}\left\{C_n(z,t); t \rightarrow s\right\}$, sendo que $\mathcal{L}$ denota a Transformada de Laplace. Segue abaixo os cálculos realizados:

$$\mathcal{L}\left\{ \tau \frac{\partial^2 C_n(z,t)}{\partial t^2} + \frac{\partial C_n(z,t)}{\partial t} + \beta_n \frac{\partial^2 C_n(z,t)}{\partial z\, \partial t} \right\} = \mathcal{L}\left\{ K_n \frac{\partial^2 C_n(z,t)}{\partial z^2} \right\}$$

$$\mathcal{L}\left\{ \tau \frac{\partial^2 C_n(z,t)}{\partial t^2} \right\} + \mathcal{L}\left\{ \frac{\partial C_n(z,t)}{\partial t} \right\} + \mathcal{L}\left\{ \beta_n \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial C_n(z,t)}{\partial t} \right) \right\} = \mathcal{L}\left\{ K_n \frac{\partial^2 C_n(z,t)}{\partial z^2} \right\}$$

$$\tau\,\mathcal{L}\left\{\frac{\partial^{\,2} C_n(z,t)}{\partial t^{\,2}}\right\}+\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C_n(z,t)}{\partial t}\right\}+\beta_n\,\frac{d}{dz}\mathcal{L}\left\{\frac{\partial C_n(z,t)}{\partial t}\right\}=K_n\,\frac{d^2}{dz^2}\left(\mathcal{L}\left\{C_n(z,t)\right\}\right)$$

$$\tau\left[s^2\mathcal{C}_n(z,s)-s\,C_n(z,0)-\frac{\partial C_n(z,0)}{\partial t}\right]+s\,\mathcal{C}_n(z,s)-C_n(z,0)+$$
$$\beta_n\,\frac{d}{dz}\left[s\,\mathcal{C}_n(z,s)-C_n(z,0)\right]=K_n\,\frac{d^2\mathcal{C}_n(z,s)}{dz^2}$$

$$K_n\frac{d^2\mathcal{C}_n(z,s)}{dz^2}-\beta_n s\frac{d\mathcal{C}_n(z,s)}{dz}-\left(\tau\,s^2+s\right)\mathcal{C}_n(z,s)=-\left(\tau\,s+1\right)C_n(z,0)-$$
$$\beta_n\,\frac{dC_n(z,0)}{dz}-\tau\frac{\partial C_n(z,0)}{\partial t}.$$

Considerando que:

$$\frac{dC_n(z,0)}{dz}=0 \qquad e \qquad \frac{\partial C_n(z,0)}{\partial t}=0,$$

então:

$$K_n\,\frac{d^2\mathcal{C}_n(z,s)}{dz^2}-\beta_n\,s\frac{d\mathcal{C}_n(z,s)}{dz}-\left(\tau\,s^2+s\right)\mathcal{C}_n(z,s)=-\left(\tau\,s+1\right)C_n(z,0),$$

dividindo a equação acima por K_n tem-se a equação diferencial linear não-homogênea com coeficientes constantes:

$$\frac{d^2\mathcal{C}_n(z,s)}{dz^2}-\frac{\beta_n\,s}{K_n}\,\frac{d\mathcal{C}_n(z,s)}{dz}-\frac{(\tau\,s^2+s)}{K_n}\,\mathcal{C}_n(z,s)=-\frac{(\tau\,s+1)}{K_n}\,C_n(z,0). \qquad (4.14)$$

A solução geral da equação (4.14), pode ser escrita da forma:

$$\mathcal{C}_n = \mathcal{C}_{n_h} + \mathcal{C}_{n_p}, \tag{4.15}$$

onde $\mathcal{C}_{n_h}$ é a *solução* da equação homogênea e $\mathcal{C}n_p$ é a *solução particular* associada a equação não-homogênea.

4.2.1 Solução homogênea

A equação homogênea associada à equação (4.14) é:

$$\frac{d^2\mathcal{C}_n(z,s)}{dz^2} - \frac{\beta_n\, s}{K_n}\,\frac{d\mathcal{C}_n(z,s)}{dz} - \frac{(\tau\, s^2 + s)}{K_n}\,\mathcal{C}_n(z,s) = 0. \tag{4.16}$$

Aplicando o método de resolução de equações diferenciais lineares homogêneas com coeficientes constantes, obtém-se a equação característica associada a equação (4.16):

$$\lambda^2 - \frac{\beta_n\, s}{K_n}\lambda - \frac{(\tau\, s^2 + s)}{K_n} = 0$$

assim

$$\lambda = \frac{\frac{\beta_n\, s}{K_n} \pm \sqrt{\left(\frac{\beta_n\, s}{K_n}\right)^2 - 4\,\left(-\frac{(\tau\, s^2+s)}{K_n}\right)}}{2}$$

daí segue que

$$\lambda = \frac{\beta_n\, s \pm \sqrt{(\beta_n\, s\,)^2 +\, 4\,K_n\,(\tau\, s^2 +\, s)}}{2\,K_n}.$$

Logo:

$$\mathcal{C}_{n_h} = A_n \exp\left[\frac{\beta_n\, s + \sqrt{(\beta_n\, s\,)^2 +\, 4\, K_n\, (\tau\, s^2 +\, s)}}{2\, K_n}\right] z + \\ B_n \exp\left[\frac{\beta_n\, s - \sqrt{(\beta_n\, s\,)^2 +\, 4\, K_n\, (\tau\, s^2 +\, s)}}{2\, K_n}\right] z. \tag{4.17}$$

Com o objetivo de facilitar a notação, chama-se:

$$F_n = \frac{\beta_n\, s}{2\, K_n} \quad e \quad R_n = \frac{\sqrt{(\beta_n\, s\,)^2 +\, 4\, K_n\, (\tau\, s^2 +\, s)}}{2\, K_n}.$$

4.2.2 Solução particular

A solução particular, $\mathcal{C}_{n_p}$, pode ser escrita como segue:

$$\mathcal{C}_{n_p} = \frac{\exp\left[(F_n + R_n)\, z\right]}{(F_n + R_n) - (F_n - R_n)} \left\{ \int_{z_n}^{z} \exp\left[-\,(F_n + R_n)\, z'\right] \mathcal{C}_n(z', 0)\, dz' \right\} \;+ \\ \frac{\exp\left[(F_n - R_n)\, z\right]}{(F_n - R_n) - (F_n + R_n)} \left\{ \int_{z_n}^{z} \exp\left[-\,(F_n - R_n)\, z'\right] \mathcal{C}_n(z', 0)\, dz' \right\}. \tag{4.18}$$

Cabe observar que as vantagens do método analítico decorre do fato de que as integrais que aparecem na equação (4.18) poderem ser calculadas analiticamente usando-se a propriedade da função generalizada delta de Dirac.

Aplicando-se a condição inicial descrita abaixo:

$$C_n(z, 0) = 0 \qquad \text{para} \qquad z \in n \neq n^*,$$

$$C_n(z, 0) = -\frac{(\tau\, s + 1)}{K_n}\, Q\, \delta(z - H_s) \qquad \text{para} \qquad z \in n^*,$$

na equação (4.18) obtêm-se:

$$\mathcal{C}_{n_p} = \frac{Q\,(\tau\, s+1)}{2R_nK_n}\left\{\exp\left[(F_n - R_n)\,z\right]\left(\int_{z_n}^{z}\exp\left[-\,(F_n - R_n)\,z'\right]\delta\,(z' - Hs)\,dz'\right)\right\} -$$

$$\frac{Q\,(\tau\, s+1)}{2R_nK_n}\left\{\exp\left[(F_n + R_n)\,z\right]\left(\int_{z_n}^{z}\exp\left[-\,(F_n + R_n)\,z'\right]\delta\,(z' - Hs)\,dz'\right)\right\}$$

$$= \frac{Q\,(\tau\, s+1)}{2R_nK_n}\left\{\exp\left[(F_n - R_n)\,z\right]\exp\left[-\,(F_n - R_n)\,H_s\right]\right\} -$$

$$\frac{Q\,(\tau\, s+1)}{2R_nK_n}\left\{\exp\left[(F_n + R_n)\,z\right]\exp\left[-\,(F_n + R_n)\,H_s\right]\right\},$$

daí segue que

$$\mathcal{C}_{n_p} = \frac{Q\,(\tau\, s+1)}{2R_nK_n}\left\{\exp\left[(F_n - R_n)\,(z - H_s)\right] - \exp\left[(F_n + R_n)\,(z - H_s)\right]\right\},$$

ainda:

$$R_a = 2R_nK_n = \sqrt{(\beta_n\, s\,)^2 +\ 4\,K_n\,(\tau\, s^2 +\ s)},$$

logo:

$$\mathcal{C}_{n_p} = \frac{(\tau\, s+1)\,Q}{R_a}\left\{\exp\left[(F_n - R_n)\,(z - H_s)\right] - \exp\left[(F_n + R_n)\,(z - H_s)\right]\right\}, \quad (4.20)$$

para $\quad z \in n^*.$

4.2.3 Solução geral

A partir das equações (4.17) e (4.20), tem-se que a solução geral da equação (4.14) é:

$$\mathcal{C}_n(z,s) = A_n\ \exp\left[(F_n + R_n)\, z\right] + B_n\ \exp\left[(F_n - R_n)\, z\right], \tag{4.21}$$

expressão válida para a subcamada que não contém a fonte e,

$$\mathcal{C}_n(z,s) = A_n\ \exp\left[(F_n + R_n)\, z\right] + B_n\ \exp\left[(F_n - R_n)\, z\right] + \frac{(\tau\, s + 1)\, Q}{R_a}\left\{\exp\left[(F_n - R_n)\,(z - H_s)\right] - \exp\left[(F_n + R_n)\,(z - H_s)\right]\right\}, \tag{4.22}$$

válida para a subcamada que contém a fonte.

Quando feito os limites, $\beta_n \longrightarrow 0$ e $\tau \longrightarrow 0$, tem-se que $F_n = 0$, $R_n = \sqrt{\dfrac{s}{K_n}}$ e $R_a = 2\sqrt{K_n\, s}$ o que resulta nas soluções tradicionais:

$$\mathcal{C}_n(z,s) = A_n\ \exp\left[R_n\, z\right] + B_n\ \exp\left[-R_n\, z\right],$$

expressão válida para a subcamada que não contém a fonte e,

$$\mathcal{C}_n(z,s) = A_n\ \exp\left[R_n\, z\right] + B_n\ \exp\left[-R_n\, z\right] + \frac{Q}{2R_a}\left\{\exp\left[-R_n\ (z - H_s)\right] - \exp\left[R_n\ (z - H_s)\right]\right\},$$

válida para a subcamada que contém a fonte.

Para se determinar as constantes A_n e B_n, aplica-se as condições de contorno (4.9) e as $(2N-2)$ condições (4.10) e (4.11):

$$\text{em } z = 0: \qquad K_1 \frac{\partial \mathcal{C}_1(0,s)}{\partial z} = 0$$

$$\text{em } z = z_1: \qquad \begin{cases} \mathcal{C}_1(z_1,s) = \mathcal{C}_2(z_1,s) \\ \\ K_1 \dfrac{\partial \mathcal{C}_1(z_1,s)}{\partial z} = K_1 \dfrac{\partial \mathcal{C}_2(z_1,s)}{\partial z} \end{cases}$$

$$\text{em } z = z_2: \qquad \begin{cases} \mathcal{C}_2(z_2,s) = \mathcal{C}_3(z_2,s) \\ \\ K_2 \dfrac{\partial \mathcal{C}_2(z_2,s)}{\partial z} = K_3 \dfrac{\partial \mathcal{C}_3(z_2,s)}{\partial z} \end{cases}$$

$$\text{em } z = z_3: \qquad \begin{cases} \mathcal{C}_3(z_3,s) = \mathcal{C}_4(z_3,s) \\ \\ K_3 \dfrac{\partial \mathcal{C}_3(z_3,s)}{\partial z} = K_4 \dfrac{\partial \mathcal{C}_4(z_3,s)}{\partial z} \end{cases}$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$

$$\text{em } z = z_{(N-1)}: \qquad \begin{cases} \mathcal{C}_{(N-1)}(z_{(N-1)},s) = \mathcal{C}_N(z_{(N-1)},s) \\ \\ K_{(N-1)} \dfrac{\partial \mathcal{C}_{(N-1)}(z_{(N-1)},s)}{\partial z} = K_N \dfrac{\partial \mathcal{C}_N(z_{(N-1)},s)}{\partial z} \end{cases}$$

$$\text{em } z = z_{h_{CLP}}: \qquad K_N \frac{\partial \mathcal{C}_N(z_{h_{CLP}},s)}{\partial z} = 0$$

Com as expressões obtidas acima chega-se a um sistema linear de dimensão ($\eta = 2N$) dado por: $\mathbf{M}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$,

onde:

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

$$
\mathbf{x} = \begin{bmatrix} A_1 & B_1 & A_2 & B_2 & A_3 & B_3 & \dots & A_\eta & B_\eta \end{bmatrix}^T
$$

$$
\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -Sp_{n^*} & -Sp'_{n^*} & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}^T,
$$

em que n^* indica a região de emissão, T representa que o vetor está transposto, Sp_{n^*} e Sp'_{n^*} são dados abaixo e representam a solução particular válida para a região de emissão e a sua derivada, respectivamente:

$$
Sp_{n^*} = \frac{(\tau\ s + 1)\, Q}{R_a} \Big[\exp\left[(F_{n^*} - R_{n^*})\,(z - H_s) \right] - \exp\left[(F_{n^*} + R_{n^*})\,(z - H_s) \right] \Big],
$$

$$
Sp'_{n^*} = \frac{(\tau\ s + 1)\, Q K_{n^*}}{R_a} \Big[(F_{n^*} - R_{n^*}) \exp\left[(F_{n^*} - R_{n^*})\,(z - H_s) \right] -
$$

$$
(F_{n^*} + R_{n^*}) \exp\left[(F_{n^*} + R_{n^*})\,(z - H_s) \right] \Big]
$$

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

$$
\begin{aligned}
M_{11} &= F_1 + R_1 \\
M_{12} &= F_1 - R_1
\end{aligned}
$$

e para $n = 1, 2, 3, ..., N$

$$
\begin{aligned}
M_{2n,2n-1} &= \exp\left[\left(F_n + R_n\right) z_n\right] \\
M_{2n,2n} &= \exp\left[\left(F_n - R_n\right) z_n\right] \\
M_{2n,2n+1} &= -\exp\left[\left(F_{n+1} + R_{n+1}\right) z_n\right] \\
M_{2n,2n+2} &= -\exp\left[\left(F_{n+1} - R_{n+1}\right) z_n\right] \\
M_{2n+1,2n-1} &= K_n\left(F_n + R_n\right)\exp\left[\left(F_n + R_n\right) z_n\right] \\
M_{2n+1,2n} &= K_n\left(F_n - R_n\right)\exp\left[\left(F_n - R_n\right) z_n\right] \\
M_{2n+1,2n+1} &= -K_{(n+1)}\left(F_{n+1} + R_{n+1}\right)\exp\left[\left(F_{n+1} + R_{n+1}\right) z_n\right] \\
M_{2n+1,2n+2} &= -K_{(n+1)}\left(F_{n+1} - R_{n+1}\right)\exp\left[\left(F_{n+1} - R_{n+1}\right) z_n\right]
\end{aligned}
$$

e, por fim:

$$
\begin{aligned}
M_{\eta,\,\eta-1} &= \left(F_N + R_N\right)\exp\left[\left(F_N + R_N\right) z_N\right] \\
M_{\eta,\,\eta} &= \left(F_N - R_N\right)\exp\left[\left(F_N - R_N\right) z_N\right]
\end{aligned}
$$

O sitema $\mathbf{M}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ é resolvido numericamente utilizando o método da *Eliminação de Gauss* [7]. O algoritmo foi executado na linguagem de programação FORTRAN 90 [28].

A variável complexa "s" está presente nos cálculos da resolução do sistema, para tanto, é substituída por $\dfrac{p_j}{t}$, onde p_j são as raízes da *Quadratura Gaussiana* [55] e t é o tempo. Esta substituição ficará mais clara na próxima seção.

4.2.4 Inversão da solução

Na seção anterior obteve-se (4.21) e (4.22) de forma analítica, porém a concentração de poluentes $C_n(z,t)$ é obtida invertendo $\mathcal{C}_n(z,s)$ numericamente.

4.2.4.1 Esquema da Quadratura de Gauss

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

$$F(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} f(s)ds, \qquad t > 0 \tag{4.27}$$

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

A integração em (4.27) deve ser efetuada ao longo de uma reta $s = \gamma$ no plano complexo, onde $s = a + bi$. O número real γ é escolhido de modo que $s = \gamma$ esteja à direita de todas as singularidades,mas, no mais, é arbitrário. Spiegel [54]

Esta integral pode ser representada, através do esquema da *Quadratura Gaussiana* [55], por:

$$F(t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} p^{-1} e^{p} f(p)dp = \sum_{i=1}^{N} w_i F(p_i), \tag{4.28}$$

onde w_i e p_i são, respectivamente, os pesos e as raízes da *Quadratura de Gauss*.

No problema sendo resolvido neste trabalho tem-se que:

$$C_n(z,t) = \mathcal{L}^{-1}\big\{\mathcal{C}_n(z,s)\big\}, \tag{4.29}$$

então,

$$C_n(z,t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st}\mathcal{C}_n(z,s)ds, \tag{4.30}$$

fazendo a mudança de variável:

$$st = p \quad \Rightarrow \quad s = \frac{p}{t} \qquad logo \qquad s \to \gamma + i\infty \quad \Rightarrow \quad p \to \gamma^* + i\infty$$

$$s \to \gamma - i\infty \quad \Rightarrow \quad p \to \gamma^* - i\infty$$

$$ds = \frac{1}{t}dp \qquad \text{e} \qquad \mathcal{C}_n(z,s) = \mathcal{C}_n\left(z, \frac{p}{t}\right)$$

assim a equação (4.30) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$C_n(z,t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma^*-i\infty}^{\gamma^*+i\infty} e^p\, \mathcal{C}_n\left(z, \frac{p}{t}\right)\frac{1}{t}\, dp, \tag{4.31}$$

$$t\, C_n(z,t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma^*-i\infty}^{\gamma^*+i\infty} e^p\, \mathcal{C}_n\left(z, \frac{p}{t}\right) dp, \tag{4.32}$$

fazendo ([2]):

$$G(p) = p\,\mathcal{C}_n\left(z, \tfrac{p}{t}\right) \quad \Rightarrow \quad \mathcal{C}_n\left(z, \tfrac{p}{t}\right) = G(p)\, p^{-1}$$

substituindo a igualdade acima em (4.32) e usando (4.28) tem-se:

$$t\, C_n(z,t) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\gamma^*-i\infty}^{\gamma^*+i\infty} e^p G(p) p^{-1} dp = \sum_{j=1}^{N_i} w_j\, G(p_j),$$

isto implica em

$$C_n(z,t) = \frac{1}{t}\sum_{j=1}^{N_i} w_j\, G(p_j), \tag{4.33}$$

mas

$$G(p_j) = p_j\, \mathcal{C}_n\left(z, \frac{p_j}{t}\right) \quad ,$$

portanto:

$$C_n(z,t) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{t} w_j \mathcal{C}_n\left(z, \frac{p_j}{t}\right). \tag{4.34}$$

Logo a solução geral procurada é:

$$C_n(z,t) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{t} \;\; w_j \;\; \Big\{ A_n \, \exp\left[(F_n^* + R_n^*)\, z \right] + B_n \, \exp\left[(F_n^* - R_n^*)\, z \right] \Big\}, \tag{4.35}$$

expressão válida para a subcamada que não contém a fonte e,

$$C_n(z,t) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{t} \;\; w_j \;\; \Big\{ A_n \exp\left[(F_n^* + R_n^*)\, z \right] + B_n \exp\left[(F_n^* - R_n^*)\, z \right] \; + \\ \frac{(\tau\, p_j + t)\, Q}{R_a^*} \Big[\exp\left[(F_n^* - R_n^*)\,(z - H_s) \right] - \exp\left[(F_n^* + R_n^*)\,(z - H_s) \right] \Big] \Big\}, \tag{4.36}$$

válida para a subcamada que contém a fonte. Onde,

$$F_n^* = \frac{\beta_n\, p_j}{2\, K_n\, t},$$

$$R_n^* = \frac{\sqrt{(\beta_n\, p_j\,)^2 + \; 4\, K_n\, p_j\, (\tau\, p_j + \; t)}}{2\, K_n\, t},$$

$$R_a^* = \sqrt{(\beta_n\, p_j\,)^2 + \; 4\, K_n\, p_j\, (\tau\, p_j + \; t)},$$

e j é o número de inversões. Neste trabalho foi utilizado $j = 8$ (Vilhena e Barichello [65] e Vilhena e Streck [66]).

A partir do modelo de difusão descrito neste capítulo, faz-se necessário para simular o campo de concentração superficial fornecido pelas soluções (4.35) e (4.36) as informações sobre taxa de emissão, altura da fonte, os elementos do termo de contra-gradiente e a componente vertical do coeficiente de difusão. Os primeiros dois parâmetros juntamente com o tempo de relaxação e a assimetria são obtidos no capítulo (7), no entanto o coeficiente de difusão, a escala de tempo Lagrangeana e a variância da velocidade serão obtidos nos próximos capítulos.

5 DERIVAÇÃO DOS PARÂMETROS TURBULENTOS

Neste capítulo apresenta-se a derivação dos parâmetros turbulentos necessários para a determinação do coeficiente de difusão, a escala de tempo Lagrangeana e a variância da velocidade turbulenta. Estes parâmetros são derivados da teoria estatística de Taylor, a qual está apresentada na próxima seção. Num segundo momento, é desenvolvido o conceito de espectro de energia Lagrangeana e sua relação com o coeficente de difusão. Finalmente, se estabelece a relação entre as escalas Lagrangeana e Euleriana.

5.1 Teoria Estatística de Taylor

A teoria estatítica de Taylor é aplicada na dispersão de um campo de turbulência homogêneo e estacionário, isto é, as propriedades estatísticas da turbulência são uniformes no espaço e estacionárias no tempo. Esta dispersão é fundamentada sobre a especificação de um volume de controle, definido como *elemento de fluido*, com dimensão característica muito maior que a escala molecular, mas em contra-partida muito menor que a escala de comprimento de Kolmogorov. Este *elemento de fluido* é considerado como parte do fluxo contínuo do processo de dispersão da CLP, e seu "centro" responde a todas as escalas de movimentos turbulentos. Supõem-se, ainda, que sua forma permanece intacta durante um intervalo de tempo relativamente grande se comparado com o intervalo de tempo considerado no processo de transporte e que, qualquer troca com o meio ou com sua vizinhança é sempre de natureza molecular. Os elementos do fluido são considerados passivos no escoamento turbulento, isto significa que eles não afetam o escoamento. Deste momento em diante utilizar-se-a a denominação partícula em vez de elemento de fluido.

Segundo Taylor [57], o movimento das partículas num campo de fluxo turbulento é determinado pelas flutuações de velocidade. Assim a posição arbitrária destes elementos, X_i, onde i indica a direção ($i = u, v, w$ e indicam respectivamente a direção horizontal, lateral e vertical), é dependente destas flutuações, conforme sugere a relação:

$$X_i(t) = \int_0^t v_i(t')\, dt'. \tag{5.1}$$

Fisicamente, a fórmula (5.1) é interpretada como: Se a partícula deixa a origem no tempo $t = 0$ a sua posição X_i em um tempo qualquer, t, é dado pela contribuição de todas as alterações de trajetórias ocasionadas pelas flutuações de velocidades ocorridas até este tempo t.

Um coeficiente de difusão pode ser obtido multiplicando a expressão (5.1) por $v_i(t)$,

$$X_i(t)\, v_i(t) = X_i(t)\, \frac{dX_i}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\, X_i^2\right) = \int_0^t v_i(t)\, v_i(t')\, dt'. \tag{5.2}$$

Tomando a média em (5.2) sobre um grande numero de experimentos independentes (uma longa série de abandonos de partículas), resulta:

$$\overline{X_i(t)\, v_i(t)} = \overline{X_i(t)\, \frac{dX_i}{dt}} = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\, \overline{X_i^2}\right) = \int_0^t \overline{v_i(t)\, v_i(t')}\, dt'. \tag{5.3}$$

A equação (5.3) possui a dimensão de uma difusibilidade (m^2/s) e $\overline{v_i(t)\, v_i(t')}$ representa a correlação entre as componentes i da velocidade turbulenta da partícula em dois instantes distintos, define-se então a função autocorrelação $R_{Li}(\epsilon)$ sendo esta uma função da diferença de tempos $\epsilon = t - t'$ e é expressa por:

$$R_{Li}(\epsilon) = \overline{v_i(t')\, v_i(t' + \epsilon)} = \overline{v_i^2}\, \rho_{Li}(\epsilon). \tag{5.4}$$

Logo a equação (5.4) representa a correlação entre a velocidade da partícula num tempo $v_i(t')$ e num tempo subseqüente $v_i(t'+\epsilon)$. A forma adimensional da função $\rho_{Li}(\epsilon)$ é chamada de coeficiente de correlação e satisfaz $\rho_{Li}(0)=1$. Este coeficiente pode ser entendido como um quantificador adimensional da capacidade da partícula preservar a memória do efeito de uma velocidade dada em um instante t' na composição da velocidade desta partícula em um tempo posterior a t'. O índice L refere ao fato destas correlações serem Lagrangeanas e suas medições serem feitas seguindo a partícula enquanto esta está sendo transportada ou levada pela turbulência.

A substituição da equação (5.4) na (5.3) resulta em:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \int_0^t R_{Li}(\epsilon)\,d\epsilon = \overline{v_i^2}\int_0^t \rho_{Li}(\epsilon)\,d\epsilon. \tag{5.5}$$

Integrando a equação (5.5) em relação ao um tempo t', tem-se:

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2}\int_0^t \left(\int_0^{t'} \rho_{Li}(\epsilon)\,d\epsilon\right)\,dt' \tag{5.6}$$

e fazendo uma integração por partes na equação (5.6):

$$\int_0^t \left(\int_0^{t'} \rho_{Li}(\epsilon)\,d\epsilon\right)\,dt' = \left| t'\int_0^{t'} \rho_{Li}(\epsilon)d\epsilon \right|_0^t - \int_0^t t'\rho_{Li}(t')dt'$$

$$= t\int_0^t \rho_{Li}(\epsilon)d\epsilon - \int_0^t \epsilon\,\rho_{Li}(\epsilon)d\epsilon.$$

Da mesma forma é possível reescrever a equação (5.6) como :

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2}\int_0^t (t-\epsilon)\,\rho_{Li}(\epsilon)\,d\epsilon. \tag{5.7}$$

As equações (5.5) e (5.7) definem os parâmetros de dispersão turbulento em termos da capacidade da partícula recordar da suas velocidades entre 0 e t, fato este justificado pela presença do coeficiente de correlação.

Uma outra definição muito usada neste trabalho e que esta relacionada ao coeficiente de correlação é a *escala de tempo integral lagrangeana*, T_{Li}, dada por:

$$T_{L_i} = \int_0^\infty \rho_{Li}(\epsilon)\, d\epsilon. \tag{5.8}$$

Esta escala representa o intervalo de tempo sob o qual existe a ação de auto-correlação da velocidade em dois momentos distintos, isto é, o intervalo de tempo máximo em que se verifica o efeito de memória no deslocamento das partículas. Deste fato relaciona-se:

$$\rho_{Li}(\epsilon) \approx 1 \qquad se \qquad \epsilon << T_{Li}, \tag{5.9}$$

$$\rho_{Li}(\epsilon) \approx 0 \qquad se \qquad \epsilon >> T_{Li}. \tag{5.10}$$

Ao considerar o tempo de viagem muito grande t, é conveniente re-escrever a equação (5.7) da seguinte forma:

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2}\,t \int_0^t \left(1 - \frac{\epsilon}{t}\right) \rho_{Li}(\epsilon)\, d\epsilon. \tag{5.11}$$

Se $t >> \epsilon$ então:

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2}\,t \int_0^t \rho_{Li}(\epsilon)\, d\epsilon, \tag{5.12}$$

onde ϵ é o tempo para o qual $\rho_{Li}(\epsilon) \approx 0$, isto indica que a relação (5.10) vale e assim a equação (5.12) passa ser:

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2}\,t\,T_{L_i}, \tag{5.13}$$

o que caracteriza um comportamento difusivo.

Do fato de $\epsilon >> T_{Li}$, o coeficiente de difusão em (5.5) pode ser aproximado por:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \sigma_i^2 \int_0^\infty \rho_{Li}\,(\epsilon)\,d\epsilon = \sigma_i^2\,T_{Li}, \tag{5.14}$$

onde $\sigma_i^2 \equiv \overline{v_i^2}$ é a variância de flutuação de velocidade. A relação (5.14) também pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \sigma_i\,l_{Li}, \tag{5.15}$$

com

$$l_{Li} = \sigma_i\,T_{Li}, \tag{5.16}$$

onde a escala de comprimento Lagrangeana, l_{Li}, pode ser interpretada como uma escala espacial na qual a partícula se move apenas em uma direção.

Verificando o comportamento assimptótico da equação (5.6) observa-se que para pequenos ϵ vale (5.9), assim:

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2} \int_0^t \left(\int_0^{t'} \rho_{Li}(\epsilon)\,d\epsilon\right)\,dt' = \overline{v_i^2}\,t^2. \tag{5.17}$$

As equações (5.5) e (5.14) definem coeficientes de difusão turbulentos. O coeficiente de difusão (5.5) depende do tempo de viagem t desde a fonte, porém para grandes tempos de viagem a equação (5.5) é idêntica a equação (5.14) e neste caso o coeficiente de difusão é independente do tempo de viagem (ou distância) da fonte e é apenas uma função da turbulência (isto é, do comprimento dos grandes turbilhôes e escalas de velocidade).

5.2 Relação entre o Espectro de Energia e o Coeficiente de Difusão

Define-se a função espectro de energia como a transformada de Fourier da função correlação; isto é, seja $R_{Li}(\epsilon)$ a função correlação Lagrangeana e Φ_{Li} o espectro de energia, portanto:

$$\Phi_{Li}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R_{Li}(\epsilon)\, e^{i\omega\epsilon}\, d\epsilon, \tag{5.18}$$

$$R_{Li}(\epsilon) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{Li}(\omega)\, e^{-i\omega\epsilon}\, d\omega. \tag{5.19}$$

O espectro $\Phi_{Li}(\omega)$ informa como a energia cinética é distribuída em função da freqüência $\omega = \dfrac{2\pi}{T} = 2\pi n$, onde T é o período de uma oscilação senoidal e n é a freqüência em Hertz.

Devido a estacionariedade tem-se que $R_{Li}(\epsilon) = R_{Li}(-\epsilon)$, isto é, R_{Li} é uma função par. Utilizando esta propriedade em (5.18) obtém-se:

$$\Phi_{Li}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} R_{Li}(\epsilon)\, (cos(\omega\epsilon) + i\, sen(\omega\epsilon))\; d\epsilon = \frac{2}{\pi} \int_{0}^{\infty} R_{Li}(\epsilon)\, cos(\omega\epsilon)\, d\epsilon, \tag{5.20}$$

lembrando que $sen(\omega\epsilon)$ é uma função ímpar.

De (5.20) verifica-se que $\Phi_{Li}(\omega)$ é uma função real e par. Então (5.19) pode ser reescrita como:

$$R_{Li}(\epsilon) = \int_{0}^{\infty} \Phi_{Li}(\omega)\, cos(\omega\epsilon)\, d\omega. \tag{5.21}$$

Mudando a freqüência expressa em radianos por segundo por $n = \dfrac{\omega}{2\pi}$ expressa em ciclos por segundo e introduzindo a função densidade espectral:

$$S_{Li}(n) = 2\pi \; \Phi_{Li}(2\pi n) \tag{5.22}$$

e reescreve-se (5.21) e (5.20) na forma, respectivamente:

$$R_{Li}(\epsilon) = \int_0^\infty \Phi_{Li} \; (2\pi n) \; cos(2\pi n\epsilon) \; 2\pi \; dn = \int_0^\infty S_{Li}(n) \; cos(2\pi n\epsilon) \; dn \tag{5.23}$$

e

$$S_{Li}(n) = 2\pi \; \Phi_{Li}(2\pi n) = 4\int_0^\infty R_{Li}(\epsilon) \; cos(2\pi n\epsilon) \; d\epsilon. \tag{5.24}$$

Para $\epsilon = 0$ em (5.23), tem-se:

$$\sigma_i^2 = R_{Li}(0) = \int_0^\infty S_{Li}(n) \; dn, \tag{5.25}$$

lembrando que $R_{Li}(0) = \overline{v_i^2} \equiv \sigma_i^2$ e $S_{Li}(n)dn$ representa uma contribuição para a variância da componente turbulenta da velocidade do vento no intervalo de freqüência entre n e $n + dn$. Portanto, integrando o espectro de energia sobre todas as freqüências tem-se a variância da velocidade turbulenta ou o dobro da energia cinética turbulenta por unidade de massa.

Para $n = 0$ em (5.24) obtém-se:

$$S_{Li}(0) = 4\int_0^\infty R_{Li}(\epsilon) \; d\epsilon. \tag{5.26}$$

Considera-se (5.4) , (5.8) e o fato de que $\overline{v_i^2} \equiv \sigma_i^2$ daí reescreve-se (5.26) como:

$$S_{Li}(0) = 4 \, \sigma_i^2 \; T_{Li}. \tag{5.27}$$

Para analisar de que forma diferentes freqüências contribuem para a dispersão turbulenta, substitui-se a expressão (5.23) em (5.7) e considerando a igualdade dada por (5.4), resulta em:

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2} \int_0^t (t-\epsilon) \left[\int_0^\infty F_{Li}(n)\, cos(2\pi n\epsilon)\, dn \right] d\epsilon$$

$$\overline{X_i^2} = 2\,\overline{v_i^2} \int_0^\infty \left[\int_0^t (t-\epsilon)\, cos(2\pi n\epsilon)\, d\epsilon \right] F_{Li}(n)\, dn$$

$$\overline{X_i^2} = \overline{v_i^2} \int_0^\infty F_{Li}(n) \left[\frac{1 - cos(2\pi nt)}{2(n\pi)^2} \right] dn$$

$$\overline{X_i^2} = \overline{v_i^2}\, t^2 \int_0^\infty F_{Li}(n)\, \frac{sen^2(n\pi t)}{(n\pi t)^2}\, dn, \tag{5.28}$$

onde $F_{Li}(n) = \dfrac{S_{Li}(n)}{\overline{v_i^2}}$ é o valor do espectro Lagrangeano de energia normalizado pela variância da velocidade, e a expressão $\dfrac{sen^2(n\pi t)}{(n\pi t)^2}$ é vista como um filtro, o qual seleciona faixas de freqüência da distribuição de energia cinética conforme o tempo de viagem, t, considerado.

Os coeficientes de difusão turbulentos (5.5) está relacionado com o parâmetro de dispersão generalizado (5.28) pela seguinte derivação Batchelor [3]:

$$K_\alpha = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\, \overline{X_i^2} \right),$$

então

$$K_\alpha = \frac{1}{2}\, \frac{\overline{v_i^2}}{\pi^2}\, \frac{d}{dt} \left[\int_0^\infty F_{Li}(n)\, \frac{sen^2(n\pi t)}{n^2}\, dn \right] = \frac{\pi\, \overline{v_i^2}}{\pi^2} \int_0^\infty F_{Li}(n)\, \frac{sen(n\pi t)\, cos(n\pi t)}{n}\, dn,$$

logo

$$K_\alpha = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \frac{\overline{v_i^2}}{2\pi}\int_0^\infty F_{Li}(n)\,\frac{sen(2n\pi t)}{n}\,dn, \tag{5.29}$$

de forma equivalente, reescreve-se:

$$K_\alpha = \overline{v_i^2}\,t\int_0^\infty F_{Li}(n)\,\frac{sen(2n\pi t)}{2\pi n t}\,dn. \tag{5.30}$$

Se t cresce, o filtro torna-se muito fino devido ao primeiro zero ocorrer para $n\pi t = \pi$, isto é, $n = t^{-1}$. Neste caso, o filtro seleciona as baixas freqüências, ocorridas em torno de $n \approx 0$ logo o valor do Espectro Lagrangeano de Energia mormalizado pela variância da velocidade é $F_{Li}(0)$, e em contrapartida descarta as contribuições de freqüências altas. Para grandes tempos de viagem ($t >> T_{Li}$), as integrais (5.28) e (5.29) podem serem aproximadas, respectivamente, como:

$$\overline{X_i^2} = \frac{\overline{v_i^2}}{\pi^2}\,F_{Li}(0)\int_0^\infty \frac{sen^2(n\pi t)}{(n)^2}\,dn,$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \frac{\overline{v_i^2}}{2\pi}\,F_{Li}(0)\int_0^\infty \frac{sen(2n\pi t)}{n}\,dn.$$

Resolvendo as integrais contidas nas equações acima e considerando a equação (5.27) resultam, respectivamente em:

$$\overline{X_i^2} = \frac{\sigma_i^2}{\pi^2}\,F_{Li}(0)\frac{\pi^2 t}{2} = 2\,\sigma_i^2\,T_{Li}\,t, \tag{5.31}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \frac{\sigma_i^2}{2\pi}\,F_{Li}(0)\frac{\pi}{2} = \sigma_i^2\,T_{Li}. \tag{5.32}$$

As expressões (5.31) e (5.32) mostra o comportamento do parâmetro de dispersão para grandes tempos de difusão e estes parâmetros são dependentes, basicamente, da energia cinética contida nos turbilhões de baixa freqüência.

Se $t \approx 0$ (e assim $t << T_{Li}$), tem-se que o primeiro zero do filtro ocorre para grandes frequências ($n \approx \infty$). Sendo o valor numérico do filtro, para este caso, considerado igual à unidade, pois do Limite Trigonométrico Fundamental, $\lim\limits_{t' \longrightarrow 0} \dfrac{sen(t')}{(t')} = 1$, conclui-se que:

$$\text{para } t \approx 0 \Longrightarrow \left(\frac{sen(n\pi t)}{\pi n t}\right)^2 \approx (1)^2 = 1 \quad e \quad \frac{sen(2n\pi t)}{2\pi n t} \approx 1,$$

logo as expressões (5.28) e (5.30) podem ser reescritas como:

$$\overline{X_i^2} = t^2 \int_0^\infty S_{Li}(n)\, dn \tag{5.33}$$

e

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = t \int_0^\infty S_{Li}(n)\, dn. \tag{5.34}$$

Finalmente, considerando a definição (5.25) obtêm-se:

$$\overline{X_i^2} = \sigma_i^2\, t^2 \tag{5.35}$$

e

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \sigma_i^2\, t \tag{5.36}$$

As expressões acima, (5.35) e (5.36), representam parâmetros difusivos para pequenos tempos de viagem, onde os turbilhões de alta freqüência tornam-se relevantes para o transporte difusivo.

Da análise acima, conclui-se que o coeficiente de difusão turbulento é inicialmente zero, aumentando com o tempo, primeiro linearmente e então mais lentamente e finalmente tende a um valor constante (Batchelor[3]). Este último valor constante assinptótico é apenas uma função daq turbulência; o coeficiente de difusão turbulento será o produto das escalas de comprimento dos grandes turbilhões e da velocidade. O aumento do coeficiente de difusão turbulento com o tempo deve-se ao fato de as flutuações da velocidade de baixas freqüências estarem se tornando mais efetivas na dispersão de cada elemento de fluido em relação a sua posição original.

5.3 Relação entre as escalas Lagrangeanas e Eulerianas

O parâmetros de dispersão derivados na seção anterior estão expressos em termos de grandezas Lagrangeanas. Uma medida Lagrangeana é efetuada quando uma pequena parcela do fluido é identificada e perseguida através do fluxo turbulento. Na descrição Lagrangeana o movimento das partículas contidas no fluido, é descrito a partir das coordenadas x, y e z em função do tempo. Outra forma de medida é a Euleriana, nela as propriedades do movimento turbulento são medidas por instrumentos cujas posições são fixas em relação ao fluxo. Como a difusão turbulenta é causada pela dispersão de pequenas parcelas de fluido, é conveniente descrevê-la na forma Lagrangeana. Porém na prática, apenas parâmetros estatísticos Eulerianos são medidos, dessa forma, faz-se necessária a investigação da relação entre quantidades Lagrangeanas e Eulerianas. Gifford [22] , Hay e Pasquill [26] assumem que as funções de correlação Lagrangeanas e Eulerianas são semelhantes na forma, mas que são deslocadas uma em relação a outra por um fator β_i $(i = u, v, w)$. Matematicamente esta suposição pode ser expressa como:

$$R_{Li}(\beta_i \epsilon) = R_i(\epsilon) \Longleftrightarrow R_{Li}(\epsilon) = R_i\left(\frac{\epsilon}{\beta_i}\right). \tag{5.37}$$

O parâmetro β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana,

$$\beta_i = \frac{T_{Li}}{T_i}, \tag{5.38}$$

onde T_i é a escala de tempo integral Euleriana.

Considerando as equações (5.24) , (5.4) e o fato de que F_{Li} é o espectro Lagrangeano normalizado pela variância da velocidade, a ver:

$$F_{Li}(n) = 4 \int_0^\infty \rho_{Li}(\epsilon)\, cos(2\pi n \epsilon)\, d\epsilon, \tag{5.39}$$

ao substituir a equação (5.37) em (5.39), é obtida a seguinte expressão para o espectro Euleriano :

$$F_i^E(n) = \frac{4}{\beta_i} \int_0^\infty \rho_i \left(\frac{\epsilon}{\beta_i}\right)\, cos\left(\frac{2\pi n \epsilon}{\beta_i}\right)\, d\epsilon, \tag{5.40}$$

e das equações (5.39) e (5.40) obtém-se a relação entre os espectros Lagrangeanos e Eulerianos, dada por:

$$n\, F_{Li}(n) = n\, \beta_i\, F_i^E(\beta_i\, n). \tag{5.41}$$

Utilizando a equação (5.41) nas equações (5.28) e (5.29),resultam, respectivamente:

$$\sigma_\alpha^2 = \overline{X_i^2} = \sigma_i^2\, t^2 \int_0^\infty \beta_i\, F_i^E(\beta_i\, n) \frac{sen^2(n\pi t)}{(n\pi t)^2}\, dn, \tag{5.42}$$

$$K_i = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\, \overline{X_i^2}\right) = \frac{\sigma_i^2}{2\pi} \int_0^\infty \beta_i\, F_i^E(\beta_i\, n)\, \frac{sen(2n\pi t)}{n}\, dn. \tag{5.43}$$

As equações (5.42) e (5.43) podem ser transformadas para (Batchelor [3], Pasquill e Smith [46] e Degrazia e Moraes [17]):

$$\sigma_\alpha^2 = \overline{X_i^2} = \frac{\sigma_i^2\, \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n)\, \frac{sen^2\left(\frac{n\pi t}{\beta_i}\right)}{n^2}\, dn, \tag{5.44}$$

$$K_i = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}\,\overline{X_i^2}\right) = \frac{\sigma_i^2\, \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n)\, \frac{sen\left(\frac{2n\pi t}{\beta_i}\right)}{n}\, dn. \tag{5.45}$$

Para grandes tempos de difusão ($t \to \infty$), a função filtro na integral (5.45) é muito limitada, pois o primeiro zero da função filtro ocorre em $2\pi nt/\beta_i = \pi$. Portanto $n = \beta_i/(2t) \to 0$, se t é muito grande. Neste caso $F_i^E(n) \approx F_i^E(0)$ (Sorbjan [53]), de modo que a taxa de dispersão torna-se independente do tempo de viagem e pode ser expressa como uma função das propriedades locais da turbulência, de forma que:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2\, \beta_i}{2\pi}\, F_i^E(0) \int_0^\infty \frac{sen\left(\frac{2\pi nt}{\beta_i}\right)}{n}\, dn, \tag{5.46}$$

onde $F_i^E(0)$ é o valor do espectro de energia Euleriano em $n = 0$.

A integral na equação (5.46) é igual a $\frac{\pi}{2}$, para $t > 0$. Assim, o coeficiente de difusão para grandes tempos assume a seguinte forma:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2\, \beta_i\, F_i^E(0)}{4}. \tag{5.47}$$

A partir da equação (5.47), conclui-se que a difusão para grandes tempos depende do comportamento do espectro próximo à origem.

Ainda, das equações (5.14) e (5.47), uma escala de tempo para a descorrelação Lagrangeana para a turbulência homogênea ou nâo-homogênea pode ser expressa como:

$$T_{Li} = \frac{\beta_i\, F_i^E(0)}{4}. \tag{5.48}$$

Além disso, das equações (5.16) e (5.48), a escala de comprimento Lagrangeana pode ser escrita como:

$$l_{Li} = \frac{\sigma_i \, \beta_i \, F_i^E(0)}{4}. \tag{5.49}$$

6 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA

Em problemas de dispersão atmosférica, a escolha de uma parametrização representa uma decisão fundamental para a modelagem da dispersão de poluentes. A partir de um ponto de vista físico, uma parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no sentido que os modelos matemáticos recebem uma relação aproximada que substitui um termo desconhecido. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados ao entendimento da CLP.

A seguir são apresentados as derivações dos coeficientes de difusão válidos para a CLC e para a CLE a partir dos coeficientes de difusão propostos no capítulo anterior, os quais são combinados com o espectro de energia cinética turbulenta, a fim de descrever a estrutura turbulenta destas camadas.

6.1 Coeficiente de difusão válido para para a Camada Limite Convectiva

A equação para o espectro da velocidade Euleriana sob condições instáveis, pode ser expressa como uma função de escalas convectivas como (Degrazia et al. [16]):

$$\frac{n\, S_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1.06\, c_i\, f\, \psi^{2/3} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3} \left[1 + 1.5\, \left(\frac{f}{(f_m^*)_i}\right)\right]^{5/3}}, \tag{6.1}$$

onde:

- $c_i = \alpha_i (0.5 \pm 0.05)\, (2\pi\kappa)^{-2/3}$ e $\alpha_i = 1, \dfrac{4}{3}, \dfrac{4}{3}$ para as componentes de direção do vento u, v e w, respectivamente (Champagne et al [11] e Sorbjan [53]); $\kappa = 0.4$ é a constante de von Karmam;

- $f = \dfrac{nz}{U(z)}$, z é a altura acima do solo e $U(z) = U$ é a velocidade média do vento horizontal;

- $(f_m^*)_i = \dfrac{z}{(\lambda_m)_i}$ é a freqüência adimensional do pico espectral, (Carvalho et al. [9]);

- z_i é o topo da camada limite convectiva;

- w_* é a escala de velocidade convectiva;

- $\psi = 1.5 - 1.2 \left(\dfrac{z}{z_i}\right)^{1/3}$ é a função de dissipação adimensional (Luhar e Britter [33]).

- $(\lambda_m)_w$ é o comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical que é relevante no estudo e na investigação do transporte turbulento na camada convectiva, (Carvalho et al. [9]):

$$(\lambda_m)_w = \begin{cases} \dfrac{z}{0.55 - 0.38\left|\frac{z}{L}\right|} & 0 \leq z \leq |L| \\ 5.9z & |L| \leq z \leq 0.1\, z_i \\ 1.8\, z_i \left[1 - e^{\left(\frac{-4z}{z_i}\right)} - 0.0003\, e^{\left(\frac{8z}{z_i}\right)}\right] & 0.1\, z_i < z \end{cases} \quad (6.2)$$

- L é o comprimento de Monin-Obukov.

Substituindo f em (6.1) e integrando a equação resultante sobre toda o domínio da freqüência tem-se:

$$\int_0^\infty S_i^E(n)dn = \frac{1.06\, c_i\, z\, \psi^{2/3}}{U\, (f_m^*)_i^{5/3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2 \int_0^\infty \left[1 + 1.5\left(\frac{z}{U\, (f_m^*)_i}\, n\right)\right]^{-5/3} dn, \quad (6.3)$$

assim a expressão da variância generalizada σ_i^2 é dada por:

$$\sigma_i^2 = 1.06\, c_i \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_i^{2/3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2, \quad (6.4)$$

sendo que pela equação (5.25) a primeira integral vale σ_i^2. A segunda integal tem como solução $\dfrac{U\,(f_m^*)_i}{z}$.

O valor do espectro de energia Euleriano normalizado pela variância da velocidade turbulenta pode ser expresso por:

$$F_i^E(n) = \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2} = \frac{z}{U\,(f_m^*)_i}\left[1 + 1.5\frac{f}{(f_m^*)_i}\right]^{-5/3}. \tag{6.5}$$

Consequentemente, em $n = 0$:

$$F_i^E(0) = \frac{z}{U\,(f_m^*)_i}. \tag{6.6}$$

De acordo com Degrazia et al. [15], β_i é dado por:

$$\beta_i = 0.55\frac{U}{\sigma_i}. \tag{6.7}$$

Assim substituindo as equações (6.6) e (6.7) em (5.47) chega-se a expressão para o coeficiente de difusão vertical:

$$K_\alpha = \frac{0.55}{4}\frac{\sigma_i\, z}{(f_m^*)_i}, \tag{6.8}$$

e a expressão para a escala de tempo de correlação Lagrangeana na CLC mostrada abaixo:

$$T_{Li} = \frac{0.55}{4}\frac{z}{\sigma_i\,(f_m^*)_i}, \tag{6.9}$$

é obtida a partir das equações (5.48), (6.6) e (6.7).

Nas figuras a seguir são apresentadas o comportamento das equações (6.8), (6.2), (6.4) e (6.9), com $c_w = 0.36$ e $i = w$, válidas para a CLC, respectivamente:

Figura 6.1: *Comportamento do coeficiente de difusão* ($K_z{}^* = K_z\, w_*/z_i$)*, do comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical* ($\lambda^* = (\lambda_m)_w/z_i$)*, da velocidade turbulenta vertical* ($\sigma^* = \sigma_w/w_*$) *e da escala de tempo integral Lagrangeana* ($TL^* = T_{L_w}\, w_*/z_i$)*, válido para a CLC, em função da altura* ($z^* = z/z_i$)*.*

6.2 Coeficiente de difusão válido para para a Camada Limite Estável

De acordo com a teoria local (Nieuwstadt [42] e Sorbjan [53]), a equação para o espectro da velocidade Euleriana sob condições estáveis, pode ser expressa como uma função de escalas locais como (Degrazia et al. [17]):

$$\frac{n\, S_i^E(n)}{U_*^2} = \frac{1.5\, c_i}{(f_m)_i^{5/3}}\, \frac{f}{q} \left[1 + \frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}} \left(\frac{f}{q} \right)^{5/3} \right]^{-1} \left(\frac{\phi_E}{q} \right)^{2/3}, \tag{6.10}$$

onde:

- $c_i = \alpha_i\, (2\pi\kappa)^{-2/3}$, α_i é derivado experimentalmente a partir do espectro para cada componentes de direção do vento. Sendo que c_i assume o valor é 0.3 para a componente u e 0.4 para as componentes v e w. $\kappa = 0.4$ é a constante de von Karmam;
- $f = \dfrac{nz}{U(z)}$, z é a altura acima do solo e $U(z) = U$ é a velocidade média do vento horizontal;
- $(f_m)_i$ é a freqüência do pico espectral da estratificação neutra;
- $q = \dfrac{(f_m^*)_i}{(f_m)_i}$ é uma função de estabilidade, em que $(f_m^*)_i$ é a freqüência adimensional do pico espectral;

- $U_*^2 = \left(1 - \dfrac{z}{h}\right)^{\vartheta_2} u_*^2$, onde U_* é a velocidade de fricção local, u_* é velocidade de fricção e h é a altura da CLE;

- $\phi_E = 1.25q$ é a função de dissipação adimensional;

Substituindo f e ϕ_E em (6.10) tem-se :

$$S_i^E(n) = \frac{1.74\, c_i}{(f_m)_i^{5/3}} \, \frac{U_*^2\, z}{Uq} \left[1 + \frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}} \, \left(\frac{z}{Uq}\right)^{5/3} n^{5/3}\right]^{-1},$$

integrando a equação acima sobre toda o domínio da freqüência:

$$\int_0^\infty S_i^E(n)\, dn = \frac{1.74\, c_i}{(f_m)_i^{5/3}} \, \frac{U_*^2\, z}{Uq} \int_0^\infty \left[1 + \frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}} \, \left(\frac{z}{Uq}\right)^{5/3} n^{5/3}\right]^{-1} dn, \qquad (6.11)$$

sendo que:

$$\int_0^\infty \left[1 + \frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}} \, \left(\frac{z}{Uq}\right)^{5/3} n^{5/3}\right]^{-1} dn = \frac{3}{5}\pi\, csc\left(\frac{2\pi}{5}\right) \left[\frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}} \left(\frac{z}{Uq}\right)^{5/3}\right]^{-1},$$

e pela equação (5.25) tem-se que a primeira integral vale σ_i^2. Logo a expressão da variância generalizada σ_i^2 é dada por:

$$\sigma_i^2 = \frac{2.7\, c_i\, U_*^2}{(f_m)_i^{2/3}}. \qquad (6.12)$$

O valor do espectro de energia Euleriano normalizado pela variância da velocidade turbulenta pode ser expresso por:

$$F_i^E(n) = \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2} = \frac{0.64}{(f_m)_i} \frac{z}{Uq} \left[1 + \frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}} \left(\frac{n\, z}{Uq}\right)^{5/3}\right]^{-1}. \qquad (6.13)$$

Consequentemente, em $n = 0$:

$$F_i^E(0) = \frac{0.64}{(f_m)_i}\frac{z}{Uq}. \tag{6.14}$$

Assim substituindo a equação (6.14) em (5.47) tem-se a expressão para o coeficiente de difusão:

$$K_\alpha = \frac{0.64}{4}\frac{\sigma_i^2\,\beta_i}{(f_m)_i}\frac{z}{Uq}, \tag{6.15}$$

e a expressão para a escala de tempo de correlação Lagrangeana na CLE mostrada abaixo:

$$T_{Li} = \frac{0.64}{4}\frac{\beta_i}{(f_m)_i}\frac{z}{Uq}, \tag{6.16}$$

é obtida a partir da equação (5.48) substituída pela (6.14).

De acordo com Degrazia et al. [15], β_i pode ser expresso como:

$$\beta_i = 0.55\frac{U}{\sigma_i}, \tag{6.17}$$

e por Sorbjan [52],

$$q = 1 + 3.7\frac{z}{\Lambda},$$

onde Λ é o comprimento de Monin-Obukov local (Nieuwstadt [42]) dado por:

$$\Lambda = \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1.5\vartheta_1 - \vartheta_2} L,$$

L é o comprimento de Monin-Obukov, ϑ_1 e ϑ_2 são constantes que dependem do estado de evolução da CLE.

Nas figuras a seguir são apresentadas o comportamento das equações (6.15), (6.12) e (6.16), com $i = w$, isto é, na vertical, respectivamente:

Figura 6.2: *Comportamento do coeficiente de difusão* ($K_z{}^* = K_z\, u_*/h$), *da velocidade turbulenta vertical* ($\sigma^* = \sigma_w/u_*$) *e da escala de tempo integral Lagrangeana* ($TL^* = T_{L_w}\, u_*/h$), *válido para a CLE, em função da altura* ($z^* = z/h$).

7 RESULTADOS NUMÉRICOS

A partir do modelo de difusão descrito no capítulo (4) simula-se a dispersão de poluentes a partir de uma fonte área descrita pelas soluções (4.35) e (4.36). Analisam-se dois casos de transporte turbulento, um diurno e outro noturno, sendo que o primeiro refere-se ao caso convectivo e último ao caso estável.

Para cada caso mensionado acima, obtém-se o valor da concentração em diferentes alturas, lembrando que, a CLP foi discretizada em N subcamadas de $10\,m$ cada. Adicionalmente, analisam-se fontes áreas em diversas alturas. Para cada situação faz-se uma análise da influência do termo de contragradiente adicionado ao modelo, principalmente o componente que representa a assimetria.

Na última seção é feita uma comparação entre o modelo obtido neste trabalho e a solução Gaussiana.

A linguagen usada para a implementação do algoritmo foi FORTRAN 90 [28], por ser adquada para problemas numéricos com grande qualidade de cálculos. Na Figura 7.1 apresenta-se um fluxograma do código computacional, mostrando de forma simplificada como o problema foi resolvido.

Figura 7.1: *Fluxograma do código computacional.*

7.1 Camada Limite Convectiva

7.1.1 Dados experimentais

Para simular valores de concentração a partir da solução obtida para o modelo proposto, emprega-se o experimento de dispersão realizado na cidade de Copenhagen, este experimento é descrito nos artigos de Gryning e Lyck [25] e Gryning [24].

Na Tabela (7.1) são exibidos os dados micrometeorológicos do experimento de dispersão na Camada Limite Convectiva de Compenhagen, que são utilizados no modelo.

Tabela 7.1: *Parâmetros micrometeorológicos do experimento* 8 *de Compenhagen*

$U\ (m/s)$	$u_*\ (m/s)$	$L\ (m)$	$w_*\ (m/s)$	$z_i\ (m)$	$\frac{z_i}{\vert L\vert}$
$9,4$	$0,69$	-56	$2,2$	810	$14,46$

A taxa de emissão de uma fonte área instantânea utilizada foi de $Q = 100g/m^3$. A razão $\frac{z_i}{|L|} > 10$ representa uma CLC fortemente convectiva.

7.1.2 Simulações realizadas

Todas as simulações foram feitas para o período de tempo de $t = 1h$. O tempo de relaxação considerado é $\tau = 0,5\,s$ conforme sugerido por van Dop [62]. A Tabela 7.2 mostra os demais valores utilizados.

Tabela 7.2: *Dados utilizados na simulação da concentração na CLC*

Assimetria	$-0,5$	$0,0$	$0,5$	$1,0$
Altura (z)	$1\,m$	$750\,m$		
Fonte (H_s)	$25\,m$	$115\,m$	$305\,m$	

Os valores assumidos para a simetria representam, respectivamente:

- uma assimetria moderada e negativa, isto representa que ocorre mais "updrafts" do que "downdrafts";
- simétrico;
- uma assimetria moderada e positiva, isto representa que ocorre mais "downdrafts" do que "updrafts";
- uma assimetria moderada a elevada e positiva, isto representa que ocorre mais "downdrafts" do que "updrafts".

Os resultados apresentados no decorrer da seção estão adimensionalizados da seguinte forma:

Tabela 7.3: *Adimensionalizações para CLC*

$C^* = C\,\dfrac{z_i}{Q}$	$t^* = t\,\dfrac{w_*}{z_i}$	$H_s^* = \dfrac{H_s}{z_i}$	$z^* = \dfrac{z}{z_i}$

A seguir são apresentados os gráficos referentes as simulações efetuadas para z próximo do solo em três diferentes alturas de fonte área.

Figura 7.2: *Evolução temporal da concentração para diferentes assimetrias com* $H_s^* = 0,37$ *em* $z^* = 0,001$.

Nota-se que, para t^* pequeno (em torno de de 1) ocorre uma mínima influência da assimetria nos valores das concentrações. Quando t^* está entre valores em torno de 1 a $3,5$ esta influência aumenta, sendo que as concentrações máximas encontradas são:

para	$Sk = -0,5$	em	$t^* = 2,32$	e	$C^* = 1,036$
para	$Sk = 0,0$	em	$t^* = 2,09$	e	$C^* = 1,068$
para	$Sk = 0,5$	em	$t^* = 1,92$	e	$C^* = 1,112$
para	$Sk = 1,0$	em	$t^* = 1,86$	e	$C^* = 1,176$

depois deste intervalo a influência da assimetria é praticamente nula e a concentração tende a se homogeneizar.

Figura 7.3: *Evolução temporal da concentração para diferentes assimetrias com* $H_s^* = 0,14$ *em* $z^* = 0,001$

Neste caso, a mínima influência da assimetria nos valores das concentrações ocorre, novamente, para t^* pequeno (em torno de de $0,5$) . Quando t^* esta entre valores em torno de $0,5$ a 5 ocorre a maior influência da assimetria, sendo que as concentrações máximas encontradas são:

para	$Sk = -0,5$	em	$t^* = 0,99$	e	$C^* = 1,806$
para	$Sk = 0,0$	em	$t^* = 0,96$	e	$C^* = 1,915$
para	$Sk = 0,5$	em	$t^* = 0,93$	e	$C^* = 2,045$
para	$Sk = 1,0$	em	$t^* = 0,92$	e	$C^* = 2,213$

depois deste intervalo a influência da assimetria é praticamente nula e a concentração tende a se homogeneizar.

Figura 7.4: *Evolução temporal da concentração para diferentes assimetrias com* $H_s^* = 0,03$ *em* $z^* = 0,001$

Neste caso, para uma fonte baixa, a influência da assimetria nos valores das concentrações é praticamente nula, observando apenas uma pequena alteração nos máximos, sendo que as concentrações máximas encontradas são:

para $Sk = -0,5$ em $t^* = 0,35$ e $C^* = 7,619$

para $Sk = 0,0$ em $t^* = 0,35$ e $C^* = 8,00$

para $Sk = 0,5$ em $t^* = 0,35$ e $C^* = 8,464$

para $Sk = 1,0$ em $t^* = 0,35$ e $C^* = 9,056$

neste caso encontrou-se os maiores valores para a concentração, o que era esperado, pois a fonte é baixa e a simulação foi realizada para z próximo ao solo. Observa-se também que os máximos ocorreram para o mesmo tempo.

A seguir são apresentados os gráficos referentes as simulações efetuadas para z próximo ao topo da CLC em três diferentes alturas de fonte área.

Figura 7.5: *Evolução temporal da concentração para diferentes assimetrias com* $H_s^* = 0,37$ *em* $z^* = 0,925$.

Na Figura (7.5), pode-se verificar que para t^* pequeno (em torno de $1,5$) ocorre a máxima influência da assimetria nos valores das concentrações, depois esta influência praticamente desaparece e a concentração tende a se homogeneizar. Obtevê-se as concentrações máximas:

para	$Sk = -0,5$	em	$t^* = 4,23$	e	$C^* = 1,005$
para	$Sk = 0,0$	em	$t^* = 4,79$	e	$C^* = 0,992$
para	$Sk = 0,5$	em	$t^* = 9,77$	e	$C^* = 0,997$
para	$Sk = 1,0$	em	$t^* = 9,77$	e	$C^* = 1,001$

Figura 7.6: *Evolução temporal da concentração para diferentes assimetrias com* $H_s^* = 0,14$ *em* $z^* = 0,925$.

Na Figura (7.6), pode-se verificar que o intervalo onde ocorrem a máxima influência da assimetria nos valores das concentrações é maior que no caso anterior, porém, permanece a tendência da influência da assimetria desaparecer e da concentração tender a se homogeneizar. Obtevê-se as concentrações máximas:

para	$Sk = -0,5$	em	$t^* = 7,80$	e	$C^* = 1,007$
para	$Sk = 0,0$	em	$t^* = 7,25$	e	$C^* = 1,000$
para	$Sk = 0,5$	em	$t^* = 7,42$	e	$C^* = 0,997$
para	$Sk = 1,0$	em	$t^* = 7,91$	e	$C^* = 0,998$

Figura 7.7: *Evolução temporal da concentração para diferentes assimetrias com* $H_s^* = 0,03$ *em* $z^* = 0,925$.

Na Figura (7.7), verificar-se que o intervalo onde ocorre a máxima influência da assimetria nos valores das concentrações é maior que nos dois casos anteriores. Obtevê-se as concentrações máximas:

para	$Sk = -0,5$	em	$t^* = 9,77$	e	$C^* = 1,008$
para	$Sk = 0,0$	em	$t^* = 9,43$	e	$C^* = 1,004$
para	$Sk = 0,5$	em	$t^* = 8,50$	e	$C^* = 1,000$
para	$Sk = 1,0$	em	$t^* = 8,31$	e	$C^* = 0,998$

Observa-se que para o caso em que a simulação realizada em alturas elevadas, a influência da assimetria ocorreu para o primeiro caso em $t^* < 1$, no segundo para $t^* < 4$ e para o último em $t^* < 5$. As concentrações nos três casos tenderam a se homogeneizar em torno de $C^* = 1,000$.

7.2 Camada Limite Estável

7.2.1 Dados experimentais

Para simular a concentração de contaminante na CLE, utilizam-se os parâmetros relacionados na Tabela (7.4) (Moura[39]):

Tabela 7.4: *Valores utilizados para as constantes no cálculo da componente vertical do coeficiente de difusão válido para a Camada Limite Estável*

constante	Valor	referência
u_*	$0,31\,m/s$	Experimento de Minnesota (Caughey et al.[10])
$\|L\|$	$116\,m$	Experimento de Minnesota (Caughey et al.[10])
ϑ_1	2	Experimento de Minnesota (Caughey et al.[10])
ϑ_2	3	Experimento de Minnesota (Caughey et al.[10])
$(f_m)_w$	$0,33$	Sorbjan [52]
c_w	$0,4$	Sorbjan [52]

Os valores para u_* e $|L|$ (medidos), ϑ_1 e ϑ_2 (calculados), foram extraídos (como mostra a tabela) das medidas feitas em Minnesota, quando processos evolutivos não estacionários ainda estavam presentes. As medidas em Minnesota foram realizadas entre $18h50min$ e $20h05min$, este é um período de transição de uma camada convectiva para uma estável.

A altura da Camada Limite Estável, $h = 400m$, foi obtida dos dados do experimento de Minnesota. A taxa de emissão da fonte área instantânea utilizada foi de $Q = 400g/m^3$. (Moura [39])

7.2.2 Simulações realizadas

Todas as simulações foram feitas para o período de tempo de $t = 12h$. O tempo de relaxação considerado é $\tau = 0,5\,s$ conforme sugerido por van Dop [62]. A Tabela 7.5 mostra os demais valores utilizados.

Os resultados apresentados no decorrer da seção estão adimensionalizados como mostra a Tabela 7.6:

Tabela 7.5: *Dados utilizados na simulação da concentração na CLE*

Assimetria	$-0,5$	$0,0$	$0,5$	$1,0$
Altura (z)	$1\,m$	$300\,m$		
Fonte (H_s)	$12,5\,m$	$75\,m$	$215\,m$	

Tabela 7.6: *Adimensionalização para CLE*

$C^* = C\,\dfrac{h}{Q}$	$t^* = t\,\dfrac{u_*}{h}$	$H_s^* = \dfrac{H_s}{h}$	$z^* = \dfrac{z}{h}$

O gráficos a seguir refere-se as simulações efetuadas para z próximo do solo em três diferentes alturas de fonte área.

Figura 7.8: *Evolução temporal da concentração para diferentes alturas de fonte área em* $z^* = 0,0025$.

Nota-se que, para $t^* < 15$ o gráfico mostra que há variação nos valores das concentrações, a partir deste tempo os valores de concentração média à superfície permanecem praticamente constantes. Observa-se também, que quando a altura da fonte aumenta a concentração diminui.

Apesar das simulações terem sido feitas até $t = 12h$, na Figura (7.9) os resultado para $H_s^* = 0,03$ é apresentado até $t = 1h$ para uma melhor visualização do comportamento da variação da concentração neste horário.

Figura 7.9: *Evolução temporal da concentração para* $H_s^* = 0,03$ *e* $z^* = 0,0025$.

O gráfico a seguir refere-se às simulações efetuadas para z próximo ao topo da CLE em três diferentes alturas de fonte área.

Figura 7.10: *Evolução temporal da concentração para diferentes alturas de fonte área em* $z^* = 0,75$.

Na Figura (7.10), verifica-se que para tempos $t^* < 20$ os valor da concentração média à superfície tende a permanecer constante. Além do mais, à medida que a altura da fonte aumenta a homogeinização da concentração ocorre mais rapidamente.

Na CLE verificou-se uma mínima influência nos valores de concentração por parte das assimetrias dadas na Tabela (7.5). Este fato pode ser comprovado fazendo-se a comparação entre as concentrações máximas, as quais são relacionadas nas tabelas a seguir:

Tabela 7.7: *Concentrações máximas para* $H_s^* = 0,03$ *em* $z^* = 0,0025$

S_k	t^*	C^*
$-0,5$	$4,65$	$12,699$
$0,0$	$4,65$	$12,973$
$0,5$	$4,26$	$13,220$
$1,0$	$3,87$	$12,931$

Tabela 7.8: *Concentrações máximas para* $H_s^* = 0,18$ *em* $z^* = 0,0025$

S_k	t^*	C^*
$-0,5$	$0,62$	$2,486$
$0,0$	$0,62$	$2,507$
$0,5$	$0,62$	$2,527$
$1,0$	$0,61$	$2,546$

Tabela 7.9: *Concentrações máximas para* $H_s^* = 0,53$ *em* $z^* = 0,0025$

S_k	t^*	C^*
$-0,5$	$6,21$	$1,047$
$0,0$	$6,24$	$1,051$
$0,5$	$6,27$	$1,055$
$1,0$	$6,32$	$1,059$

Tabela 7.10: *Concentrações máximas para* $H_s^* = 0,03$ *em* $z^* = 0,75$

S_k	t^*	C^*
$-0,5$	$16,89$	$0,9795$
$0,0$	$16,89$	$0,9792$
$0,5$	$16,89$	$0,9789$
$1,0$	$16,89$	$0,9787$

Tabela 7.11: *Concentrações máximas para* $H_s^* = 0,18$ *em* $z^* = 0,75$

S_k	t^*	C^*
$-0,5$	$16,89$	$0,9769$
$0,0$	$16,89$	$0,9766$
$0,5$	$16,89$	$0,9763$
$1,0$	$16,89$	$0,9762$

Tabela 7.12: *Concentrações máximas para* $H_s^* = 0,53$ *em* $z^* = 0,75$

S_k	t^*	C^*
$-0,5$	$1,29$	$1,181$
$0,0$	$1,24$	$1,183$
$0,5$	$1,20$	$1,183$
$1,0$	$1,16$	$1,183$

7.3 Solução Gaussiana

A função de distribuição Gaussiana ou normal fornece uma solução fundamental para a equação de difusão de Fick. Devido a sua simplicidade, é um dos modelo de dispersão mais utilizado. A relação entre a taxa de emissão e a concentração em um determinado ponto no espaço é obtida analiticamente e não requer a utilização de grandes recursos computacionais. Estes modelos são também utilizados para estimar as concentrações médias sobre longos períodos de tempo. Neste caso, a concordância entre valores de concentração previstos e observados pode ser bastante satisfatória contanto que o campo meteorológico não apresente freqüentes variações na direção vertical.

A solução Gaussiana para a equação de difusão, sujeita a condição inicial $C(z,0) = Q\,\delta(z - H_s)$, é expressa por:

$$C(z,t) = \frac{Q}{\sqrt{4\pi K_z t}} \exp\left[-\frac{(z - H_s)^2}{4K_z t}\right] \tag{7.1}$$

onde Q é a taxa de emissão do poluente, H_s é a altura da fonte e K_z é o coeficiente de dispersão na vertical constante. (Masoliver e Weiss [34])

Nas figuras (7.11) e (7.12) são feitas as comparações entre as concentrações obtidas a partir da solução do modelo proposto neste nete trabalho (a partir deste momento será referido apenas como modelo) e a solução Gaussiana, no período de $t = 1h$ e para alturas próximas ao solo. O primeiro gráfico refere-se a comparação feita na CLC e o último na CLE.

Figura 7.11: *Evolução temporal* ($t^* = t\,w_*/z_i$) *da concentração* ($C^* = C\,z_i/Q$) *para diferentes modelos de dispersão, na altura do solo.*

Na Figura (7.11) observa-se que a solução Gaussiana apresenta uma concentração menor que a dada pelo modelo para todas as assimetrias. Para $t^* < 5$ a menor diferença entre os modelos ocorre quando $Sk = -0.5$, para t^* maior que este valor a menor diferença ocorre quando $Sk = 1,0$. As concentrações máximas são:

$$\text{Modelo} \begin{cases} \text{para} & Sk = -0,5 & \text{em} & t^* = 0,99 & \text{e} & C^* = 1,806 \\ \text{para} & Sk = 0,0 & \text{em} & t^* = 0,96 & \text{e} & C^* = 1,915 \\ \text{para} & Sk = 0,5 & \text{em} & t^* = 0,93 & \text{e} & C^* = 2,045 \\ \text{para} & Sk = 1,0 & \text{em} & t^* = 0,92 & \text{e} & C^* = 2,213 \end{cases}$$

$$\text{Modelo Gaussiano} \qquad \text{em} \quad t^* = 0,54 \quad \text{e} \quad C^* = 1,719$$

Isto equivale a uma diferença de aproximadamente $4,81\%$ para $Sk = -0,5$, $10,23\%$ para $Sk = 0,0$, $15,94\%$ para $Sk = 0,5$ e $22,32\%$ para $Sk = 1,0$.

Figura 7.12: *Evolução temporal* ($t^* = t\, u_*/h$) *da concentração* ($C^* = C\, h/Q$) *para diferentes modelos de dispersão, na altura do solo.*

Na Figura (7.12) observa-se, também, que a solução Gaussiana apresenta uma concentração menor que a dada pelo modelo, sendo que as concentrações máximas são:

Modelo em $t^* = 8,13 \times 10^{-2}$ e $C^* = 13,223$

Solução Gaussiana em $t^* = 4,26 \times 10^{-2}$ e $C^* = 8,415$

Isto equivale a uma diferença de aproximadamente $36,36\%$.

8 CONCLUSÕES

Neste trabalho obteve-se uma solução analítica para a equação unidimensional transiente aplicada na determinação da concentração de poluentes atmosféricos representada por uma fonte área instantânea. Na solução da equação foi utilizada a técnica da Transformada de Laplace considerando-se a CLP como um sistema multicamadas, o que permite simular turbulência não-homogênea representada por perfis contínuos dos parâmetros turbulentos.

Na análise dos resultados observou-se para o caso convectivo que a utilização da equação genérica para a difusão turbulenta no fechamento da turbulência influenciou os valores de concentração tanto para alturas próximas ao solo quanto às próximas do topo da CLC. Verificou-se no primeiro caso (alturas próximas do solo) que para tempos pequenos a influência tende a aumentar à medida que a altura da fonte usada é aumentada. Os intervalos onde ocorrem os valores máximos de concentração tendem diminuir quando a altura da fonte é menor. Para a fonte mais baixa obteve-se a concentração mais alta e, em contra-partida, observou-se a menor influência da assimetria. Para as três alturas de fonte área analisada a concentração tendeu a se homogeneizar com o passar do tempo. Para alturas próximas do topo da CLC a influência da assimetria não ocorreu nos valores máximos de concentração, como no caso anterior, mas sim a concentração tendeu a se homogeneizar nestes valores. A influência da assimetria aumenta à medida que a altura da fonte diminui e, quanto mais alta é a fonte, mais rápido ocorre a homogeneização da concentração.

No caso de dispersão de poluentes na CLE, observou-se uma insignificante influência da assimetria no cálculo da concentração, tanto para alturas tanto para alturas próximas ao solo quanto às próximas do topo da CLE. Verificou-se que para alturas próximas do solo à medida que a fonte aumenta a concentração diminui, mas quando esta altura é elevada à concentração também aumenta. Concluiu-se que para ambos os casos analisados a concentração tendeu a se homogeneizar com o passar do tempo. A influência da assimetria na CLE é menos importante devido ao fato da turbulência nesta região ser gerada somente pelo cisalhamento do vento.

Na comparação entre o modelo proposto neste trabalho e um modelo Gaussiano, pode-se concluir que a concentração obtida para o modelo Gaussiano foi menor que a do modelo desenvolvido em todas as situações analisadas, sendo que a maior diferença ocorreu na CLE. Para a CLC, a menor diferença ocorreu para a menor assimetria até a metade do período de tempo admitido, depois houve uma inversão e esta diferença ocorreu para a maior assimetria. È importante salientar que a diferença fundamental está relacionada ao fato que no modelo proposto utiliza-se turbulência não-homogênea e no modelo Gaussiano o coeficiente de difusão é constante para toda a CLP.

Finalmente, pode-se salientar que o método empregado é de fácil implementação e mostrou-se eficiente para o problema estudado, uma vez que apresentou resultados coerentes com o disponível na literatura. O acréscimo do termo de contra-gradiente na equação não gerou esforço computacional adicional. O objetivo proposto para este trabalho foi alcançado, uma vez que o método apresentou uma solução analítica para o modelo de dispersão unidimensional transiente, estudou o processo de dispersão de poluentes na CLC e na CLE e investigou o efeito do termo de contra-gradiente inserido no modelo.

9 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O aprendizado e a experiência obtidos na elaboração desse trabalho são úteis e servem de base para futuros trabalhos. Perspectivas para a continuação desse trabalho:

- usar o método de inversão a NLTI, Numerical Laplace Transform Inversion, sugerido por Ganapol e Furfaro ([20]); pretende-se com isso verificar a eficiência e a rapidez da simulação numérica.

- testar o modelo utilizando uma fonte exponencial dependente do tempo;

BIBLIOGRAFIA

[1] Barad, M. L. Project prairie grass, a field program in diffusion. *Geophys. Res. Pap. 1 e 2*, 59 (1958).

[2] Barichello, L. B. *Formulação analítica para a solução do problema de ordenada discreta unidimensional*. Dissertação (doutorado em engenharia mecânica), Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1992.

[3] Batchelor, G. K. Diffusion in a field of homogeneous turbulence, eulerian analysis. *Aust. J. Sci. Res. 2* (1949), 437–450.

[4] Berlyand, M. *Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere*. translated version by NERC, USEPA,Raleigh, NC, USA, 1975.

[5] Briggs, G. A. Plume rise predictions. *Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses, D.A. Haugen ed., American Meteorological Society Boston, MA* (1985), 59–111.

[6] Brown, M. J., and Arya, S. P. S. Vertical dispersion from surface and elevated releases. *Proc. Sixth Joint Conference on Application of air pollution meteorology, Anaheim, CA (USA)* (1989), 163–166.

[7] Burden, R. L., and Faires, J. D. *Análise Numérica*. Thomson, São Paulo, 2003.

[8] Carvalho, J. *Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva*. Dissertação (mestrado em meteorologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.

[9] Carvalho, J. C., Degrazia, G. A., Afonssi, D., Campos, C. R. J., Roberti, D. R., and Kerr, A. S. Lagrangian stochastic dispersion

modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. *Meteorologische Zeitschrift 11*, 2 (2002), 89–97.

[10] Caughey, S. J., Wyngaard, J. C., and Kaimal, J. C. Turbulence in the evolving stable boundary layer. *J. Atmos. Society 36* (1979), 1041–1052.

[11] Champagne, F. H., Friehe, C. A., Larve, J. C., and Wyngaard, J. C. Flux measurements, flux estimation techiniques, and fine scale turbulence measurements in the instable surface layer over land. *J. Atmos. Society 34* (1977), 515–520.

[12] Chrysikopoulos, C. V., Hildemann, L. M., and Roberts, P. V. A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source. *Atmos. Environ. 26A* (1992), 747–757.

[13] Deardorff, J. W. Convective velocity and temperature acales for the unstable planetary boundary layer and for raleigh convection. *J. Atmos. Sci. 27* (1970), 1211–1213.

[14] Deardorff, J. W. Theorical expression for the counter-gradient vertical heat flux. *J. Geophys. Res. 77* (1972), 5900–5904.

[15] Degrazia, G. A., and Afonssi, D. Estimation of the kolmogorov constant co from classical statistical diffusion theory. *Atmos. Environ. 22*, 20 (1998), 3611–3614.

[16] Degrazia, G. A., Mangia, C., and Rizza, U. A comparison between different methods to estimate the lateral dispersion parameter under convective conditions. *Journal of Applied Meteorology 37* (1998), pp. 227–231.

[17] Degrazia, G. A., and Moraes, O. L. L. A model for eddy defussivity in a stable boudary layer. *Bound. Layer Meteor. 58* (1992), 205–214.

[18] Degrazia, G. A., Velho, H. F. C., and Carvalho, J. C. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. *Contributions to Atmosph. Phys.* (1997), 57–64.

[19] Demuth, C. A. Contibution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. *Atmos. Environ. 12* (1978), 1255–1258.

[20] Ganapol, B. D., and Furfaro, R. Reactor fuel element heat conduction via numerical laplace transform inversion. *Computacional Heat and Mass Transfer* (2001), 361–370.

[21] Garratt, J. R. *Atmospheric diffusion.* Cambridge Uneversity Press, Cambridge, pp. 316, 1992.

[22] Gifford, F. A. A simultaneous lagrangian-eulerian turbulence experiment. *Monthly Weather Review 83* (1955), 293–301.

[23] Gifford, F. A. Atmosferic dispersion models for environmental pollution applications. *Lectures on air pollution and environmental impact analysis, DA Haugen, Ed., Amer. Meteor. Soc., Boston* (1975), 35–58.

[24] Gryning, S. E. Apllied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmos. Environment 21* (1987), 79–89.

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

[26] Hay, J. S., and Pasquill, F. Diffusion from a continuous source in relation to the spectrum and scale of turbulence. *Advances in Geophysies 6* (1959), 345–365.

[27] Hinrichsen, K. Comparison of four analytical dispersion models for near surface releases above a grass surface. *Atmos. Environ. 20* (1986), 29–40.

[28] KERRIGAN, J. F. *Migrating to Fortran 90.* O'Reilly and Associates, Inc., Sebastopol/CA, 1993.

[29] KOCK, W. A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absrtion. *Atmos. Environ. 23* (1989), 1729–1732.

[30] LAMB, R. G. A numerical simulation of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ. 12* (1978), 1297–1304.

[31] LAMB, R. G. Diffusion in the convective boudary layer. *Atmospheric Turbulence and air Pollution Modelling, F.T.M. Nieuwstadt and H. van Dop, Eds., Reidel* (1982), 159–229.

[32] LIN, J. S., AND HILDEMANN, L. M. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. *Atmos. Environ. 31* (1997), 59–71.

[33] LUHAR, A. K., AND BRITTER, R. E. *Atmos. Environment 23* (1989), 1191–1924.

[34] MASOLIVER, J., AND WEISS, G. H. Finity-velocity diffusion. *Eur. J. Phys. 17* (1996), 190–196.

[35] MONIN, A. S., AND OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. *Tr. Akad. Nauk, SSSR, Geofiz. Inst. 151*, 24 (1954), 1963–1987.

[36] MONIN, A. S., AND YAGLOM, A. M. *Statistical fluid mechanics.* Mit Press, Cambridge, 1971.

[37] MOREIRA, D. M., DEGRAZIA, G. A., AND VILHENA, M. T. Dispersion from low sources in a convective boudary layrer: an analytical model. *II Nouvo Cimento 22C*, 5 (1999), 685–691.

[38] MOREIRA, D. M., NETO, F., AND P. V., CARVALHO, J. C. Analytical solution of the eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation. *Environmental Modelling and Software In press* (2003).

[39] MOURA, A. B. D. *Solução analítica para dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável.* Dissertação (mestrado em engenharia mecânica), Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1995.

[40] NICKOLA, P. W. *The Hanford 67 series: a volume of atmospheric field diffusion measurements.* Pnl-2433 Battelle, Pacific Northwest Laboratories, Richland, WA (USA), 1977.

[41] NIEUWSTADT, F. T. M. An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equatiuon in the atmospheric boundary layer. *Atmos. Environ. 14* (1980), 1361–1364.

[42] NIEUWSTADT, F. T. M. The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer. *J. Atmos. Society 41* (1984), 2202–2216.

[43] NIEUWSTADT, F. T. M., AND HAAN, B. J. An analytical solution of one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with na application to inversion rise fumigation. *Atmos. Environ. 15* (1981), 845–851.

[44] NIEUWSTADT, F. T. M., AND VAN ULDEN, A. P. A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. *Atmos. Environ. 12* (1978), 2119–2124.

[45] PASQUILL, F. The estimation of the dispersion of windborne material. *Meteor. Mag. 90* (1961), 33–37.

[46] PASQUILL, F., AND SMITH, F. B. *Atmospheric diffusion.* Ellis Howood Ltd., Chichester, 1983.

[47] PIRES, C. S. *Um estudo analítico da dispersão de contaminantes abandonados por fontes áreas em uma camada limite convectiva.* Dissertação (mestrado em sensoriamento remoto), Centro Estadual de Pesquisas em Sensoriamento Remoto e Meteorologia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1996.

[48] ROBERTS, O. F. T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. *Proc. Roy. Soc. 104* (1923), 640–648.

[49] ROUNDS, W. Solutions of the two-dimensional diffusion equation. *Trans. Am. Geophys. Union 36* (1955), 395–405.

[50] SCRIVEN, R., AND FISHER, B. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout-ii. the effect of turbulent diffusion. *Atmos. Environ. 9* (1975), 59–65.

[51] SMITH, F. The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere. *J. Fluid Mech. 2* (1957), 49–76.

[52] SORBJAN, Z. Local similarity of spectral and cospectral characteristics in the stable-continuous boundary layer. *Bound. Layer Meteor. 35* (1986), 257–275.

[53] SORBJAN, Z. *Structure of the atmospheric boundary layer.* Prentice Hall, New Jersey, pp. 317, 1989.

[54] SPIEGEL, M. R. *Tansformadas de Laplace.* McGraw-Hill do Brasil, Ltda., São Paulo - pp.267, 1971.

[55] STROUD, A. H., AND SECREST, D. *Gaussian Quadrature Formulas.* Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1966.

[56] STULL, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology model for eddy defussivity in a stable boudary layer.* Kluwer Academic Publishers.

[57] TAYLOR, G. I. Diffusition by continuous movements. *Proc. London Math. Society 20* (1921), 196–212.

[58] TIRABASSI, T., AND RIZZA, U. An analytical model for a screen evaluation of the enviromental impact from a single point source. *Il Nuovo Cimento 15c* (1992), 181–190.

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

[60] TIRABASSI, T., TAGLIAZUCCA, M., AND PAGGI, P. A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer. *Atmos. Environ 23* (1989), 857–862.

[61] TIRABASSI, T., TAGLIAZUCCA, M., AND ZANNETTI, P. Kappa-g, a nongaussian plume dispersion model: discription and evaluation against tracer measurements. *JAPCA 36* (1986), 592–596.

[62] VAN DOP, H., AND VERVER, G. Countergradient transport revisited. *American Meteorological Society 58* (2001), 2240–2247.

[63] VAN ULDEN, A. P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. *Atmos. Environ. 12* (1978), 2125–2129.

[64] VAN ULDEN, A. P. A surface layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground. *Atmos. Environ. 26A* (1992), 681–692.

[65] VILHENA, M. T., AND BARICHELLO, L. B. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kerntechnik 56*, 5 (1991), 334–336.

[66] Vilhena, M. T., and Streck, E. E. An approximate analytical solution of the onegroup neutron transport equation. *Kerntechnik 57*, 3 (1992), 196–198.

[67] W.H., S. *The EPA meteorological wind tunnel: its design, construction and operating characteristics.* EPA-600/4-79-051, Research Triangle Park, NC (USA), 1979.

[68] Willis, G. E., and Deardorff, J. W. A laboratory model of the unstable planetary boundary layer. *J. Atmos. Society 31* (1974), 1297–1307.

[69] Willis, G. E., and Deardorff, J. W. A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer. *Quart. J. R. Met. Society 102* (1976), 427–445.

[70] Willis, G. E., and Deardorff, J. W. A laboratory study of dispersion from elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. *Atmos. Environ. 12* (1978), 1305–1311.

[71] Willis, G. E., and Deardorff, J. W. laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer. *Atmos. Environ. 15* (1981), 109–117.

[72] Yeh, G., and Huang, C. Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere. *Boun. Layer Meteor. 9* (1975), 381–390.