

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

**Solução Analítica do
Problema Bidimensional
Transiente de Dispersão de
Poluentes Atmosféricos pelo
Método GITT Dupla**

por

Mariana Cassol

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Marco Tullio Barreto Menna de Vilhena
Orientador

Prof. Dr. Sérgio Wortmann
Co-orientador

Porto Alegre, Janeiro de 2006.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Cassol, Mariana

Solução Analítica do Problema Bidimensional Transiente de Dispersão de Poluentes Atmosféricos pelo Método GITT Dupla / Mariana Cassol.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2006.

73 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2006.

Orientador: Vilhena, Marco Tullio Barreto Menna de ; Coorientador: Wortmann, Sérgio

Dissertação: Matemática Aplicada
Solução Analítica, Dispersão de Poluentes, GITT Dupla, Transformada de Laplace, Equação de difusão-advecção

**Solução Analítica do Problema
Bidimensional Transiente de Dispersão
de Poluentes Atmosféricos pelo Método
GITT Dupla**

por

Mariana Cassol

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 Tullio Barreto Menna de Vilhena

Co-orientador: Prof. Dr. Sérgio Wortmann

Banca examinadora:

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia
CTA/SP

Prof. Dr. Antônio Goulart
DCET/URI

Prof. Dr. Leandro Farina
PPGMAp/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
23 de Janeiro de 2006.

Prof. Dra. Maria Cristina Vialli
Coordenador

Para meus pais.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor Sérgio Wortmann, pelo apoio, incentivo e dedicação durante o desenvolvimento deste trabalho. Além disso, agradeço pelo conhecimento transmitido e, principalmente, pela amizade manifestada.

Agradeço ao professor Marco Tullio M. B. de Vilhena pela oportunidade dada.

Agradeço aos meus pais que sempre me apoiaram, incentivaram e estimularam na busca pelo saber.

Agradeço ao PPGMAp e seus docentes.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	iv
LISTA DE TABELAS	vi
LISTA DE SÍMBOLOS	vii
RESUMO	ix
ABSTRACT	x
1 INTRODUÇÃO	1
2 O MÉTODO UTILIZADO	8
2.1 A GITT	8
2.2 Filtro	12
2.3 Solução do Problema Transformado	14
2.4 Fórmula da Inversa Modificada	18
3 SOLUÇÃO DO PROBLEMA DIFUSIVO-ADVECTIVO	20
3.1 O Modelo Matemático	20
3.2 Definição do Filtro Matemático	22
3.3 Aplicação da GITT Dupla	29
3.4 Solução do Sistema EDO Transformado	34
4 VALIDAÇÃO DO MODELO	37
4.1 Dados experimentais	37
4.1.1 O experimento de Copenhagen	38
4.1.2 O experimento de Copenhagen (Transiente)	39
4.2 Parametrização da Turbulência	41
4.2.1 Coeficientes de Difusão	41
4.2.2 Perfil da velocidade média do Vento	42

4.3 Índices Estatísticos	43
5 RESULTADOS	45
6 CONCLUSÃO	65
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	68

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1	Ilustração representando a dispersão de poluentes	21
Figura 4.1	Experimento de Copenhagen	38
Figura 5.1	Convergência da concentração de poluentes com a variação de ener	49
Figura 5.2	Tempo de processamento em função do número de autovalores ener em que $enex=5$ e $enez=5$	49
Figura 5.3	Convergência da concentração de poluentes com a variação de enez	50
Figura 5.4	Tempo de processamento em função do número de autovalores enez em que $enex=5$ e $ener=5$	50
Figura 5.5	Convergência da concentração de poluentes com a variação de enex	51
Figura 5.6	Tempo de processamento em função do número de autovalores enex em que $enez=5$ e $ener=5$	51
Figura 5.7	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração(Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 4.1	55
Figura 5.8	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração(Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 4.2 e com os dados obtidos por Degrazia et al [15]	56
Figura 5.9	Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen, com intervalos de tempo, dos dados observacionais de concen- tração(Co) em comparação com os resultados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 4.1	59
Figura 5.10	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 5.1 e $wa = 0$	60
Figura 5.11	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 5.1 e $wa = 1$	61
Figura 5.12	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 5.1 e $wa = 2$	61
Figura 5.13	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 5.1 e $wa = 3$	62

Figura 5.14	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 5.1 e $wa = 4$	62
Figura 5.15	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) para $t = 0s$	63
Figura 5.16	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) para $t = 80s$	64
Figura 5.17	Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) para $t = 18000s$	64

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen	39
Tabela 4.2	Velocidade de fricção (u_*) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 minutos.	40
Tabela 4.3	Comprimento de Monin-Obukhov (L) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 minutos.	40
Tabela 4.4	Altura da Camada Limite Convectiva (z_{max})	41
Tabela 5.1	Convergência da concentração utilizando a equação 4.1, variando $ener$ e mantendo $enex = enez = 5$	46
Tabela 5.2	Convergência da concentração utilizando a equação 4.1, variando $enez$ e mantendo $enex = ener = 5$	47
Tabela 5.3	Convergência da concentração utilizando a equação 4.1, variando $enex$ e mantendo $enez = ener = 5$	47
Tabela 5.4	Concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.1) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.	52
Tabela 5.5	Concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.2) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.	53
Tabela 5.6	Índices estatísticos para os dados de Copenhagen	54
Tabela 5.7	Concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.1) em diferentes distâncias da fonte e intervalos de tempo. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.	57
Tabela 5.8	Média das concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.1) em diferentes distâncias da fonte e intervalos de tempo (Int.). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.	58

LISTA DE SÍMBOLOS

A	operador diferencial genérico
A^*	operador diferencial de mais baixa ordem associado ao problema de Sturm-Liouville
B	operador diferencial genérico
CLC	Camada Limite Convectiva
C_o	Concentrações observadas
Cor	Coefficiente de correlação
C_p	Concentrações preditas pelo modelo
$c(x, t)$	concentração de poluentes do problema unidimensional
$c^*(x, t)$	concentração de poluentes filtrada do problema unidimensional
$C(x, z, t)$	concentração de poluentes
$C_f(x, z, t)$	concentração de poluentes filtrada
C_m	matriz constante com os valores médios de $C(t)$
D_{av}	matriz diagonal de autovalores da matriz de coeficientes do problema transformado com coeficientes constantes
D_m	matriz constante com os valores médios de $D(t)$
$ener$	número de autovalores para o filtro
$enez$	número de autovalores para a primeira GITT
$enex$	número de autovalores para a segunda GITT
E	matriz de coeficientes do problema transformado
$E_{av}(t)$	matriz definida pela equação 2.25
F	matriz de coeficientes do problema transformado
$Fa2$	Fator de dois
Fb	Fração de inclinação
Fs	Desvio fracional padrão
$F(x, z)$	função filtro
$f^*(x)$	filtro do problema unidimensional
g	aceleração da gravidade (m/s^2)
hf	altura da fonte (m)
k	constante de Von Kármán
$k_x(x, z)$	coeficiente difusivo-advectivo da Teoria K
$k_z(x, z)$	coeficiente difusivo-advectivo da Teoria K
$\overline{k_x(x, z)}$	valor médio do coeficiente difusivo-advectivo da Teoria K
$\overline{k_z(x, z)}$	valor médio do coeficiente difusivo-advectivo da Teoria K
L	comprimento de Monin-Obukov (m)
L^*	operador diferencial associado ao problema de Sturm-Liouville
L^{-1}	operador associado a Transformada Inversa de Laplace
$Nmse$	Erro quadrático médio normalizado
N^*_m	norma
N_r	norma
N_i	norma
N_m	norma

Q	intensidade da fonte (g/s)
t	tempo (s)
u_*	velocidade de fricção(m/s)
$\overline{u(x, z)}$	componente horizontal do vento(m/s)
$\overline{u(x, z)}$	velocidade horizontal média do vento(m/s)
$\overline{w(x, z)}$	componentes vertical do vento(m/s)
$\overline{w(x, z)}$	velocidade vertical média do vento(m/s)
w_*	escala de velocidade convectiva (m/s)
$\overline{v_i}(t)$	variável dependente transformada
x	distância longitudinal da fonte (m)
$xmax$	distância que representa a condição no infinito da coordenada longitudinal(m)
X	matriz de autovetores da matriz de coeficientes do problema transformado com coeficientes constantes
z	altura (m)
$zmax$ (ou z_i)	altura da Camada Limite Convectiva (m)
z_0	comprimento de rugosidade aerodinâmico(m)

GREGOS

Δ	matriz diagonal de autovalores da matriz do problema transformado da velocidade
$\beta_i(Y)$	autovalor do problema auxiliar da temperatura
λ ou λ_m	autovalor do problema de Sturm-Liouville
ψ ou $\psi_m(x)$	autovetor do problema de Sturm-Liouville
ψ_r	autovetor do problema de Sturm-Liouville
λ_r	autovalor do problema de Sturm-Liouville
ψ_i	autovetor do problema de Sturm-Liouville
λ_i	autovalor do problema de Sturm-Liouville
ϕ_m	autovetor do problema de Sturm-Liouville
β_m	autovalor do problema de Sturm-Liouville
δ	função Delta de Dirac
$\psi^{\frac{1}{3}}$	taxa de dissipação
Ψ_m	função estabilidade
σ	desvio padrão

RESUMO

Neste trabalho é apresentada uma solução analítica de um problema bidimensional e transiente de dispersão de poluentes atmosféricos. O modelamento utilizado é conhecido na literatura como modelo K_{zz} para dispersão de poluentes atmosféricos e é representado por uma equação difusivo-advectiva com coeficientes de difusão e advecção variáveis. São utilizados três diferentes coeficientes de difusão nas simulações, bem como as componentes horizontal e vertical do vento são tomadas como variáveis.

A solução analítica é gerada através da aplicação da técnica GITT (Generalized Integral Transform Technique) dupla com problema transformado resolvido por Transformada de Laplace e diagonalização de matrizes. Filtros matemáticos são usados para homogenizar as condições de contorno viabilizando o uso da técnica citada. Além disso, o tipo de filtro matemático utilizado permite a sensível diminuição do custo computacional. Resultados numéricos são obtidos e comparados com dados experimentais e outras soluções da literatura.

ABSTRACT

In this work we present an analytical solution to a transient bidimensional atmospheric pollutant dispersion problem. It is used the well known atmospheric pollutant dispersion model Kzz which is represented by a diffusive-advective equation with variable diffusive and advective coefficients. In the simulations are used three different diffusion coefficients and the wind vertical and horizontal components are taken as variables.

The problem related above is analytically approached by double GITT (Generalized Integral Transform Technique). Laplace Transform and Matrix Diagonalization are employed to analytically solve the GITT transformed problem. As GITT needs homogeneous boundary conditions, mathematical filters are used to change the original problem boundary conditions. Besides, the used mathematical filters allow an important computational cost reduction. Numeric results are obtained and compared with experimental data and other results that are found in open literature.

1 INTRODUÇÃO

Simulações da dispersão de poluentes atmosféricos têm sido realizadas com o uso de aproximações híbridas e analíticas como Técnica da Transformada Integral Generalizada (*Generalized Integral Transform Technique* - GITT), Transformada de Laplace, bem como suas variações e combinações. Estas metodologias são geralmente usadas em um modelo matemático difusivo advectivo conhecido na literatura como Modelo Kzz [15][16]. Apesar de algumas dificuldades intrínsecas ao método, especialmente em aplicações multi-dimensionais, este tipo de ferramenta matemática é particularmente útil para pesquisadores que se concentram no desenvolvimento de modelos matemáticos.

Resumidamente, pode-se dizer que a GITT é uma técnica de solução de equações diferenciais parciais em que o potencial original é expandido em uma base determinada a partir da solução de um problema de Sturm-Liouville escolhido por associação com o problema original. A ortogonalidade da base é então usada para transformar a equação expandida em um sistema de equações chamado de problema transformado. Uma vez que a solução do problema transformado é encontrada, a fórmula da inversa é utilizada para obter a solução do problema original.

Geralmente, o problema transformado é um sistema de equações diferenciais ordinárias que, historicamente, tem sido resolvido através de subrotinas numéricas [10] [11] [30]. Recentemente, Wortmann [43] propôs sua solução por Transformada de Laplace e diagonalização de matrizes. Esta nova abordagem analítica tem sido usada em muitas aplicações. Dependendo do problema original, pode-se combinar a aplicação de GITT simples com Transformada de Laplace simples ou dupla. Cabe porém ressaltar que na utilização de Transformada de Laplace dupla, uma das duas transformações inversas deve ser realizada numericamente. Além disso, algumas simplificações da equação são necessárias.

Na aplicação deste método, deve-se ter especial atenção na escolha do problema de Sturm-Liouville associado (também chamado de problema auxiliar) e nas suas implicações. Esta etapa exige que o problema original tenha condições de contorno homogêneas. Quando o problema original não apresenta condições de contorno homogêneas, deve-se fazer uso de filtros matemáticos. Basicamente, os filtros matemáticos, ou simplesmente filtros, são soluções de ordem mais baixa do mesmo problema com as mesmas condições de contorno não homogêneas. Assim, um novo potencial é dado diminuindo o potencial original do filtro. Como o problema original e o filtro tem as mesmas condições de contorno não homogêneas, o novo potencial apresenta condições de contorno homogêneas. Logo, a técnica é aplicada no problema filtrado e a solução do problema original pode ser avaliada somando a solução do problema filtrado com o filtro [11].

A GITT tem como uma de suas características o controle de erro dos resultados. Este fato permite a avaliação do modelo matemático adotado. Pode-se afirmar que as diferenças encontradas entre resultados de referência e resultados obtidos são originadas por duas razões: as suposições do modelo matemático e as aproximações na solução das equações. Como esta metodologia pode definir a magnitude da segunda razão citada, a performance do modelo matemático pode ser prontamente avaliada. Talvez seja esta a característica mais importante deste método, especialmente no que se refere ao desenvolvimento de modelos matemáticos, uma vez que ele permite avaliar de forma independente os erros devidos ao modelamento matemático e a abordagem de solução.

No presente trabalho, a principal preocupação está centrada na metodologia de solução das equações difusivas advectivas utilizadas no modelamento de problemas de poluição de baixa atmosfera. Mais notadamente nas abordagens analíticas. Por isso, a revisão bibliográfica que se segue prioriza a avaliação de trabalhos desta importante área da física aplicada que têm como ferramentas matemáticas a GITT e Transformada de Laplace.

Almeida et al. [2] apresentam a utilização da GITT na solução da equação de difusão-advecção transiente bidimensional com coeficientes variáveis, condição de contorno não homogênea e solução numérica do problema transformado. Neste trabalho é utilizado um filtro que incorpora os termos difusivos nas direções vertical e horizontal com coeficientes constantes. No entanto, é desconsiderado em sua abordagem o termo da componente vertical da velocidade do vento.

Posteriormente, Almeida [1] testa alguns filtros na solução da mesma equação difusivo-advectiva transiente bidimensional com coeficientes variáveis e condição de contorno não homogênea. São eles: constante, difusivo permanente, gaussiano e advectivo-difusivo. Novamente, é desprezado o termo da componente vertical da velocidade do vento.

Moura [26], em 1995, utilizando Transformada de Laplace, apresenta a solução analítica da equação de difusão unidimensional transiente, sem vento, utilizando o coeficiente de difusão K_z de Degrazia et al. [16] para o caso estável.

Já em 1999, complementando seu trabalho anterior, Moura [27] traz modelos multidimensionais analíticos para dispersão de contaminantes na atmosfera, resolvendo através do uso da GITT um problema bidimensional estacionário com os termos difusivo na coordenada longitudinal ao escoamento e advectivo na transversal, e um problema tridimensional contemplando os termos anteriores juntamente com um termo difusivo na coordenada restante.

Em 2004, Costa [9] resolve a equação difusivo-advectiva contemplando os termos de advecção na coordenada longitudinal ao escoamento e difusão na ordenada vertical, através da Transformada de Laplace e de esquema de Quadratura de Gauss para a transformação inversa.

Buligon [5], por sua vez, apresenta uma solução da equação de difusão unidimensional transiente em que foi utilizada Transformada de Laplace com inversão numérica. Esta realizada através de um esquema numérico de Quadratura Gaussiana.

Uma abordagem analítica pode ser encontrada em [45]. Wortmann resolve um problema unidimensional transiente com coeficiente de difusão variável através da GITT. Neste trabalho, o sistema de equações resultante da aplicação da técnica é resolvido analiticamente através do uso da Transformada de Laplace e diagonalização de matrizes.

Utilizando a mesma abordagem analítica, Wortmann et al.[44] resolvem a equação de difusão-advecção bidimensional estacionária, considerando somente os termos da velocidade do vento na coordenada longitudinal e do coeficiente de difusão variável na ordenada vertical. Além disso, os resultados obtidos são comparados com os dos modelos ADMM [41] e KAPPA-G [39].

Fazendo uso da equação para difusão turbulenta sugerida por van Dop and Verver [40], Moreira et al.[24] traz uma solução para um problema bidimensional estacionário. No entanto, aplica Transformada de Laplace e inversão numérica, utilizando um esquema numérico de Quadratura Gaussiana.

A mesma equação anterior é abordada por Buske et al.[7]. Mas, para obter a solução, há a aplicação da GITT associada ao uso da Transformada de Laplace.

Recentemente, Moreira et al. [25] evidencia o uso da GITT e Transformada de Laplace para resolver a equação de difusão-advecção bidimensional estacionária. O autor considera somente os termos da advecção na coordenada longitudinal e da difusão na coordenada transversal. O coeficiente do termo difusivo, no entanto, é apresentado de duas formas propostas por Degrazia et al. [15]: uma com dependência das variáveis das coordenadas longitudinal transversal e a outra com dependência somente da altura.

Um dos últimos trabalhos encontrados na literatura é o realizado por Buske [6]. É apresentada a solução da equação de difusão-advecção bidimensional transiente através da aplicação de Transformada de Laplace, GITT e Transformada de Laplace respectivamente. São desprezados alguns termos da equação.

De todos os trabalhos com abordagem analítica comentados acima, os que mais avançaram analiticamente são os que resolvem problemas unidimensionais transientes [45] [7] ou bidimensionais estacionários [44] [25]. Ainda assim, nestes casos as equações sofreram simplificações como negligenciamento de termos menos significativos, simplificações em que coeficientes variáveis são assumidos como constantes, etc. Já nas abordagens bidimensionais transientes encontradas [2] [1], além da supressão de termos advectivos [2] [1] ou difusivos e advectivos [6], as técnicas aplicadas têm etapas numéricas, quer seja na inversão da GITT [2] [1], quer nas integrações de transformação integral e na inversão da Transformada de Laplace [6]. É importante observar que etapas numéricas podem comprometer o controle de erro da solução.

Matematicamente falando, existe uma severa limitação no uso de transformada dupla de Laplace para solução desta classe de problemas. Neste caso, uma das variáveis espaciais terá que ser transformada por Laplace além da variável temporal. Isso implica restrições importantes nos coeficientes das parcelas do operador diferencial que apresentem derivadas em relação à variável transformada. Por exemplo, no caso mais usual, a Transformada dupla de Laplace é aplicada na variável temporal e na variável longitudinal ao escoamento. Nesta situação os coeficientes nos quais se deve ter especial atenção seriam a componente longitudinal da velocidade do vento e o coeficiente de difusão axial. Se estes dois coeficientes forem variáveis em relação a variável espacial transformada, pode ser difícil e até impossível encontrar expressões para a transformada inversa, o que obrigaria a opção por artifícios como iteração de fonte ou Decomposição de Adomian. Estes artifícios implicam em maiores dificuldades para confecção do código computacional e no controle de erro da solução. É por isso que, em todos exemplos encontrados, estes coeficientes são tomados como constantes em relação à variável axial, o que nem sempre representa bem as condições físicas. Além do mais, os códigos computacionais escritos para o caso em que estes coeficientes sejam não nulos não podem ser usados para o caso dos coeficientes nulos. Isto causa fortíssima limitação de algoritmo nas abordagens em que estes coeficientes são de pequena magnitude. Por exemplo, problemas de vento

fraco em regra tendem a apresentar matrizes mal condicionadas e são praticamente impossíveis de serem resolvidos por esta abordagem. Em uma abordagem alternativa, que se caracterizasse por GITT dupla nas variáveis espaciais e Transformada de Laplace na variável temporal, todas as limitações relatadas acima inexistem. Neste caso um único código pode ser constituído para contemplar coeficientes variáveis, constantes, de pequena magnitude e nulos.

Desta forma, seria interessante uma abordagem em dispersão de poluentes atmosféricos que contemplasse a solução analítica da equação de difusão-advecção bidimensional transiente em sua forma completa, não havendo simplificação de termos nem inversões numéricas das transformadas integrais. Outra característica desejável é que esta abordagem permitisse uma formulação com coeficientes de difusão e advecção variáveis.

Este trabalho têm como objetivo a solução de um problema bidimensional transiente de dispersão de poluentes atmosféricos. O modelo matemático usado é a formulação difusivo-advectiva, chamada Modelo Kzz. A solução totalmente analítica é gerada através da aplicação de GITT dupla com problema transformado resolvido por Transformada de Laplace. Todas as transformações integrais, bem como suas inversões são efetuadas analiticamente, sem passos numéricos. A equação utilizada é resolvida sem nenhuma simplificação, isto é, todos os termos difusivos, advectivos e transiente são contemplados, bem como seus coeficientes (difusivos e advectivos) são tomados com dependência das variáveis espaciais e não aproximados por constantes. Como há condição de contorno não homogênea, filtros matemáticos são usados. Resultados numéricos são obtidos e comparados com dados experimentais e outras soluções da literatura.

A presente dissertação está estruturada em 5 capítulos. No primeiro, encontra-se uma revisão bibliográfica justificando e motivando a realização deste trabalho. No capítulo dois descreve-se o método utilizado na solução da equação de difusão-advecção. No capítulo três apresenta-se a solução do problema a ser resolvido. No capítulo quatro são apresentadas as parametrizações utilizadas no

modelo. No capítulo cinco mostra-se os resultados obtidos, confrontando-os com dados observacionais e com outros dados da literatura. Finalmente, no capítulo seis são apresentadas as conclusões.

2 O MÉTODO UTILIZADO

2.1 A GITT

Serão mostrados a seguir os passos básicos para obtenção da solução de um problema unidimensional dependente do tempo pela técnica da **GITT**. Para problemas multidimensionais, o procedimento é análogo. A análise será, ainda, restrita à geometria cartesiana. É utilizada a metodologia adotada por Wortmann [43].

Seja a equação

$$Ac(x, t) = S, \quad em \quad a < x < b \quad e \quad t > 0, \quad (2.1)$$

sujeita às condições de contorno homogêneas e inicial,

$$a_1 \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} + a_2 c(x, t) = 0 \quad para \quad x = a, \quad (2.1a)$$

$$b_1 \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} + b_2 c(x, t) = 0 \quad para \quad x = b, \quad (2.1b)$$

$$c(x, t) = f(x) \quad para \quad t = 0, \quad (2.1c)$$

onde A é o operador diferencial parcial associado a problema unidimensional dependente do tempo, S é o termo fonte e as a_1 , a_2 , b_1 e b_2 constantes dependentes das propriedades físicas. Por motivos didáticos, novamente, a análise se restringirá a uma dimensão. Além disso, $|a_1| + |a_2| \neq 0$ e $|b_1| + |b_2| \neq 0$.

O primeiro passo é expandir a variável $c(x, t)$ em uma base adequada. Para se determinar esta base, reescreve-se o operador A é na seguinte forma

$$Ac(x, t) = Bc(x, t) + L^*c(x, t), \quad (2.2)$$

onde L^* é um operador associado ao problema de Sturm-Liouville e B é o operador associado aos termos restantes. A forma mais genérica de L^* é aqui definida por

$$L^*\psi(\lambda, x) \equiv \nabla \cdot [p(x)\nabla\psi(\lambda, x)] + q(x)\psi(\lambda, x). \quad (2.3)$$

As funções $p(x)$ e $q(x)$ devem ser reais e contínuas. Além disso, $p(x) > 0$ em todo o intervalo (a, b) .

Uma vez determinado o operador L^* , o problema de Sturm-Liouville é definido como:

$$L^*\psi(\lambda, x) + \lambda^2\psi(\lambda, x) = 0 \quad em \quad a < x < b, \quad (2.4)$$

$$a_1 \frac{\partial\psi(x, a)}{\partial x} + a_2\psi(x, a) = 0 \quad para \quad x = a \quad e \quad (2.4a)$$

$$b_1 \frac{\partial\psi(x, b)}{\partial x} + b_2\psi(x, b) = 0 \quad para \quad x = b. \quad (2.4b)$$

O Problema de Sturm-Liouville apresentado em 2.4 é também chamado de problema auxiliar na teoria da **GITT**. As constantes a_1 , a_2 , b_1 e b_2 , por sua vez, devem ser as mesmas do problema original 2.1. A equação 2.4 pode ser escrita para um λ_m qualquer, uma vez que o parâmetro λ é independente das constantes a_1 , a_2 , b_1 e b_2 .

$$L^*\psi_m(x) + \lambda_m^2\psi_m(x) = 0 \quad (2.5)$$

onde: $\psi_m(x) \equiv \psi(\lambda_m, x)$. As funções $\psi_m(x)$ e os valores λ_m são conhecidos, respectivamente, como as autofunções e autovalores do operador L^* . Elas formam uma base para o espaço onde o operador L^* está contido, cuja ortogonalidade é definida da seguinte forma [30]

$$\frac{1}{N_{*m}^{\frac{1}{2}} N_{*n}^{\frac{1}{2}}} \int_a^b \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ 1 & m = n \end{cases} \quad (2.6)$$

onde a norma N_{*m} é dada por

$$N_{*m} = \int_a^b \psi_m^2(x) dx. \quad (2.7)$$

A base de autofunções é usada para expandir a variável $c(x, t)$ da equação 2.1 na seguinte forma

$$c(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\overline{c_m(t)} \psi_m(x)}{N_{*m}^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.8)$$

A expansão 2.8 é também conhecida na literatura como **Fórmula da Inversa da GITT**.

Após a determinação do problema de autovalores associado ao problema original e expandida a sua variável dependente, deve-se aplicar na equação 2.1 o seguinte operador

$$\frac{1}{N_{*n}^{\frac{1}{2}}} \int_a^b \psi_n(x) dx, \quad (2.9)$$

Executadas todas as integrações, o resultado é um sistema de equações diferenciais ordinárias, (EDO), cuja variável dependente é $\overline{c_i(t)}$. Esta variável e os autovetores $\psi_i(x)$ são obtidos solucionando-se este sistema de equações sujeito à condição inicial no tempo e o problema de autovalores associado, respectivamente. Conhecendo-se estas duas grandezas, o somatório da equação 2.8 pode ser truncado em um número de termos suficientemente grande para a determinação do potencial original $c(x, t)$.

É apresentado a seguir um resumo dos principais passos para se obter a solução de uma equação pela **GITT**:

- a) Determina-se o problema auxiliar com a identificação do operador L^* na equação a ser resolvida. Na equação 2.3 este operador está representado na sua forma mais completa, apesar de que algumas de suas parcelas podem ser consideradas nulas dependendo do problema a ser resolvido. Deve-se, entretanto, procurar levar para o problema auxiliar o máximo de informações do problema original, pois quanto mais informação se consegue carregar para a base de autovalores, menor será o número de termos necessários para o truncamento da equação 2.8. A base carregará mais informação na medida em que menos termos do operador L^* forem nulos.
- b) Resolve-se o o problema auxiliar.
- c) Transforma-se a equação original, fazendo-se uso do operador definido na equação 2.9, resultando em um sistema de equações transformado.
- d) Trunca-se o sistema em um número suficientemente grande de termos e resolve-se o sistema de equações transformado.
- e) Usa-se a Fórmula da Inversa da **GITT** para a obtenção da solução final do problema.

Cabe ressaltar, finalizando esta secção, que a aplicação da **GITT** está restrita a três condições básicas. São elas:

- a) A função $p(x)$ presente na definição do operador de Sturm-Liouville não pode ser nula, pois o operador diferencial que se quer resolver tem que ter um termo laplaciano.
- b) O domínio do problema a ser resolvido tem que estar contido no intervalo $a < x < b$ citado na equação 2.4, ou seja, a **GITT** só é aplicável

em problemas de domínio finito. Em alguns casos, como em domínios semi-infinitos, esta limitação pode ser contornada considerando-se uma distância grande o suficiente para se admitir que o comportamento da solução seja aproximadamente o mesmo que para a coordenada longitudinal no infinito e o problema seja tratado como um problema de valores prescritos no contorno.

- c) As condições de contorno da variável em que se aplicará a técnica devem ser homogêneas. Em casos onde isto não acontece, como no problema que será abordado no próximo capítulo, deve-se fazer uso de filtros.

2.2 Filtro

Os filtros matemáticos, como mencionado anteriormente, são utilizados em casos onde as condições de contorno da variável em que se aplicará a técnica não são homogêneas. Mais uma vez a análise se restringirá ao caso unidimensional, uma vez que o multidimensional é análogo.

Consideremos o seguinte exemplo:

$$Ac(x, t) = S, \quad \text{em} \quad a < x < b \quad \text{e} \quad t > 0, \quad (2.10)$$

sujeita às condições de contorno

$$a_1 \frac{\partial c(a, t)}{\partial x} + a_2 c(a, t) = g(\theta), \quad (2.10a)$$

$$b_1 \frac{\partial c(b, t)}{\partial x} + b_2 c(b, t) = 0, \quad (2.10b)$$

onde A é o operador diferencial parcial associado a problema unidimensional dependente do tempo, S é o termo fonte, as a_1 , a_2 , b_1 e b_2 constantes dependentes

das propriedades físicas e 2.10a e 2.10b são condições de contorno não homogênea e homogênea respectivamente. Além disso, $|a_1| + |a_2| \neq 0$ e $|b_1| + |b_2| \neq 0$.

Define-se como filtro a função $f^*(x)$ que deve obedecer a equação 2.11, onde A^* é um operador diferencial parcial de mais baixa ordem ou mais simplificado que o operador A da equação 2.10, tal que

$$A^*f^*(x) = S, \quad em \quad a < x < b \quad e \quad t > 0, \quad (2.11)$$

sujeita às condições de contorno não homogênea e homogênea, respectivamente,

$$a_1 \frac{\partial f^*(a)}{\partial x} + a_2 f^*(a) = g(\theta), \quad (2.11a)$$

$$b_1 \frac{\partial f^*(b)}{\partial x} + b_2 f^*(b) = 0. \quad (2.11b)$$

Após encontrar a solução $f^*(x)$, neste caso resolvendo um sistema de equações diferenciais ordinárias, cria-se um novo potencial $c^*(x, t)$ definido como:

$$c^*(x, t) = c(x, t) - f^*(x). \quad (2.12)$$

Um novo problema, chamado problema filtrado, é definido usando-se a equação 2.12 em 2.10. Como o problema original e o filtro tem as mesmas condições de contorno não homogêneas, o problema filtrado apresenta condições de contorno homogêneas, permitindo a aplicação a técnica **GITT**.

Resolve-se, via **GITT**, o problema filtrado para $c^*(x, t)$ e utiliza-se 2.12 para se ter $c(x, t)$.

2.3 Solução do Problema Transformado

Nas aplicações típicas da **GITT**, a solução do sistema **EDO** transformado é obtida numericamente. Neste trabalho, entretanto, pretende-se encontrá-la analiticamente através do uso da Transformada de Laplace juntamente com a diagonalização de matrizes.

Além disso, aqui, será considerado um sistema de equações diferenciais ordinárias linear e com coeficientes constantes. Os casos de sistemas lineares com coeficientes variáveis, ou não lineares, podem ser consultados em [43].

Seja a seguinte equação escrita em notação matricial

$$E.y'(t) + F.y(t) = 0 \quad 0 < t < \infty, \quad (2.13)$$

sujeita à condição inicial

$$y(0) = f(x). \quad (2.13a)$$

Tem-se que E e F são matrizes de elementos constantes, $y(t)$ vetor de incógnitas, $f(x)$ a condição inicial para $t = 0$ e $'$ representa a derivada.

No primeiro momento, faz-se

$$y'(t) + G.y(t) = 0 \quad 0 < t < \infty, \quad (2.14)$$

$$y(0) = f(x). \quad (2.14a)$$

onde $G = E^{-1}.F$. Aplicando-se a Transformada de Laplace, obtém-se

$$s\overline{y(s)} - y(0) + G.\overline{y(s)} = 0, \quad (2.15)$$

ou

$$s\overline{y(s)} + G.\overline{y(s)} = y(0), \quad (2.16)$$

sendo que barra superior indica potencial transformado e s é a variável independente transformada.

O próximo passo é decompor a matriz G em seus autovetores e autovalores da seguinte forma

$$G = X.D_{av}.X^{-1}, \quad (2.17)$$

onde X é a matriz de autovetores e D_{av} a matriz diagonal de autovalores de G . Este fatoramento pode ser aplicado toda vez que os autovalores da matriz C sejam distintos e não nulos.

Substitui-se a equação 2.17 em 2.16

$$s\overline{y(s)} + X.D_{av}.X^{-1}.\overline{y(s)} = y(0), \quad (2.18)$$

e faz-se

$$(s I + X.D_{av}.X^{-1}).\overline{y(s)} = y(0), \quad (2.19)$$

sendo I a matriz identidade. Como $I = X.X^{-1}$, pode-se colocar a matriz dos autovetores e sua inversa em evidência fazendo

$$(s X.X^{-1} + X.D_{av}.X^{-1}).\overline{y(s)} = y(0) \quad (2.20)$$

e assim

$$X.(s I + D_{av}).X^{-1}.\overline{y(s)} = y(0). \quad (2.21)$$

Multiplicando-se os dois lados da equação 2.21 por X^{-1} , em seguida por $(s I + D_{av})^{-1}$ e finalmente por X pode se isolar a variável $\overline{y(s)}$ e a equação passa a ser

$$\overline{y(s)} = X.(s I + D_{av})^{-1}.X^{-1}.y(0). \quad (2.22)$$

Aplicando-se a Transformada Inversa de Laplace, representada aqui pelo operador L^{-1} , obtém-se

$$L^{-1}y(s) = L^{-1}\{X.(s I + D_{av})^{-1}.X^{-1}.y(0)\}. \quad (2.23)$$

Considerando a matriz X e o vetor $y(0)$ constantes, pode-se escrever

$$y(t) = X.L^{-1}\{(s I + D_{av})^{-1}\}.X^{-1}.y(0). \quad (2.24)$$

Finalmente faz-se

$$y(t) = X.E_{av}(t).X^{-1}.y(0), \quad (2.25)$$

onde

$$E_{av}(t) = L^{-1}\{(s I + D_{av})^{-1}\}. \quad (2.26)$$

Para melhor poder avaliar a matriz $E_{av}(t)$, primeiramente a matriz $(s I + D_{av})$ será escrita em notação explícita. Em seguida, proceder-se-á sua inversão e a obtenção da Transformada Inversa de Laplace. Portanto

$$(s I + D_{av}) = s \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_N \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

em que d_i são os autovalores da matriz G (eq 2.14) ou ainda os elementos da matriz diagonal D_{av} . A equação acima pode ser reescrita na forma

$$(s I + D_{av}) = \begin{bmatrix} s + d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s + d_N \end{bmatrix}. \quad (2.28)$$

Da álgebra matricial, a inversa de uma matriz diagonal é a inversa dos seus elementos da diagonal, então

$$(s I + D_{av})^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s+d_N} \end{bmatrix}. \quad (2.29)$$

Falta apenas a Transformada Inversa de Laplace

$$E_{av}(t) = L^{-1}\{(s I + D_{av})^{-1}\} = L^{-1} \left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s+d_N} \end{bmatrix} \right\} \quad (2.30)$$

ou

$$E_{av}(t) = L^{-1}\{(s I + D_{av})^{-1}\} = \begin{bmatrix} L^{-1}\left\{\frac{1}{s+d_1}\right\} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & L^{-1}\left\{\frac{1}{s+d_2}\right\} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & L^{-1}\left\{\frac{1}{s+d_N}\right\} \end{bmatrix}. \quad (2.31)$$

A transformada inversa dos elementos é

$$L^{-1}\left\{\frac{1}{s+d_i}\right\} = e^{-t d_i}. \quad (2.32)$$

Finalmente, a matriz $E_{av}(t)$ é escrita como

$$E_{av}(t) = \begin{bmatrix} e^{-t d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-t d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-t d_N} \end{bmatrix} \quad (2.33)$$

e a solução de um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares com coeficientes constantes, representada pela equação 2.25, é encontrada.

2.4 Fórmula da Inversa Modificada

Neste trabalho também se usou uma pequena alteração na fórmula da inversa, mostrada a seguir, objetivando uma diminuição considerável na quantidade de autovalores necessários para se obter a precisão requerida em bases senoidais e cossenoidais:

$$c(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\overline{c_i(t)} \psi_i(x)}{N_i^{\frac{1}{2}}} \quad (2.34)$$

Será feita uma generalização da expressão encontrada por Wortmann [43] para o caso bidimensional aqui proposto. Em seu trabalho, o autor substituiu a fórmula 2.34 com o somatório truncado em N por

$$c(x, t) \simeq \frac{\sum_{i=1}^N \frac{\overline{c_i(t)\psi_i(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}}} + \sum_{i=1}^{N+1} \frac{\overline{c_i(t)\psi_i(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}}}}{2}. \quad (2.35)$$

Para o caso bidimensional aqui proposto, a expressão

$$C(x, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\overline{C_{im}(t)\psi_i(z)\phi_m(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}}, \quad (2.36)$$

com somatórios truncados em $enez$ e $enex$ respectivamente, será substituída por

$$\begin{aligned} C(x, z, t) \simeq & \sum_{i=0}^{enez} \sum_{m=1}^{enex} \frac{\overline{C_{i m}(t)\psi_i(z)\phi_m(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{enez} \frac{\overline{C_{i enex}(t)\psi_i(z)\phi_{enex}(x)}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_{enex}^{\frac{1}{2}}} + \\ & - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{enex} \frac{\overline{C_{enez m}(t)\psi_{enez}(z)\phi_m(x)}}{N_{enez}^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{4} \frac{\overline{C_{enez enex}(t)\psi_{enez}(z)\phi_{enex}(x)}}{N_{enez}^{\frac{1}{2}} N_{enex}^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

A equação 2.37 é obtida a partir da equação 2.36, da mesma forma que a equação 2.35 foi obtida a partir da 2.34. Referem-se respectivamente à aplicação de GITT simples e dupla.

3 SOLUÇÃO DO PROBLEMA DIFUSIVO-ADVECTIVO

Neste capítulo mostra-se o uso da técnica apresentada em um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos. Seu equacionamento clássico é fornecido pela equação de difusão-advecção bidimensional transiente completa. Entende-se por equação completa o fato de que são contemplados todos os termos difusivos e advectivos, além de seus coeficientes variáveis com as ordenadas espaciais.

3.1 O Modelo Matemático

Um efluente é liberado de uma fonte elevada a uma altura h_f , sem qualquer empuxo, num espaço bidimensional. O poluente é emitido com intensidade Q a uma taxa constante. As velocidades do vento e as difusividades turbulentas horizontal e vertical variam com a altura acima do solo e com a distância horizontal percorrida.

A proposta então é determinar a concentração do poluente em qualquer local e tempo após o início de sua liberação no espaço bidimensional mostrado na figura a seguir.

O modelo com equação difusivo-advectivo bidimensional transiente, baseado no modelo K_{zz} , pode ser expresso como

$$\begin{aligned} & \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial t} + u(x, z) \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial x} + w(x, z) \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x(x, z) \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z(x, z) \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$0 < z < z_{max}; \quad 0 \leq x \leq \infty; \quad 0 \leq t \leq \infty,$$

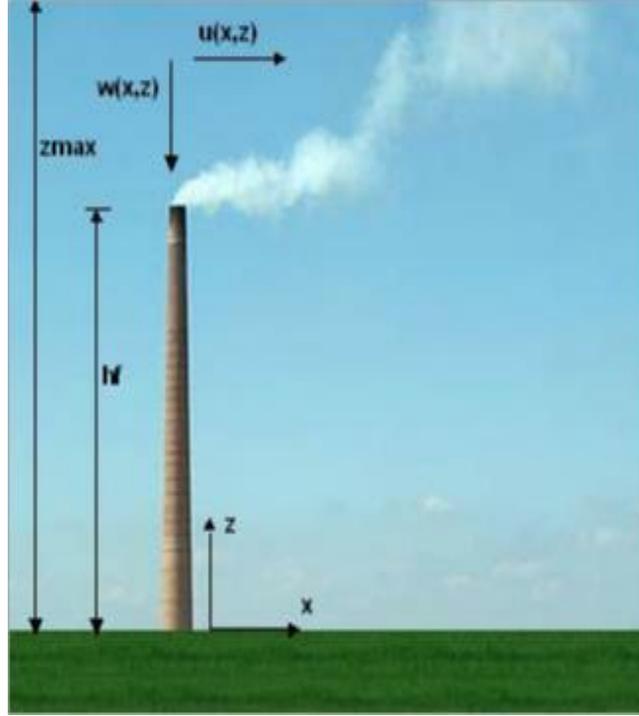


Figura 3.1: Ilustração representando a dispersão de poluentes

onde $C(x, z, t)$ é a concentração de contaminantes, $u(x, z)$ e $w(x, z)$ são, respectivamente, as componentes horizontal e vertical do vento, $k_x(x, z)$ e $k_z(x, z)$ são os coeficientes de difusão, e $zmax$ é a altura da camada limite.

As condições de contorno e inicial consideradas são:

$$C(x, z, t) = \frac{Q\delta(z - hf)}{u(0, z)} \quad em \ x = 0, \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} = 0 \quad em \ z = 0 \ e \ z = zmax, \quad (3.1b)$$

$$\frac{\partial C(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad conforme \ x \rightarrow \infty, \quad (3.1c)$$

$$C(x, z, t) = 0 \quad em \ t = 0. \quad (3.1d)$$

No sistema acima, δ é a função delta de Dirac.

3.2 Definição do Filtro Matemático

Como mencionado anteriormente, a aplicação da técnica GITT exige condições de contorno homogêneas. Tendo em vista que a condição de contorno 3.1a na componente longitudinal é não-homogênea, o problema será filtrado.

Para determinar a solução do filtro, é definida a função $F(x, z)$ que deve obedecer a uma versão estacionária com coeficientes constantes do operador da equação original 3.1 sujeita às mesmas condições de contorno.

Dessa forma, a função $F(x, z)$ obedece ao seguinte sistema de equações:

$$\bar{u} \frac{\partial F(x, z)}{\partial x} = \bar{k}_x \frac{\partial^2 F(x, z)}{\partial x^2} + \bar{k}_z \frac{\partial^2 F(x, z)}{\partial z^2}, \quad (3.2)$$

$$F(x, z) = \frac{Q\delta(z - hf)}{u(0, z)} \quad em \ x = 0, \quad (3.2a)$$

$$\frac{\partial F(x, z)}{\partial z} = 0 \quad em \ z = 0 \ e \ z = zmax, \quad (3.2b)$$

$$\frac{\partial F(x, z)}{\partial x} = 0 \quad em \ x \rightarrow \infty, \quad (3.2c)$$

onde \bar{u} , \bar{k}_x e \bar{k}_z são coeficientes constantes e correspondem ao valor médio de $u(x, z)$, $k_x(x, z)$ e $k_z(x, z)$ respectivamente.

Para garantir as condições de contorno da equação auxiliar, que aqui é chamada de filtrada, faz-se:

$$C_f(x, z, t) = C(x, z, t) - F(x, z). \quad (3.3)$$

Aplicando as condições de contorno 3.1a, 3.1b e 3.1c em $C_f(x, z, t)$ e considerando as condições de contorno de $F(x, z)$ iguais as de $C(x, z, t)$, obtém-se condições de contorno homogêneas para $C_f(x, z, t)$:

$$C_f(x, z, t) = 0 \quad \text{em } x = 0, \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial C_f(x, z, t)}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } z = zmax, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial C_f(x, z, t)}{\partial x} = 0 \quad \text{para } x \rightarrow \infty. \quad (3.6)$$

Para a solução do sistema 3.2 é aplicada a técnica da Transformada Integral Clássica, onde, segundo seu formalismo [30], primeiramente deve-se escolher e resolver o Problema de Sturm-Liouville, ou problema auxiliar, com suas respectivas condições de contorno abaixo:

$$\frac{d^2\psi_r(z)}{dz^2} + \lambda_r^2\psi_r(z) = 0 \quad \text{em } 0 < z < zmax, \quad (3.7)$$

$$\frac{d\psi_r(z)}{dz} = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } z = zmax. \quad (3.7a)$$

Resolvendo o problema auxiliar encontra-se:

$$\begin{aligned} \psi_r(z) &= 1 \quad \text{e} \quad \lambda_r = 0 \quad \text{quando} \quad r = 0, \\ \psi_r(z) &= \cos(\lambda_r z) \quad \text{e} \quad \lambda_r = \frac{r\pi}{zmax} \quad \text{quando} \quad r = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.8)$$

O próximo passo é expandir $F(x, z)$. Aplica-se a técnica em z , pois neste eixo as condições de contorno são homogêneas, o que permite seu uso. Assim, é definida a seguinte Fórmula da Inversa:

$$F(x, z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{\overline{F_r(x)} \psi_r(z)}{\sqrt{N_r}}, \quad (3.9)$$

onde a função $\psi_r(z)$ é definida na equação 3.8, $\overline{F_r(x)}$ é o potencial transformado e a norma N_r é dada por:

$$N_r = \int_0^{zmax} \psi_r^2(z) dz. \quad (3.10)$$

Usando-se a equação 3.9 na equação 3.2 produz-se

$$\bar{u} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{F_r'(x)} \psi_r(z)}{\sqrt{N_r}} = \bar{k}_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{F_r''(x)} \psi_r(z)}{\sqrt{N_r}} + \bar{k}_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{F_r(x)} \psi_r''(z)}{\sqrt{N_r}}, \quad (3.11)$$

onde ' e '' representam as derivadas de primeira e segunda ordem respectivamente.

Ainda, seguindo o formalismo da GITT, o passo seguinte é aplicar na equação 3.11 o operador $\int_0^{zmax} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz$. Assim,

$$\begin{aligned} \bar{u} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_0^{zmax} \frac{\overline{F_r'(x)} \psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right) &= \bar{k}_x \sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_0^{zmax} \frac{\overline{F_r''(x)} \psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right) + \\ &+ \bar{k}_z \sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_0^{zmax} \frac{\overline{F_r(x)} \psi_r''(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Do problema de Sturm-Liouville 3.7, pode-se escrever

$$\frac{d^2 \psi_r(z)}{dz^2} = -\lambda_r^2 \psi_r(z). \quad (3.13)$$

Substituindo, então, a equação 3.13 em 3.12 tem-se

$$\begin{aligned} \bar{u} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_0^{zmax} \frac{\overline{F_r'(x)} \psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right) &= \bar{k}_x \sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_0^{zmax} \frac{\overline{F_r''(x)} \psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right) + \\ &+ \bar{k}_z \sum_{i=0}^{\infty} \left[\int_0^{zmax} \frac{\overline{F_r(x)} (-\lambda_r^2 \psi_r(z)) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right] \end{aligned} \quad (3.14)$$

ou

$$\begin{aligned} \bar{u} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\overline{F_r'(x)} \int_0^{zmax} \frac{\psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right) &= \bar{k}_x \sum_{i=0}^{\infty} \left(\overline{F_r''(x)} \int_0^{zmax} \frac{\psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right) + \\ &+ \bar{k}_z \sum_{i=0}^{\infty} \left[\overline{F_r(x)} \int_0^{zmax} \frac{(-\lambda_r^2 \psi_r(z)) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz \right]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Aplicando a condição de ortogonalidade

$$\frac{1}{N_r^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_v \psi_r(z) \psi_j(z) dz = \begin{cases} 0 & r \neq j \\ 1 & r = j \end{cases} \quad (3.16)$$

na equação 3.15 obtém-se matrizes diagonais, podendo-se assim, representá-la como sendo a seguinte equação diferencial:

$$\bar{u} Y'(x) = \bar{k}_x Y''(x) - \lambda_j^2 \bar{k}_z Y(x), \quad (3.17)$$

onde $Y(x) = \{\overline{F_j(x)}\}$.

Para as condições de contorno, o procedimento é análogo. Primeiramente a variável $F(x, z)$ é expandida usando-se a equação 3.9 nas equações 3.2a e 3.2c, respectivamente,

$$\sum_{r=0}^{\infty} \frac{\overline{F_r(0)} \psi_r(z)}{\sqrt{N_r}} = \frac{Q \delta(z - hf)}{u(0, z)} \quad (3.18)$$

e

$$\sum_{r=0}^{\infty} \frac{\overline{F'_r(x)} \psi_r(z)}{\sqrt{N_r}} = 0 \quad \text{quando } x \rightarrow \infty. \quad (3.19)$$

Em seguida é usado o operador $\int_0^{zmax} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz$, produzindo

$$\sum_{r=0}^{\infty} \overline{F_r(0)} \int_0^{zmax} \frac{\psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz = \int_0^{zmax} \frac{Q \delta(z - hf) \psi_j(z)}{u(0, z) \sqrt{N_j}} dz. \quad (3.20)$$

e

$$\sum_{r=0}^{\infty} \overline{F'_r(x)} \int_0^{zmax} \frac{\psi_r(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_r} \sqrt{N_j}} dz = 0 \quad \text{quando } x \rightarrow \infty. \quad (3.21)$$

Realizando-se as substituições e integrações necessárias obtém-se

$$\overline{F_j(0)} = \frac{Q \cos(\lambda_j hf)}{u(0, hf) \sqrt{N_j}} \quad (3.22)$$

e

$$\overline{F'_j(x)} = 0 \quad \text{quando } x \rightarrow \infty. \quad (3.23)$$

Finalmente,

$$Y(0) = \left\{ \frac{Q \cos(\lambda_j hf)}{u(0, hf) \sqrt{N_j}} \right\} \quad (3.24)$$

e

$$Y'(x) = \{0, 0, 0, \dots\} \quad \text{quando } x \rightarrow \infty. \quad (3.25)$$

Portanto, a solução do filtro é encontrada resolvendo-se o seguinte sistema:

$$\bar{u}.Y'(x) = \bar{k}_x.Y''(x) - \lambda_j^2 \bar{k}_z.Y(x), \quad (3.26)$$

$$Y(0) = \left\{ \frac{Q \cos(\lambda_j h f)}{u(0, h f) \sqrt{N_j}} \right\}, \quad (3.26a)$$

$$Y'(x) = \{0, 0, 0, \dots\} \quad \text{quando } x \rightarrow \infty. \quad (3.26b)$$

Para resolver esse sistema, deve-se observar que haverá duas situações principais a serem definidas: se $\bar{k}_x = 0$ ou se $\bar{k}_x \neq 0$. Além disso, será considerado um valor para x_{max} grande o suficiente para representar a condição no infinito.

No caso de $\bar{k}_x = 0$, a solução será [22] [30]

$$Y(x) = \left\{ \frac{Q \cos(\lambda_j h f)}{u(0, h f) \sqrt{N_j}} e^{-\frac{\bar{k}_z \lambda_j^2 x}{\bar{u}}} \right\} \quad (3.27)$$

ou, mais precisamente,

$$\overline{F_j(x)} = \frac{Q \cos(\lambda_j h f)}{u(0, h f) \sqrt{N_j}} e^{-\frac{\bar{k}_z \lambda_j^2 x}{\bar{u}}} \quad (3.28)$$

Já quando $\bar{k}_x \neq 0$, há outra subdivisão, com três novos casos, pois analisando-se o radicando da expressão

$$Y(x) = \left\{ \frac{\bar{u} \pm \sqrt{\bar{u}^2 + 4\bar{k}_x \bar{k}_z \lambda_j^2}}{2\bar{k}_x} \right\} \quad (3.29)$$

proveniente da equação homogênea associada

$$\overline{k_x}.Y''(x) - \overline{u}.Y'(x) - \lambda_j^2 \overline{k_z}.Y(x) = 0, \quad (3.30)$$

encontra-se que:

a) Se o radicando $\overline{u}^2 + 4\overline{k_x}\overline{k_z}\lambda_j^2 = 0$, tem-se duas raízes reais e iguais.

Logo, a solução será:

$$Y(x) = \left\{ \frac{Q \cos(\lambda_j h f)}{\overline{u} \sqrt{N_j}} e^{\frac{\overline{u}x}{2\overline{k_z}}} \left(1 - x \frac{\overline{u}}{x \max \overline{u} + 2\overline{k_z}} \right) \right\}. \quad (3.31)$$

b) Se o radicando $\overline{u}^2 + 4\overline{k_x}\overline{k_z}\lambda_j^2 > 0$, tem-se duas raízes reais e distintas

e

$$Y(x) = \left\{ \frac{Q \cos(\lambda_j h f)}{\overline{u} \sqrt{N_j}} e^{a x} \left(1 - \frac{a e^{a x \max}}{b e^{b x \max} - a e^{a x \max}} \right) - \frac{Q \cos(\lambda_j h f) a e^{a x \max}}{\overline{u} \sqrt{N_j} (b e^{b x \max} - a e^{a x \max})} e^{b x} \right\}, \quad (3.32)$$

onde

$$a = \frac{\overline{u} + \sqrt{\overline{u}^2 + 4\overline{k_x}\overline{k_z}\lambda_j^2}}{2\overline{k_x}} \quad e \quad b = \frac{\overline{u} - \sqrt{\overline{u}^2 + 4\overline{k_x}\overline{k_z}\lambda_j^2}}{2\overline{k_x}}. \quad (3.33)$$

c) Já se o radicando $\overline{u}^2 + 4\overline{k_x}\overline{k_z}\lambda_j^2 < 0$, tem-se raízes complexas e pode-se dizer que

$$Y(x) = \left\{ e^{\frac{\overline{u}}{2\overline{k_x}}x} \frac{Q \cos(\lambda_j h f)}{\overline{u} \sqrt{N_j}} \left(\cos(c x) + \frac{2\overline{k_x} \sin(c x \max) - \overline{u} \cos(c x \max)}{\overline{u} \sin(c x \max) + 2\overline{k_x} \cos(c x \max)} \sin(c x) \right) \right\}, \quad (3.34)$$

onde

$$c = \frac{\sqrt{\overline{u}^2 + 4\overline{k_x}\overline{k_z}\lambda_j^2}}{2\overline{k_x}}. \quad (3.35)$$

Assim, a solução do filtro é obtida substituindo os resultados de $Y(x)$ $\left(\overline{F_j(x)} \right)$ em 3.9.

3.3 Aplicação da GITT Dupla

Tendo encontrado a solução do filtro, ainda deve-se encontrar $C_f(x, z, t)$, pois a soma destas duas soluções resultará na concentração final $C(x, z, t)$.

Para facilitar a escolha do problema auxiliar, como afirma Wortmann [43], pode-se reescrever a equação difusivo-advectiva 3.1 aplicando a regra da derivada do produto nos termos difusivos

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_f}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial t} + u \frac{\partial C_f}{\partial x} + u \frac{\partial F}{\partial x} + w \frac{\partial C_f}{\partial z} + w \frac{\partial F}{\partial z} &= \left(\frac{\partial k_x}{\partial x} \right) \frac{\partial C_f}{\partial x} + \left(\frac{\partial k_x}{\partial x} \right) \frac{\partial F}{\partial x} + \\ + k_x \frac{\partial^2 C_f}{\partial x^2} + k_x \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial k_z}{\partial z} \right) \frac{\partial C_f}{\partial z} + \left(\frac{\partial k_z}{\partial z} \right) \frac{\partial F}{\partial z} + k_z \frac{\partial^2 C_f}{\partial z^2} + k_z \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde $C_f = C_f(x, z, t)$, $F = F(x, z)$, $u = u(x, z)$, $w = w(x, z)$, $k_x = k_x(x, z)$ e $k_z = k_z(x, z)$.

A técnica GITT é aplicada primeiramente na variável transversal ao escoamento, sendo sua aplicação análoga à do filtro. Utiliza-se a seguinte Fórmula da Inversa:

$$C_f(x, z, t) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{C_{fi}(x, t)} \psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}, \quad (3.37)$$

onde $\overline{C_{fi}(x, t)}$ é o potencial transformado na variável em questão.

Percebe-se que as condições de contorno de $C_f(x, z, t)$ e de $F(x, z)$ são as mesmas, logo tem-se o mesmo Problema de Sturm-Liouville 3.7 e 3.7a e consequentemente os mesmos autovalores e autovetores 3.8.

Substituindo 3.37 em 3.36 e isolando os termos que contém C_f tem-se:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\partial \overline{C_{fi}}}{\partial t} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) + \sum_{i=0}^{\infty} \left(u \frac{\partial \overline{C_{fi}}}{\partial x} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) + \sum_{i=0}^{\infty} \left(w \frac{\partial \overline{C_{fi}}}{\partial z} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) - \left(\frac{\partial k_x}{\partial x} \right) \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\partial \overline{C_{fi}}}{\partial x} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) + \\
& -k_x \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 \overline{C_{fi}}}{\partial x^2} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) - \left(\frac{\partial k_z}{\partial z} \right) \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\partial \overline{C_{fi}}}{\partial z} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) - k_z \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 \overline{C_{fi}}}{\partial z^2} \frac{\psi_i(z)}{\sqrt{N_i}} \right) = \\
& = -u \frac{\partial F}{\partial x} - w \frac{\partial F}{\partial z} + \left(\frac{\partial k_x}{\partial x} \right) \frac{\partial F}{\partial x} + k_x \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} + \left(\frac{\partial k_z}{\partial z} \right) \frac{\partial F}{\partial z} + k_z \frac{\partial^2 F}{\partial z^2}.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

O próximo passo consiste em operar a equação 3.38 pelo operador $\int_0^{zmax} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz$. Além disso, do problema auxiliar tem-se $\psi_i''(z) = -\lambda_i^2 \psi_i(z)$. Assim, pode-se escrever

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\partial \overline{C_{fi}}}{\partial t} O_{ij} \right) + \sum_{i=0}^{\infty} \left[\overline{C_{fi}} (B_{ij}(x) - G_{ij}(x) + \lambda_i^2 H_{ij}(x)) \right] + \\
& + \sum_{i=0}^{\infty} \left[\frac{\partial \overline{C_{fi}}}{\partial x} (A_{ij}(x) - E_{ij}(x)) \right] - \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{\partial^2 \overline{C_{fi}}}{\partial x^2} J_{ij}(x) \right) = V_j(x),
\end{aligned} \tag{3.39}$$

onde

$$O_{ij} = \int_0^{zmax} \frac{\psi_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz, \quad (3.39a)$$

$$A_{ij}(x) = \int_0^{zmax} u(x, z) \frac{\psi_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz, \quad (3.39b)$$

$$B_{ij}(x) = \int_0^{zmax} w(x, z) \frac{\psi'_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz, \quad (3.39c)$$

$$J_{ij}(x) = \int_0^{zmax} k_x(x, z) \frac{\psi_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz, \quad (3.39d)$$

$$E_{ij}(x) = \int_0^{zmax} \left(\frac{\partial k_x}{\partial x} \right) \frac{\psi_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz, \quad (3.39e)$$

$$G_{ij}(x) = \int_0^{zmax} \left(\frac{\partial k_z}{\partial z} \right) \frac{\psi'_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz, \quad (3.39f)$$

$$H_{ij}(x) = \int_0^{zmax} k_z(x, z) \frac{\psi_i(z)\psi_j(z)}{\sqrt{N_i}\sqrt{N_j}} dz, \quad (3.39g)$$

$$\begin{aligned} V_j(x) = & - \int_0^{zmax} u(x, z) \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz - \int_0^{zmax} w(x, z) \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz + \int_0^{zmax} \left(\frac{\partial k_x}{\partial x} \right) \frac{\partial F}{\partial x} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz + \\ & + \int_0^{zmax} k_x \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz + \int_0^{zmax} k_z \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz + \int_0^{zmax} \left(\frac{\partial k_z}{\partial z} \right) \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz, \end{aligned} \quad (3.40)$$

e onde $k_z = k_z(x, z)$ e $k_x = k_x(x, z)$.

Para encontrar $\overline{C_{fi}}$, aplica-se a técnica novamente na variável longitudinal de forma análoga. Como explicitado anteriormente, deve-se calcular o problema de Sturm-Liouville. Neste caso, tem-se:

$$\frac{d^2\phi_m(x)}{dx^2} + \beta_m^2\phi_m(x) = 0 \quad em \quad 0 < x < xmax, \quad (3.41)$$

$$\frac{d\phi_m(x)}{dx} = 0 \quad quando \quad x \rightarrow \infty, \quad (3.41a)$$

$$\phi_m(x) = 0 \quad quando \quad x = 0. \quad (3.41b)$$

Resolvendo o problema auxiliar obtém-se:

$$\phi_m(x) = \sin(\beta_m x) \quad e \quad \beta_m = \frac{(2m-1)\pi}{2x_{max}} \quad \text{para} \quad m = 1, 2, \dots, \quad (3.42)$$

onde x_{max} é grande o suficiente para representar a condição no infinito.

É utilizada a seguinte Fórmula da Inversa na aplicação da GITT em x:

$$\overline{C_{fi}(x, t)} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\overline{\overline{C_{fim}(t)}\phi_m(x)}}{\sqrt{N_m}}, \quad (3.43)$$

onde $\overline{\overline{C_{fim}(t)}}$ é a variável dependente bi-transformada.

Substituindo 3.43 em 3.39 tem-se:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(O_{ij} \frac{\partial \overline{\overline{C_{fim}(t)}\phi_m(x)}}{\partial t} \frac{1}{\sqrt{N_m}} \right) + \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left[(B_{ij}(x) - G_{ij}(x) + \lambda_i^2 H_{ij}(x)) \frac{\overline{\overline{C_{fim}(t)}\phi_m(x)}}{\sqrt{N_m}} \right] + \\ & + \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left[(A_{ij}(x) - E_{ij}(x)) \frac{\overline{\overline{C_{fim}(t)}\phi'_m(x)}}{\sqrt{N_m}} \right] - \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(J_{ij}(x) \frac{\overline{\overline{C_{fim}(t)}\phi''_m(x)}}{\sqrt{N_m}} \right) = V_j(x). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Aplicando o operador $\int_0^{x_{max}} \frac{\phi_n(x)}{\sqrt{N_n}} dx$ em 3.44 e lembrando do problema auxiliar que $\phi''_m(x) = -\beta_m^2 \phi_m(x)$, pode-se escrever:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(O_{ij} \frac{\partial \overline{C_{fim}(t)}}{\partial t} \int_0^{xmax} \frac{\phi_m(x) \phi_n(x)}{\sqrt{N_m} \sqrt{N_n}} dx \right) + \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\overline{C_{fim}(t)} \int_0^{xmax} J_{ij}(x) \frac{\beta_m^2 \phi_m(x) \phi_n(x)}{\sqrt{N_m} \sqrt{N_n}} \right) + \\
& + \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\overline{C_{fim}(t)} \int_0^{xmax} (B_{ij}(x) - G_{ij}(x) + \lambda_i^2 H_{ij}(x)) \frac{\phi_m(x) \phi_n(x)}{\sqrt{N_m} \sqrt{N_n}} dx \right] + \\
& + \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\overline{C_{fim}(t)} \int_0^{xmax} (A_{ij}(x) - E_{ij}(x)) \frac{\phi'_m(x) \phi_n(x)}{\sqrt{N_m} \sqrt{N_n}} dx \right] = \int_0^{xmax} V_j(x) \frac{\phi_n(x)}{\sqrt{N_n}} dx.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Utilizando a propriedade da ortogonalidade e após algumas manipulações algébricas, o sistema EDO acima pode ser truncado em uma ordem suficientemente grande de autovalores para as duas transformações integrais efetuadas e reescrito em notação matricial

$$T' + P.T = V, \tag{3.46}$$

onde

$$T = \{ \overline{C_{fim}(t)} \}, \tag{3.46a}$$

$$V = \left\{ \int_0^{xmax} V_j(x) \frac{\phi_n(x)}{\sqrt{N_n}} dx \right\}, \tag{3.46b}$$

P é a matriz de ordem $enex \times enez$ e $enex \times enez$ cujos elementos são dados por

$$\begin{aligned}
& \left\{ \int_0^{xmax} (B_{ij}(x) - G_{ij}(x) + \lambda_i^2 H_{ij}(x)) \frac{\phi_m(x) \phi_n(x)}{\sqrt{N_m} \sqrt{N_n}} dx + \right. \\
& \left. + \beta_m^2 \int_0^{xmax} J_{ij}(x) \frac{\phi_m(x) \phi_n(x)}{\sqrt{N_m} \sqrt{N_n}} dx + \int_0^{xmax} (A_{ij}(x) - E_{ij}(x)) \frac{\phi'_m(x) \phi_n(x)}{\sqrt{N_m} \sqrt{N_n}} dx \right\},
\end{aligned} \tag{3.47}$$

onde $enex$ é a ordem de truncamento da fórmula 3.43 e $enez$ a da fórmula 3.37.

O que foi apresentado até aqui segue basicamente os passos da GIT [10]. Tipicamente, os problemas transformados como a equação 3.46, são resolvidos numericamente. Neste trabalho, no entanto, o problema transformado será resolvido analiticamente através do uso de Transformada de Laplace e diagonalização de matrizes. Adota-se a metodologia utilizada por Wortmann [43].

3.4 Solução do Sistema EDO Transformado

Pode-se observar que, na equação 3.46, os coeficientes são constantes em relação à variável t . Dessa forma, aplicando-se Transformada de Laplace tem-se:

$$s\overline{T(s)} + P.\overline{T(s)} = \frac{V}{s} + T(0) \quad e \quad (3.48)$$

$$(sI + P) . \overline{T(s)} = \frac{V}{s} + T(0) \quad (3.49)$$

onde I é a matriz identidade.

Assume-se que P é não degenerada e que pode ser fatorada em seus autovalores e autovetores. Portanto P pode ser reescrita como $P = X.D.X^{-1}$, onde X é a matriz de autovetores de P e D a matriz diagonal de autovalores. Então, substituindo P em 3.49 e reorganizando tem-se:

$$X . (sI + P) . X^{-1} . \overline{T(s)} = \frac{V}{s} + T(0). \quad (3.50)$$

Multiplicando a equação 3.50 por $X . (sI + P)^{-1} . X^{-1}$ pode-se escrever:

$$\overline{T(s)} = X . (sI + P)^{-1} . X^{-1} . \frac{V}{s} + X . (sI + P)^{-1} . X^{-1} . T(0). \quad (3.51)$$

Aplicando a técnica de Transformada de Laplace Inversa em 3.51 tem-se:

$$T(t) = X.Ra(t).X^{-1}.V + X.Rb(t).X^{-1}.T(0), \quad (3.52)$$

onde $Ra(t) = \{-\frac{e^{-t\beta_m}-1}{\beta_m}\}$ e $Rb(t) = \{e^{-t\beta_m}\}$.

Para calcular $T(t)$, ainda deve-se encontrar $T(0)$. Para isso, são utilizadas a condição inicial 3.1d e a equação 3.3. Depois, substituindo-se a expansão 3.9 nessa equação e aplicando o operador $\int_0^{zmax} \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz$ encontra-se:

$$\int_0^{zmax} C_f(x, z, 0) \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz = - \sum_{i=0}^{\infty} \left(\int_0^{zmax} \frac{\overline{F_i(x)} \psi_i(z) \psi_j(z)}{\sqrt{N_i} \sqrt{N_j}} dz \right). \quad (3.53)$$

Utilizando a propriedade da ortogonalidade tem-se:

$$\int_0^{zmax} C_f(x, z, 0) \frac{\psi_j(z)}{\sqrt{N_j}} dz = -\overline{F_j(x)}. \quad (3.54)$$

Sabe-se, no entanto, que

$$C_f(x, z, 0) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\overline{C_{fi}(x, 0)} \psi_i(z)}{\sqrt{N_i}}. \quad (3.55)$$

Logo, substituindo 3.55 em 3.57 e novamente utilizando a propriedade da ortogonalidade resulta em

$$\overline{C_{fi}(x, 0)} = -\overline{F_j(x)}. \quad (3.56)$$

Da mesma forma, utilizando-se a fórmula da inversa 3.43 e realizando as devidas integrações e simplificações, produz-se:

$$T(0) = \left\{ \int_0^{xmax} \left(-\overline{F_j(x)} \frac{\sin(\beta_n(x))}{\sqrt{N_n}} \right) dx \right\}. \quad (3.57)$$

Finalmente, o potencial filtrado é calculado usando a fórmula da inversa modificada

$$\begin{aligned}
C_f(x, z, t) \simeq & \sum_{i=0}^{enez} \sum_{m=1}^{enex} \frac{\overline{\overline{C_{fi} m(t) \psi_i(z) \phi_m(x)}}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{enez} \frac{\overline{\overline{C_{fi} enex(t) \psi_i(z) \phi_{enex}(x)}}}{N_i^{\frac{1}{2}} N_{enex}^{\frac{1}{2}}} + \\
& - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{enex} \frac{\overline{\overline{C_{fenez} m(t) \psi_{enez}(z) \phi_m(x)}}}{N_{enez}^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} + \frac{1}{4} \frac{\overline{\overline{C_{fenez} enex(t) \psi_{enez}(z) \phi_{enex}(x)}}}{N_{enez}^{\frac{1}{2}} N_{enex}^{\frac{1}{2}}}
\end{aligned} \tag{3.58}$$

e, portanto, a solução do problema proposto é dada por $C(x, z, t) = C_f(x, z, t) + F(x, z)$ onde $C_f(x, z, t)$ e $F(x, z)$ já são conhecidos.

Está formalizada a solução por **GITT** dupla e Transformada de Laplace para a equação 3.1. É importante ressaltar que o filtro utilizado além de propiciar a definição de um potencial transformado com condições de contorno homogêneas, foi construído com os termos mais relevantes do ponto de vista das características físicas do problema original. Por outro lado, a aplicação da técnica na sua solução resultou em um problema transformado que se caracteriza por ser um sistema EDO não acoplado 3.17. Isso significa que a solução do filtro pode ser obtida para elevadas ordens de truncamento (2000 ou mais) da sua fórmula da inversa sem aumento significativo do custo computacional. Ora, se o filtro concentra as informações físicas mais relevantes e, por outro lado, pode ser resolvido para precisões muito boas, a solução do problema filtrado poderá ser encontrada, com boa convergência, para ordens de truncamento relativamente baixas. E, no caso do problema filtrado, o custo computacional é significativamente dependente das ordens de truncamento $enex$ e $enez$, uma vez que se precisa diagonalizar, mediante cálculo dos autovalores e autovetores, matrizes de ordem $enex \times enex$ e $enez \times enez$. O uso deste filtro, portanto, permite a obtenção de soluções muito precisas e um custo computacional razoável.

4 VALIDAÇÃO DO MODELO

O processo de validação do modelo tem como objetivo verificar o procedimento utilizado, bem como precisão dos cálculos efetuados e o acerto do código computacional escrito. Neste sentido, são utilizados neste trabalho dados experimentais para comparação e índices estatísticos propostos por Hanna [21].

4.1 Dados experimentais

Com o intuito de avaliar o desempenho do modelo, foram confrontados dados gerados pelo mesmo com dados observados do experimento de Copenhagen. Este é um experimento de fonte alta, pois a razão entre a altura onde ocorre a emissão de poluentes (hf) e a altura da Camada Limite Convectiva (CLC) ($zmax$) é maior que 0.1. Isto é:

se $\frac{hf}{zmax} < 0.1$ o experimento é considerado de fonte baixa;

se $\frac{hf}{zmax} > 0.1$ o experimento é considerado de fonte alta.

Além disso, a razão entre a altura da CLC ($zmax$) e do comprimento de Monin-Obukov (L) determina se o experimento é de convecção fraca, moderada ou alta. Ou seja:

se $\frac{zmax}{|L|} < 5$ tem-se convecção fraca;

se $5 < \frac{zmax}{|L|} < 10$ tem-se convecção moderada;

se $\frac{zmax}{|L|} > 10$ tem-se convecção alta.

4.1.1 O experimento de Copenhagen

Os experimentos de dispersão de poluentes em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning et al.[18] e Gryning e Lyck [19], consistiram na liberação do gás traçador hexafluoreto de enxofre(SF_6) na região norte de Copenhagen .

O traçador foi liberado sem empuxo de uma fonte de altura $115m$ e coletado por três arcos perpendiculares ao vento médio. Os arcos foram posicionados de 2 a $6Km$ do ponto no qual ocorreu a liberação do traçador. A liberação dos traçadores iniciou tipicamente $1h$ antes do início da medição feita pelos arcos e parou no final do período da medição destes. A média das medidas feitas pelos arcos foi de $1h$.

As concentrações integradas lateralmente (normalizadas pela taxa de emissão Q) foram observadas ao nível do solo ($z = 0$). A rugosidade da região era de $0,6m$.

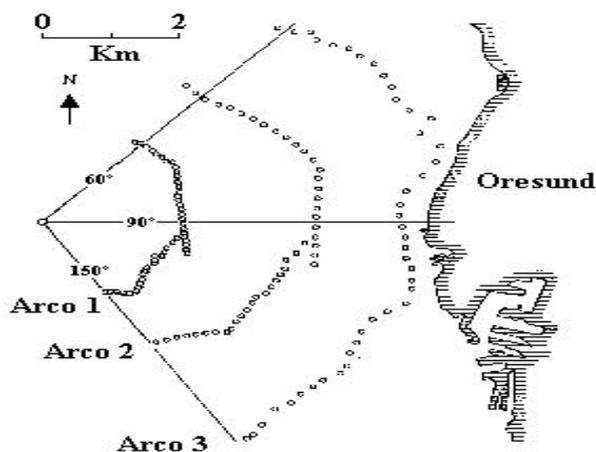


Figura 4.1: Experimento de Copenhagen

Na Tabela 4.1 são exibidos os dados micrometeorológicos dos experimentos de dispersão de Copenhagen na CLC.

Tabela 4.1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen

Exp.	u (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	w_* (ms^{-1})	$zmax(z_i)$ (m)	$\frac{hf}{zmax}$	$\frac{zmax}{ L }$
1	3.4	0.36	-37	1.8	1980	0.06	53.51
2	10.6	0.73	-292	1.8	1920	0.06	6.57
3	5.0	0.38	-71	1.3	1120	0.1	15.77
4	4.6	0.38	-133	0.7	390	0.29	2.93
5	6.7	0.45	-444	0.7	820	0.14	1.85
6	13.2	1.05	-432	2.0	1300	0.09	3.01
7	7.6	0.64	-104	2.2	1850	0.06	17.78
8	9.4	0.69	-56	2.2	810	0.14	14.46
9	10.5	0.75	-289	1.9	2090	0.06	7.23

4.1.2 O experimento de Copenhagen (Transiente)

Uma vez que a subseção 4.1.1 se refere à validação do código computacional para o problema em regime permanente, nesta subseção o mesmo será feito para regime transiente. Para tanto, serão comparados os resultados obtidos pelo código com os dados experimentais citados em Gryning et al.[18].

Novamente, a liberação dos traçadores iniciou tipicamente $1h$ antes do início da medição. O local do experimento é predominantemente residencial com rugosidade de $0,6$ m. Geralmente, faz-se uma média de $1h$ das medidas feitas nos arcos. Entretanto, nesses dados de Gryning et al.[18] as medidas e as médias das concentrações e dos valores meteorológicos são feitas, respectivamente, a cada 20 minutos e 10 minutos. As Tabelas 4.2, 4.3 e 4.4 apresentam a velocidade de fricção, o comprimento de Monin-Obukhov e a altura da Camada Limite (somente um valor para cada experimento), respectivamente, usadas nas simulações.

Cabe ressaltar que o dados meteorológicos para o experimento 6 de Copenhagen não são informados na referência citada.

Tabela 4.2: Velocidade de fricção (u_*) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 minutos.

Int. de tempo \ <i>Exp.</i>	1	2	3	4	5	7	8	9
1	0.36	0.68	0.46	0.56	0.58	0.48	0.65	0.72
2	0.37	0.67	0.45	0.51	0.52	0.48	0.79	0.73
3	0.40	0.81	0.47	0.37	0.51	0.57	0.67	0.60
4	0.43	0.68	0.39	0.44	0.58	0.62	0.67	0.59
5	0.35	0.75	0.39	0.48	0.59	0.53	0.68	0.65
6	0.34	0.74	0.40	0.48	0.52	0.65	0.65	0.71
7	0.42	0.76	0.40	0.39	0.52	0.63	0.68	0.73
8	0.43	0.82	0.41	0.40	0.45	0.65	0.67	0.73
9	0.40	0.76	0.31	0.39	0.44	0.66	0.73	0.73
10	0.37	0.73	0.34	0.39	0.44	0.62	0.73	0.66
11	0.35	0.69	0.39	0.39	0.44	0.52	0.75	0.67
12	0.36	0.66	0.40	0.39	0.43	0.62	0.69	0.74

Tabela 4.3: Comprimento de Monin-Obukhov (L) para diferentes intervalos de tempo. Cada intervalo corresponde a 10 minutos.

Int. de tempo \ <i>Exp.</i>	1	2	3	4	5	7	8	9
1	-26	-178	-152	-75	-492	-71	-71	-793
2	-23	-227	-194	-42	-215	-80	-85	-471
3	-83	-311	-106	-23	-368	-64	-47	-202
4	-42	-160	-101	-32	-735	-111	-49	-366
5	-36	-203	-129	-71	-366	-177	-45	-633
6	-42	-286	-70	-80	-273	-67	-63	-13588
7	-47	-155	-83	-83	-273	-87	-41	-593
8	-38	-228	-60	-101	-262	-71	-47	-471
9	-83	-184	-106	-129	-395	-56	-70	-389
10	-21	-389	-42	-129	-395	-111	-64	-375
11	-32	-133	-101	-129	-395	-215	-52	-262
12	-29	-375	-70	-129	-759	-123	-39	-252

Tabela 4.4: Altura da Camada Limite Convectiva (zmax)

Exp.	1	2	3	4	5	7	8	9
	1980	1920	1120	390	820	1850	810	2090

4.2 Parametrização da Turbulência

Neste trabalho, como já mencionado anteriormente, contemplou-se no modelo os coeficientes de advecção e difusão variáveis. Suas parametrizações apropriadas complementam a modelagem do transporte de poluentes na atmosfera.

4.2.1 Coeficientes de Difusão

São utilizados dois coeficientes de difusão vertical propostos por Degrazia et al. ([16] e [15]). Eles são formulados a partir da teoria de difusão de Taylor e o espectro de energia cinética turbulenta.

O primeiro coeficiente, válido para grandes tempos de difusão e deduzido por Degrazia em 1997 [16], é:

$$\frac{K_z(x,z)}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{-\frac{4z}{z_i}} - 0.0003 e^{\frac{8z}{z_i}}\right]. \quad (4.1)$$

O outro coeficiente, proposto em 2001 também por Degrazia [15] e válido para distâncias longe da fonte, pode ser escrito como:

$$\frac{K_z(x,z)}{w_* z_i} = 0.19 \psi^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{-\frac{4z}{z_i}} - 0.0003 e^{\frac{8z}{z_i}}\right]^{\frac{4}{3}}, \quad (4.2)$$

onde a função dissipação é descrita como:

$$\psi^{\frac{1}{3}} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-\frac{2}{3}} + 0.75\right]^{\frac{1}{2}}, \quad (4.3)$$

e onde L é o comprimento de Monin-Obukhov.

Os coeficientes de difusão mostrados (4.1 e 4.2) serão utilizados na simulação do modelo juntamente com o experimento de Copenhagen já descrito.

4.2.2 Perfil da velocidade média do Vento

O perfil da velocidade média do vento é parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML (Berkowicz et al., 1986 [4]):

$$u(x, z) = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) + \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b, \quad (4.4)$$

$$u(x, z) = u(z_b) \quad \text{se } z > z_b, \quad (4.5)$$

onde $z_b = \min [|L|, 0.1z_i]$, $k = 0.4$ é a constante de Von Karman, u_* é a velocidade de fricção, z_0 o comprimento de rugosidade e Ψ_m é a função estabilidade dada por (Paulsen, 1970 [34]):

$$\Psi_m = 2 \ln \left[\frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[\frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2} \quad (4.6)$$

com A definido por:

$$A = \left(1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/4}. \quad (4.7)$$

O perfil da velocidade média do vento derivado da equação (4.4) será utilizado na simulação do modelo no experimento de Copenhagen já explicitado.

4.3 Índices Estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados no experimento de Copenhagen é feita através de índices estatísticos presentes na literatura.

Os índices estatísticos aplicados baseiam-se em estudos desenvolvidos por Hanna [21], que utilizam um procedimento padrão clássico da área de dispersão de poluentes na atmosfera. Em sua notação, os índices o e p indicam as quantidades observadas e previstas, respectivamente, \bar{C} é a concentração de poluentes e σ é o desvio padrão.

Pode-se definir os índices da seguinte forma:

1. Erro quadrático médio normalizado: $Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p}$

Informa sobre todos os desvios entre concentrações dos modelos e observadas. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.

2. Coeficiente de correlação: $Cor = \frac{\overline{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p}$

Descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para um boa performance o seu valor deve ser próximo a 1.

3. Fator de dois: $Fa2$

Fração de dados (%) que estão entre $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$

4. Fração de Inclinação: $Fb = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5 (\overline{C_o} + \overline{C_p})}$

Informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

5. Desvio fracional padrão: $F_s = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}$

O valor ótimo é zero.

5 RESULTADOS

Os resultados das simulações da solução analítica do modelo apresentado neste trabalho, empregando perfis de $K_z(x, z)$ dados pelas equações 4.1 e 4.2 e perfil de u dado pela equação 4.4 agora são apresentados. Para isso, foram usados dados do experimento de Copenhagen (seção 4.1.1). Além disso, a versatilidade do código é testada com um exemplo fictício em que se usa uma função trigonométrica dependente da variável longitudinal para simular a existência da componente vertical da velocidade do vento.

Para as tabelas 5.1,5.2 e 5.3; bem como para as figuras 5.1,5.3 e 5.5; o código foi rodado levando-se em consideração um tempo de 18000s. Verificou-se, por processo de tentativas, que o comportamento da solução não se altera para tempos superiores a este, o que permitiu concluir que a partir de 18000s o problema pode ser considerado no regime permanente.

As simulações foram realizadas fazendo-se uso do aplicativo Fortran90 em um microcomputador ATHLON XP 2200 1.79 GHz com 496 MB de memória RAM.

Primeiramente, são mostradas nas tabelas 5.1,5.2 e 5.3, as convergências numéricas dos resultados de concentração obtidas para diferentes números de autovalores $ener$, $enex$ e $enez$, respectivamente. Pode-se verificar a convergência dos resultados, com vários algarismos significativos.

Tabela 5.1: Convergência da concentração utilizando a equação 4.1, variando $ener$ e mantendo $enex = enez = 5$

$ener$	$x = 1 m$	$x = 10 m$	$x = 100 m$	$x = 1000 m$
5	0.0004375	0.0004358	0.00041975	0.00031451
10	0.0005090	0.0005057	0.00047546	0.00032227
15	0.0006935	0.0006705	0.00053000	0.00032337
20	0.0011992	0.0010880	0.00059486	0.00032423
25	0.0014874	0.0013027	0.00060696	0.00032453
30	0.0015223	0.0013243	0.00060718	0.00032450
35	0.0018355	0.0014838	0.00060739	0.00032438
40	0.0022935	0.0016777	0.00060743	0.00032428
45	0.0024278	0.0017244	0.00060743	0.00032425
50	0.0025088	0.0017430	0.00060743	0.00032427
60	0.0032177	0.0018558	0.00060744	0.00032433
70	0.0034226	0.0018691	0.00060743	0.00032433
80	0.0039590	0.0018880	0.00060743	0.00032430
90	0.0042068	0.0018903	0.00060743	0.00032431
100	0.0045404	0.0018919	0.00060743	0.00032432
150	0.0055452	0.0018922	0.00060747	0.00032461
200	0.0058682	0.0018922	0.00060747	0.00032461
250	0.0059608	0.0018922	0.00060747	0.00032462
300	0.0059807	0.0018922	0.00060747	0.00032461
350	0.0059831	0.0018922	0.00060747	0.00032461
400	0.0059833	0.0018922	0.00060747	0.00032461
450	0.0059834	0.0018922	0.00060747	0.00032461
500	0.0059834	0.0018922	0.00060747	0.00032461
1000	0.0059834	0.0018922	0.00060747	0.00032461
1500	0.0059834	0.0018922	0.00060747	0.00032461
2000	0.0059834	0.0018922	0.00060747	0.00032461

Tabela 5.2: Convergência da concentração utilizando a equação 4.1, variando $enez$ e mantendo $enex = ener = 5$

$enez$	$x = 1 m$	$x = 10 m$	$x = 100 m$	$x = 1000 m$
1	0.00043750	0.00043568	0.00041831	0.00030141
2	0.00043750	0.00043567	0.00041822	0.00030046
3	0.00043750	0.00043570	0.00041851	0.00030306
4	0.00043751	0.00043576	0.00041906	0.00030815
5	0.00043752	0.00043583	0.00041975	0.00031451
10	0.00043754	0.00043602	0.00041975	0.00033160
15	0.00043753	0.00043601	0.00042166	0.00033089
20	0.00043753	0.00043598	0.00042156	0.00032827
25	0.00043753	0.00043595	0.00042127	0.00032607
30	0.00043753	0.00043595	0.00042102	0.00032554
35	0.00043753	0.00043595	0.00042096	0.00032558
40	0.00043753	0.00043595	0.00042097	0.00032591
45	0.00043753	0.00043596	0.00042100	0.00032620
50	0.00043753	0.00043596	0.00042104	0.00032615
60	0.00043753	0.00043595	0.00042103	0.00032593
70	0.00043753	0.00043595	0.00042101	0.00032589

Tabela 5.3: Convergência da concentração utilizando a equação 4.1, variando $enex$ e mantendo $enez = ener = 5$

$enex$	$x = 1 m$	$x = 10 m$	$x = 100 m$	$x = 1000 m$
1	0.00043750	0.00043571	0.00041859	0.00030405
2	0.00043751	0.00043573	0.00041881	0.00030615
3	0.00043751	0.00043576	0.00041862	0.00030437
4	0.00043751	0.00043581	0.00041955	0.00031292
5	0.00043752	0.00043583	0.00041975	0.00031451
10	0.00043753	0.00043593	0.00042080	0.00032049
15	0.00043753	0.00043601	0.00042107	0.00032074
20	0.00043753	0.00043596	0.00042148	0.00032105
25	0.00043753	0.00043600	0.00042145	0.00032094
30	0.00043754	0.00043600	0.00042174	0.00032128
35	0.00043754	0.00043603	0.00042162	0.00032114
40	0.00043754	0.00043602	0.00042186	0.00032128
45	0.00043754	0.00043604	0.00042171	0.00032117
50	0.00043754	0.00043603	0.00042193	0.00032132
60	0.00043754	0.00043605	0.00042197	0.00032131
70	0.00043754	0.00043606	0.00042199	0.00032133
80	0.00043754	0.00043607	0.00042200	0.00032132
90	0.00043754	0.00043607	0.00042200	0.00032132
100	0.00043754	0.00043607	0.00042200	0.00032132

Observa-se, pela figura 5.1, a convergência numérica dos resultados da concentração de poluentes expostos na tabela 5.1 com o aumento dos autovalores $ener$. Utilizou-se $z = 1m$.

Na figura 5.2 é mostrado o gráfico do tempo de processamento para se calcular a concentração em função do número de autovalores $ener$.

As figuras 5.3 e 5.4 apresentam, respectivamente, a convergência dos resultados da concentração de poluentes expostos na tabela 5.2 com o aumento dos autovalores $enez$ e o tempo de processamento para se calcular a concentração em função do número de autovalores $enez$. Novamente, os gráficos foram obtidos utilizando-se $z = 1m$.

Da mesma forma, as figuras 5.5 e 5.6 apresentam, respectivamente, a convergência dos resultados da concentração de poluentes expostos na tabela 5.3 com o aumento dos autovalores $enex$ e o tempo de processamento para se calcular a concentração em função do número de autovalores $enex$.

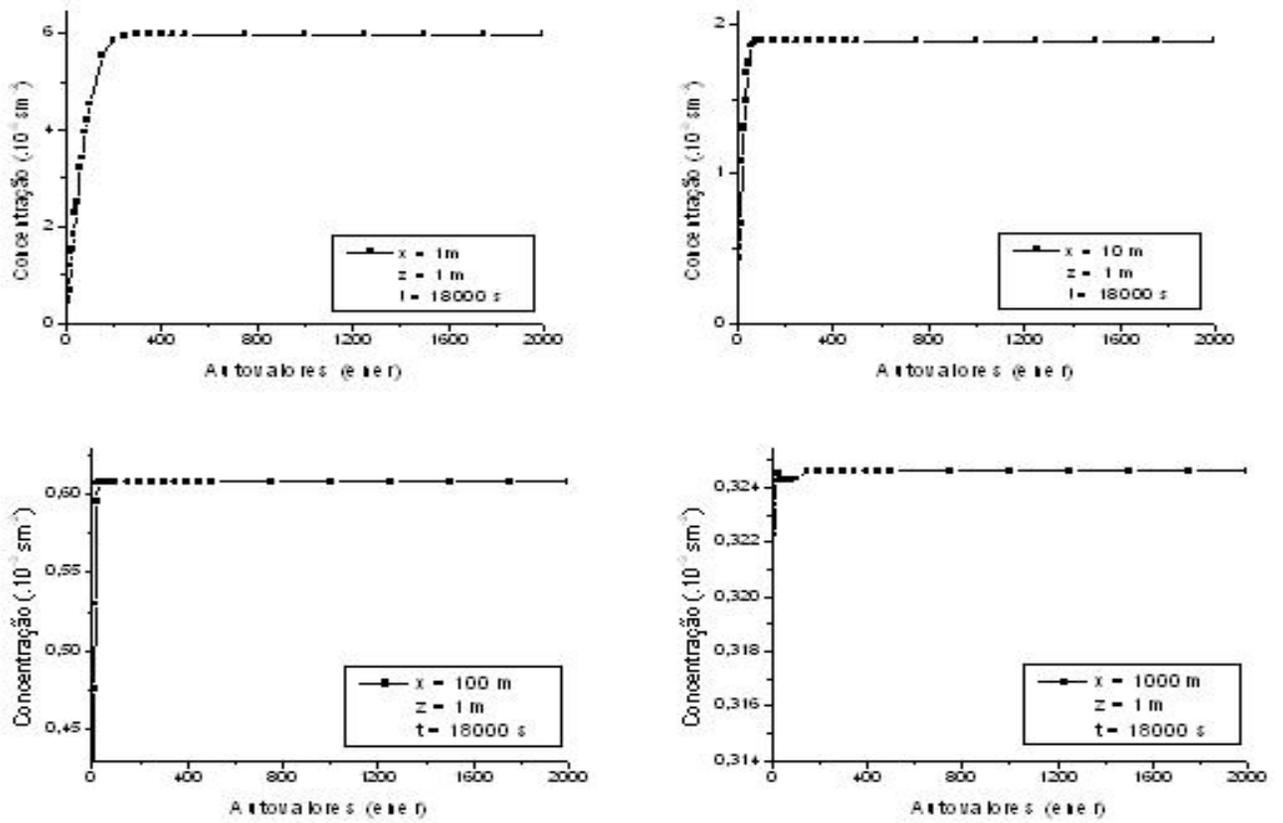


Figura 5.1: Convergência da concentração de poluentes com a variação de ener

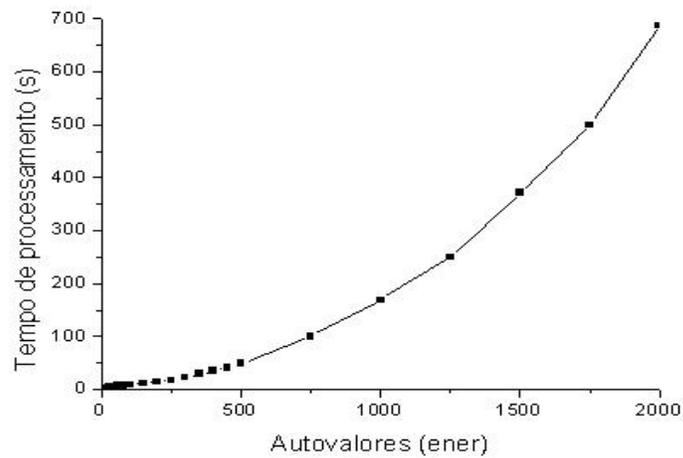


Figura 5.2: Tempo de processamento em função do número de autovalores ener em que $en_x=5$ e $en_z=5$

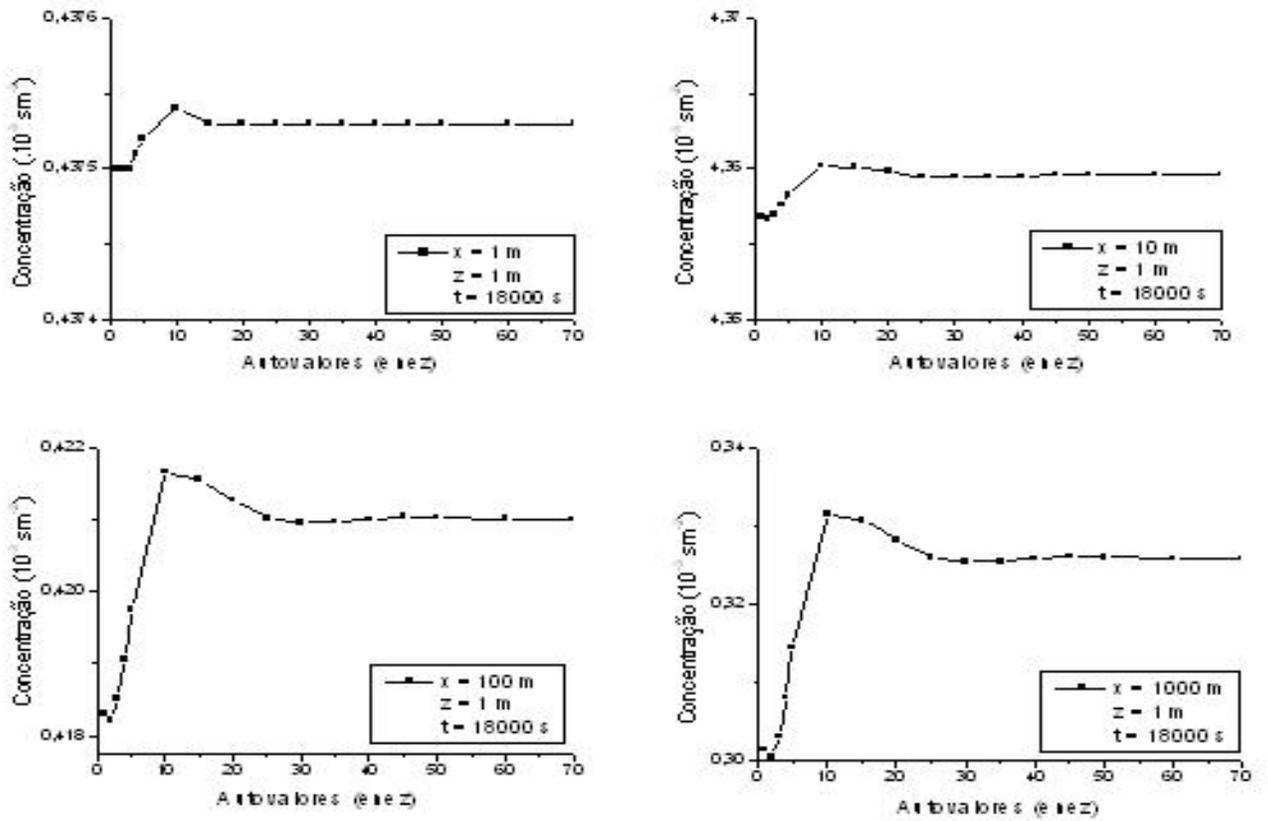


Figura 5.3: Convergência da concentração de poluentes com a variação de enez

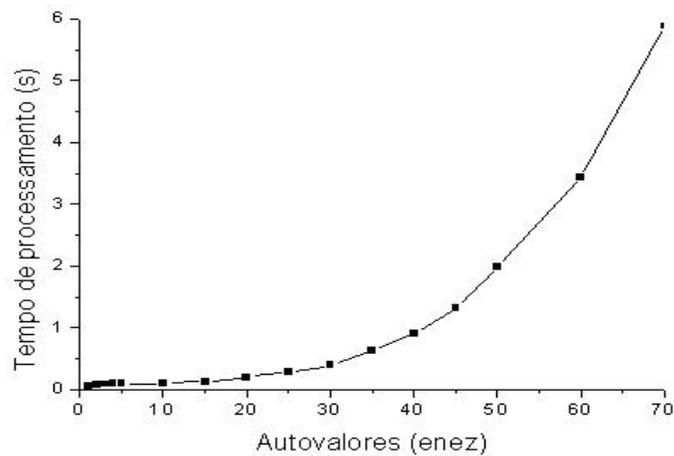


Figura 5.4: Tempo de processamento em função do número de autovalores enez em que enex=5 e ener=5

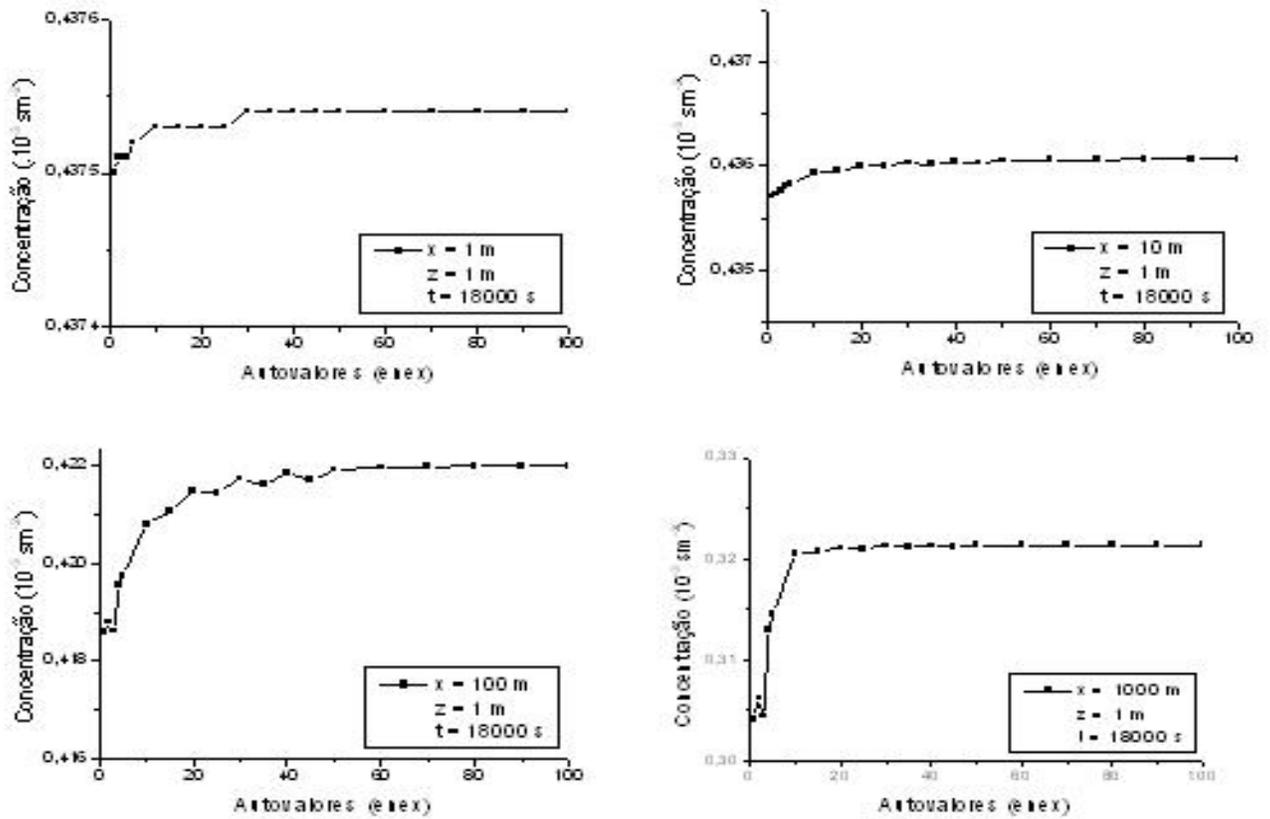


Figura 5.5: Convergência da concentração de poluentes com a variação de en_{ex}

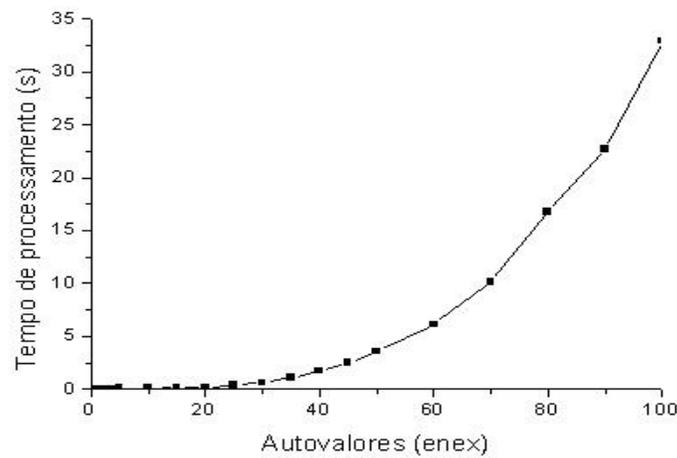


Figura 5.6: Tempo de processamento em função do número de autovalores en_{ex} em que $en_{ez}=5$ e $en_{er}=5$

Nas tabelas 5.4 e 5.5 encontram-se, respectivamente, as concentrações para os nove experimentos de Copenhagen. Co representa as concentrações observadas experimentalmente. Os resultados obtidos utilizando GITT Dupla são comparados com resultados experimentais e com dados obtidos por Moreira [23] e Degrazia [15] respectivamente. A fórmula da inversa da GITT foi truncada para os seguintes números de autovalores $ener = 350$, $enex = 50$ e $enez = 40$.

Tabela 5.4: Concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.1) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.

Exp.	z_i (m)	Distância (m)	Co ($10^{-4}sm^{-2}$)	$Cp - GITTDupla$ ($10^{-4}sm^{-2}$)	$Cp - Moreira(1999)$ ($10^{-4}sm^{-2}$)
1	1980	1900	6.48	6.75	7.16
		3700	2.31	4.05	3.95
2	1920	2100	5.38	4.05	4.05
		4200	2.95	2.72	2.87
3	1120	1900	8.20	7.71	7.86
		3700	6.22	5.08	5.12
		5400	4.30	3.94	3.78
4	390	4000	11.66	8.93	9.04
5	820	2100	6.72	7.47	7.18
		4200	5.84	6.05	6.08
		6100	4.97	4.95	5.04
6	1300	2000	3.96	3.03	2.97
		4200	2.22	2.22	2.30
		5900	1.83	1.79	1.86
7	1850	2000	6.70	4.22	4.42
		4100	3.25	2.57	2.71
		5300	2.23	2.11	2.14
8	810	1900	4.16	4.64	4.70
		3600	2.02	3.23	3.23
		5300	1.52	2.62	2.50
9	2090	2100	4.58	3.90	3.91
		4200	3.11	2.59	2.75
		6000	2.59	1.99	1.00

Tabela 5.5: Concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.2) em diferentes distâncias da fonte. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.

Exp.	z_i (m)	Distância (m)	Co ($10^{-4}sm^{-2}$)	$Cp - GITT Dupla$ ($10^{-4}sm^{-2}$)	$Cp - Degrazia(2001)$ ($10^{-4}sm^{-2}$)
1	1980	1900	6.48	6.65	5.17
		3700	2.31	4.32	3.12
2	1920	2100	5.38	2.84	3.16
		4200	2.95	1.80	1.84
3	1120	1900	8.20	6.19	6.53
		3700	6.22	4.15	3.99
		5400	4.30	3.34	3.31
4	390	4000	11.66	8.22	7.96
5	820	2100	6.72	6.20	7.12
		4200	5.84	4.40	4.58
		6100	4.97	3.64	3.74
6	1300	2000	3.96	2.29	2.58
		4200	2.22	1.50	1.53
		5900	1.83	1.21	1.24
7	1850	2000	6.70	3.35	3.39
		4100	3.25	1.94	1.89
		5300	2.23	1.62	1.59
8	810	1900	4.16	3.91	4.11
		3600	2.02	2.78	2.70
		5300	1.52	2.36	2.37
9	2090	2100	4.58	2.70	2.96
		4200	3.11	1.69	1.73
		6000	2.59	1.32	1.34

A tabela 5.6 apresenta os resultados dos índices estatísticos obtidos pelo uso da GITT Dupla e comparados com os obtidos por Moreira[23] e Degrazia[15]. Observa-se nos resultados obtidos pela GITT Dupla, um erro quadrático médio (Nmse) baixo, a fração de inclinação(Fb) próxima de zero e um fator de dois (Fa2) de 1 indicando bons resultados.

Tabela 5.6: Índices estatísticos para os dados de Copenhagen

<i>Modelo</i>	<i>Nmse</i>	<i>Cor</i>	<i>Fa2</i>	<i>Fb</i>	<i>Fs</i>
<i>GITTDupla(eq.4.1)</i>	0.04	0.91	1	0.06	0.19
<i>Moreira[23]</i>	0.06	0.92	1	0.06	0.19
<i>GITTDupla(eq.4.2)</i>	0.14	0.86	1	0.27	0.24
<i>Degrazia[15]</i>	0.16	0.89	1	0.28	0.27

Os índices obtidos com o primeiro coeficiente de difusão 4.1 se apresentam melhores, pois Nmse, Fb e Fs estão mais próximos de zero, Fa2 é igual a 1 e Cor está mais próximo de 1.

Observa-se pelo gráfico de espalhamento 5.7 a boa concordância dos dados obtidos pela solução via GITT dupla e Transformada de Laplace com os dados experimentais.

O gráfico de espalhamento 5.8, apesar de não apresentar resultados tão próximos dos obtidos experimentalmente, evidencia a boa concordância dos dados obtidos neste trabalho com os dados obtidos por Degrazia et al [15]. Tratam-se de duas abordagens diferentes mas que resolvem equações similares e que usam o mesmo coeficiente de difusão turbulento. O fato destes resultados estarem próximos entre si e levemente diferentes dos resultados experimentais sugere que a diferença observada seja devido à parametrização utilizada e não aos métodos de solução utilizados.

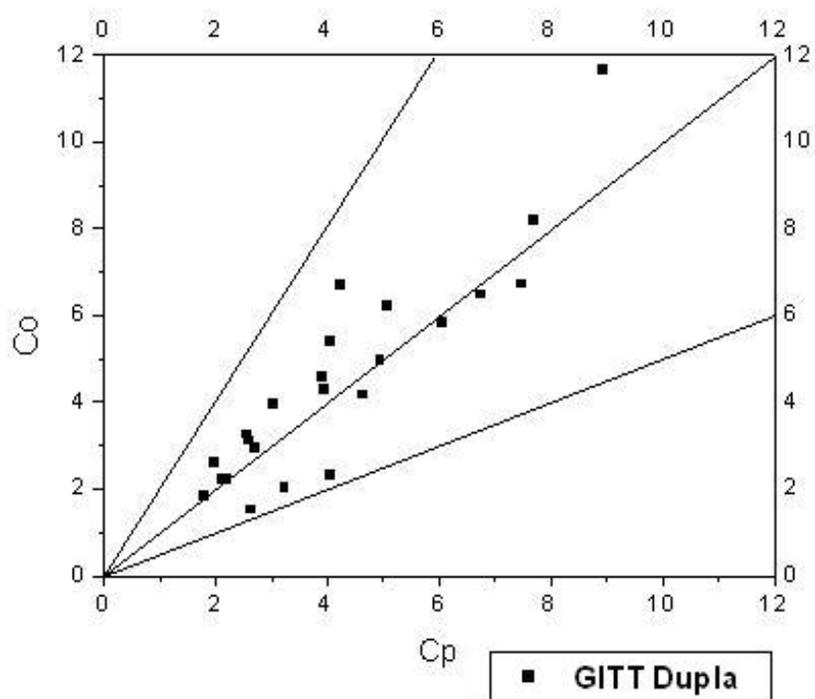


Figura 5.7: Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p) utilizando a equação 4.1

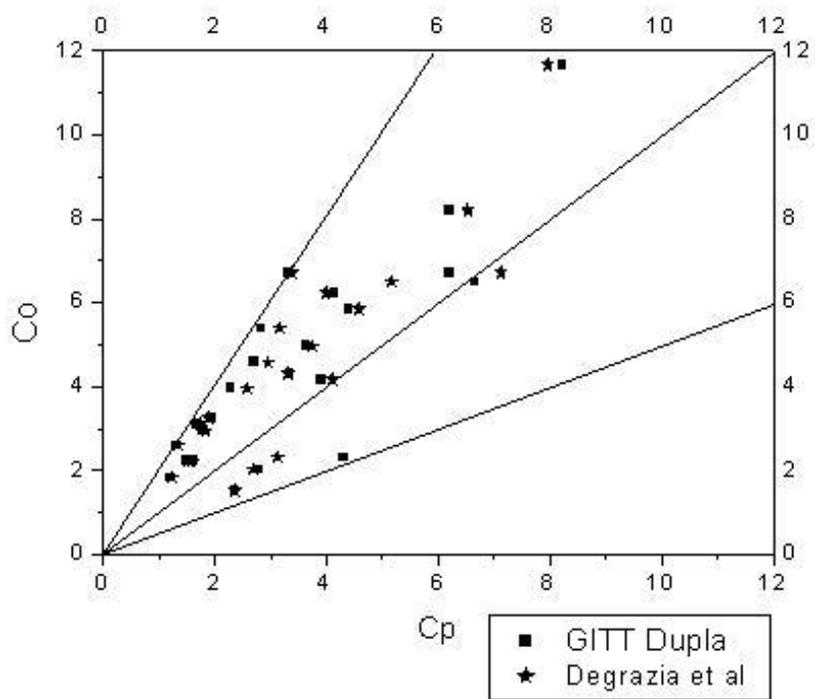


Figura 5.8: Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen dos dados observacionais de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p) utilizando a equação 4.2 e com os dados obtidos por Degrazia et al [15]

As tabelas 5.7 e 5.8 apresentam, respectivamente, os resultados das concentrações para os experimentos de Copenhagen quando são considerados intervalos de tempo e as médias destes resultados em todo intervalo. A fórmula da inversa da GITT foi truncada para os seguintes números de autovalores $ener = 350$, $enex = 20$ e $enez = 15$.

Tabela 5.7: Concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.1) em diferentes distâncias da fonte e intervalos de tempo. As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.

Exp.	Distância (m)	Intervalo I		Intervalo II		Intervalo III	
		Co ($10^{-4}sm^{-2}$)	Cp ($10^{-4}sm^{-2}$)	Co ($10^{-4}sm^{-2}$)	Cp ($10^{-4}sm^{-2}$)	Co ($10^{-4}sm^{-2}$)	Cp ($10^{-4}sm^{-2}$)
1	1900	5.60	5.91	8.27	6.66	5.51	6.45
	3700	1.74	3.68	2.25	4.55	3.02	3.97
2	2100	4.36	3.36	5.14	3.77	6.73	3.96
	4200	2.72	2.45	1.96	2.49	4.20	2.58
3	1900	6.00	7.38	9.26	8.37	9.32	7.31
	3700	4.70	4.78	6.53	5.34	7.62	4.72
	5400	3.93	3.82	5.24	4.90	4.01	3.82
4	4000	6.26	8.85	9.97	8.82	17.37	8.96
5	2100	5.78	7.97	8.62	7.91	5.89	7.84
	4200	5.09	6.11	6.55	6.10	5.91	6.04
	6100	5.07	4.97	5.37	4.94	4.65	4.92
7	2000	2.72	4.08	12.74	3.90	5.25	3.87
	4100	2.31	2.50	1.34	2.39	2.42	2.38
	5300	2.45	2.07	0.64	1.97	1.49	1.96
8	1900	4.00	4.75	4.84	4.37	3.65	4.82
	3600	2.31	3.22	1.34	2.98	2.42	3.27
	5300	2.45	2.74	0.64	1.75	1.49	2.76
9	2100	3.98	3.60	3.93	3.80	5.90	3.67
	4200	3.46	2.37	2.44	2.46	3.40	2.40
	6000	3.96	1.83	2.04	1.89	1.76	1.86

Pode-se observar pelo gráfico 5.9 que, de uma forma geral, também quando o problema é resolvido em regime transiente há uma boa concordância dos dados obtidos neste trabalho com os dados experimentais.

Tabela 5.8: Média das concentrações integradas lateralmente (Cp) para o Experimento de Copenhagen utilizando a equação (4.1) em diferentes distâncias da fonte e intervalos de tempo (Int.). As concentrações são normalizadas pela taxa de emissão (\bar{c}/Q) e Co representa as concentrações observadas.

Exp.	Distância (m)	Média Temporal Co ($10^{-4} sm^{-2}$)	Média Temporal Cp ($10^{-4} sm^{-2}$)
1	1900	6.46	6.45
	3700	2.34	4.06
2	2100	5.41	3.70
	4200	2.96	2.51
3	1900	8.19	7.69
	3700	6.28	4.95
	5400	4.39	4.18
4	4000	11.20	8.88
5	2100	6.76	7.90
	4200	5.85	6.08
	6100	5.03	4.94
7	2000	6.90	3.95
	4100	2.02	2.42
	5300	1.53	2.00
8	1900	4.16	4.64
	3600	2.02	3.15
	5300	1.53	2.41
9	2100	4.60	3.69
	4200	3.10	2.41
	6000	2.59	1.86

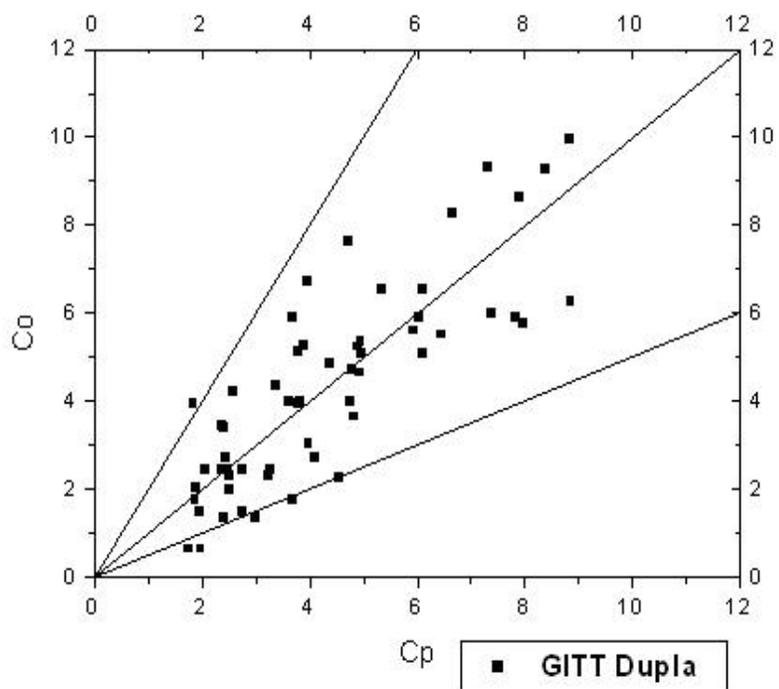


Figura 5.9: Gráfico de espalhamento para o experimento de Copenhagen, com intervalos de tempo, dos dados observacionais de concentração (C_o) em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p) utilizando a equação 4.1

Para evidenciar a versatilidade do algoritmo proposto, o código foi rodado para uma situação fictícia. Se impôs, de forma sintética, uma função para representar artificialmente a componente vertical do vento

$$w(x, z) = wa \cos (wb x), \quad (5.1)$$

onde $wb = \frac{2\pi}{3000}$ e wa é a velocidade que, nestas simulações, foi avaliada para 0,1,2,3 e 4.

Os gráficos 5.10, 5.11, 5.12, 5.13 e 5.14 apresentam os resultados obtidos para concentração de poluentes quando é considerado um vento vertical fictício comentado acima. Além disso, os gráficos foram gerados com domínio reduzido ($x_{max} = 1150$ e $z_{max} = 1150$) objetivando melhor visualização. Utilizou-se o $K_z(x, z)$ exposto na equação 4.1.

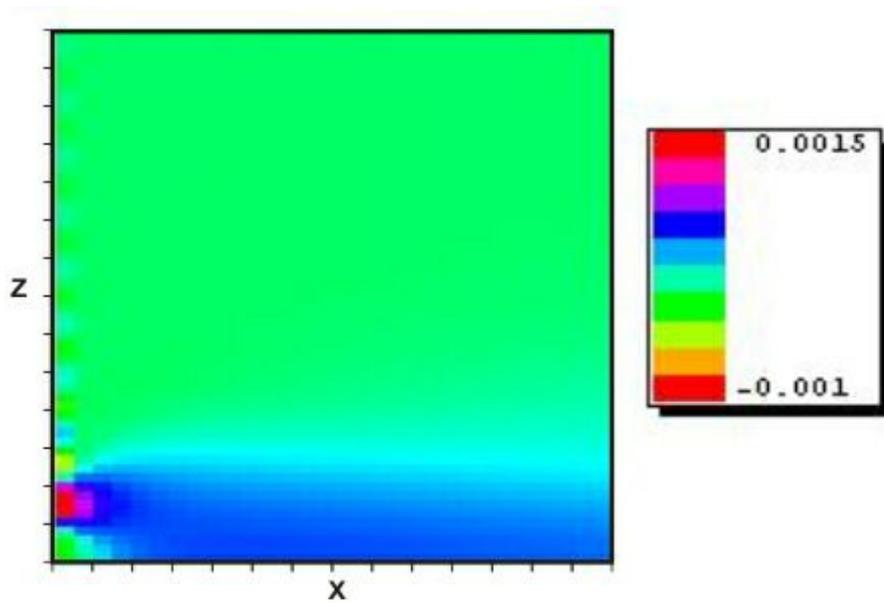


Figura 5.10: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) utilizando a equação 5.1 e $wa = 0$

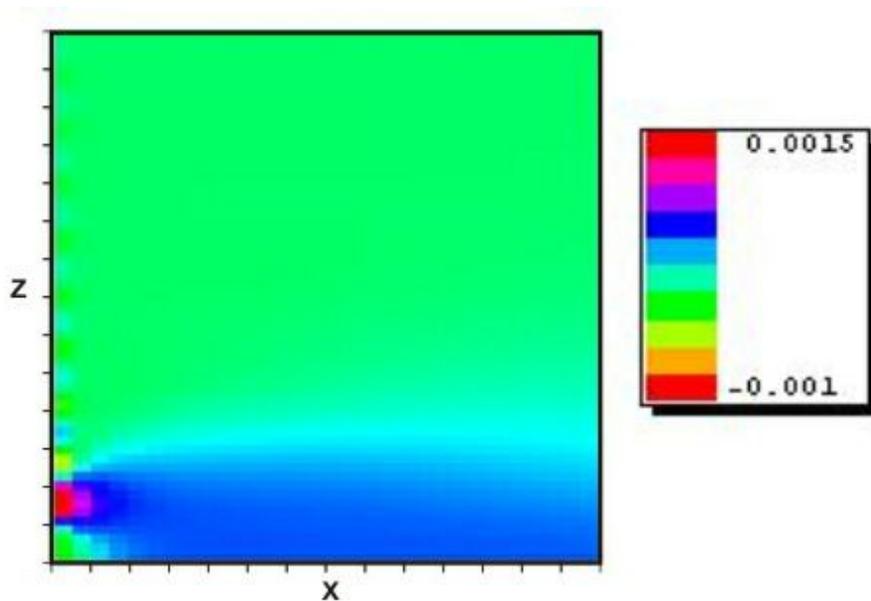


Figura 5.11: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(C_p) utilizando a equação 5.1 e $wa = 1$

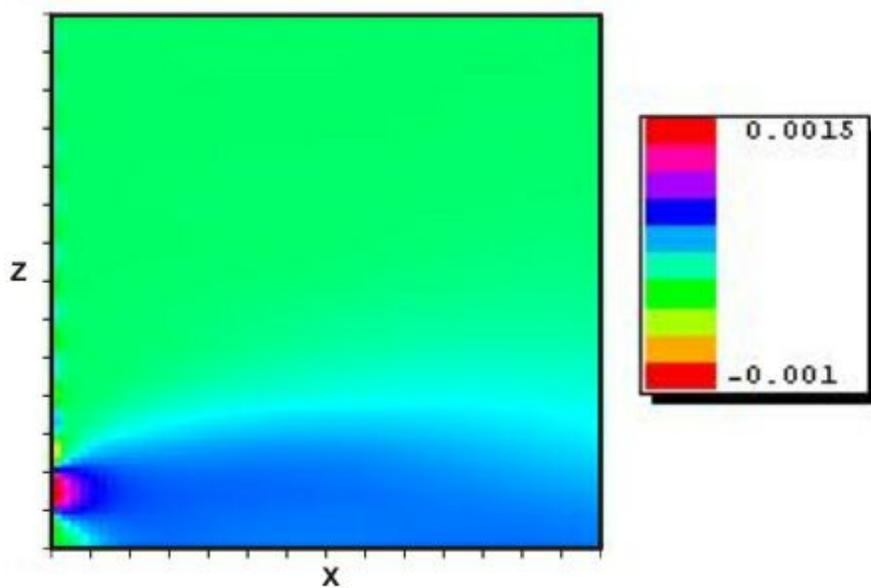


Figura 5.12: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(C_p) utilizando a equação 5.1 e $wa = 2$

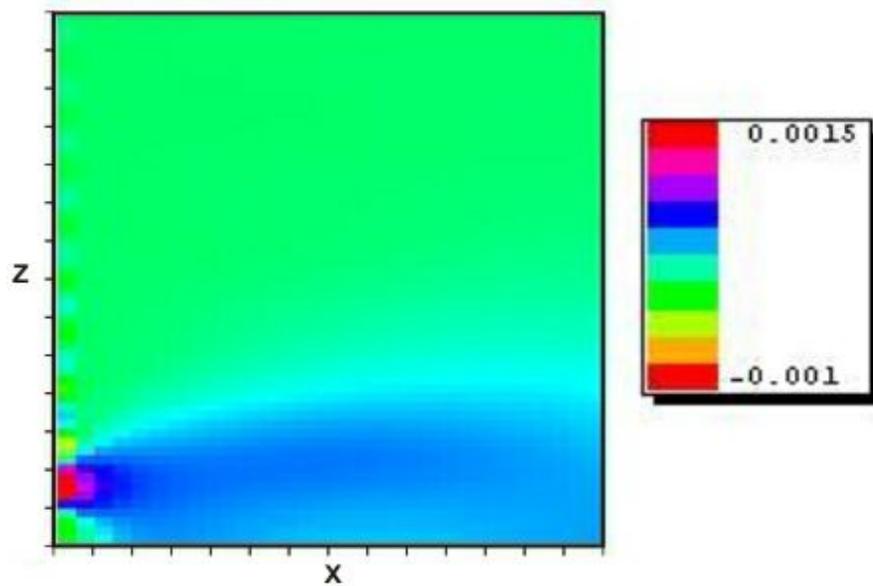


Figura 5.13: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(C_p) utilizando a equação 5.1 e $wa = 3$

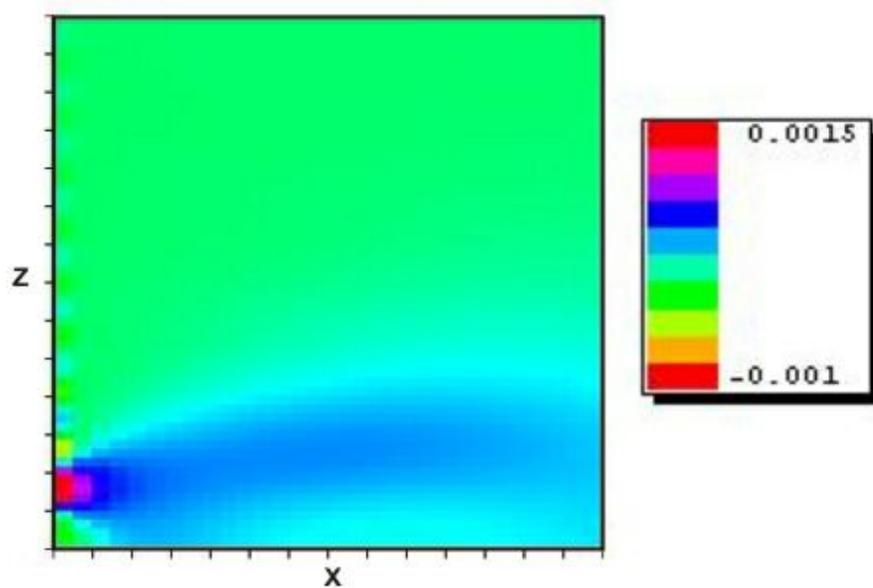


Figura 5.14: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(C_p) utilizando a equação 5.1 e $wa = 4$

Pode-se observar pequenas oscilações no contorno, que são típicas de expansões trigonométricas. Além disso, vê-se um comportamento condizente com o esperado, já que os poluentes se dispersam mais com o aumento da componente vertical do vento e se afastam da fronteira $x = 0$ na condição de vento relativamente alto.

Esta simulação de $w(x, z)$ foi utilizada com objetivo ilustrar a situação de vento vertical e evidenciar mais uma utilidade do código computacional desenvolvido.

Os gráficos 5.15, 5.16 e 5.17 correspondem ao comportamento da concentração de poluentes com a variação temporal. Considerou-se três casos distintos para o tempo: tempo $0s$, onde ainda não há emissão de poluentes; tempo $80s$, onde já pode ser verificada a dispersão; e tempo $18000s$, que corresponde à condição em regime permanente.

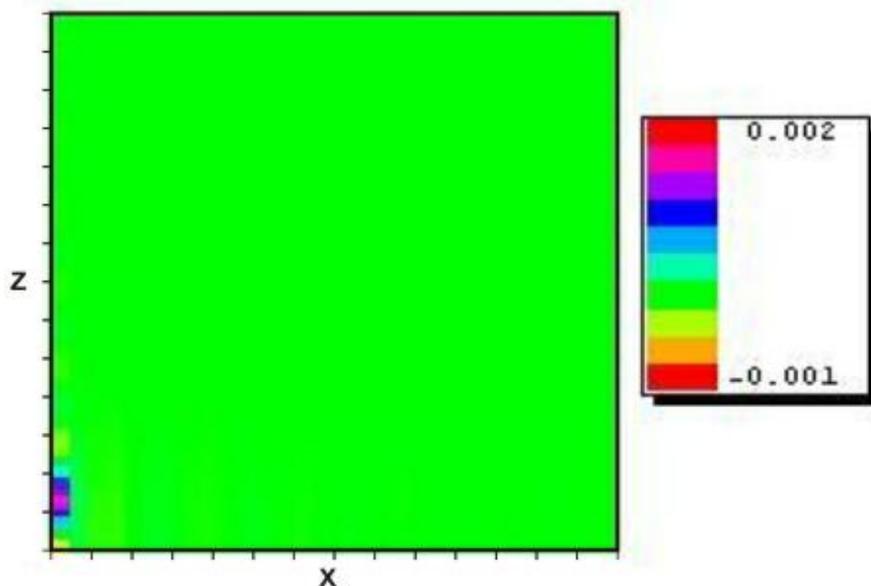


Figura 5.15: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(Cp) para $t = 0s$

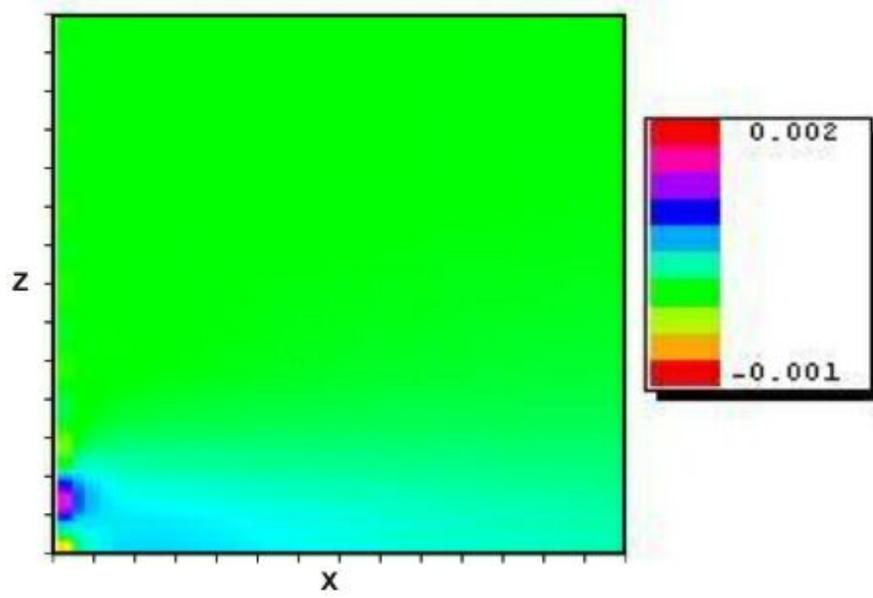


Figura 5.16: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(C_p) para $t = 80s$

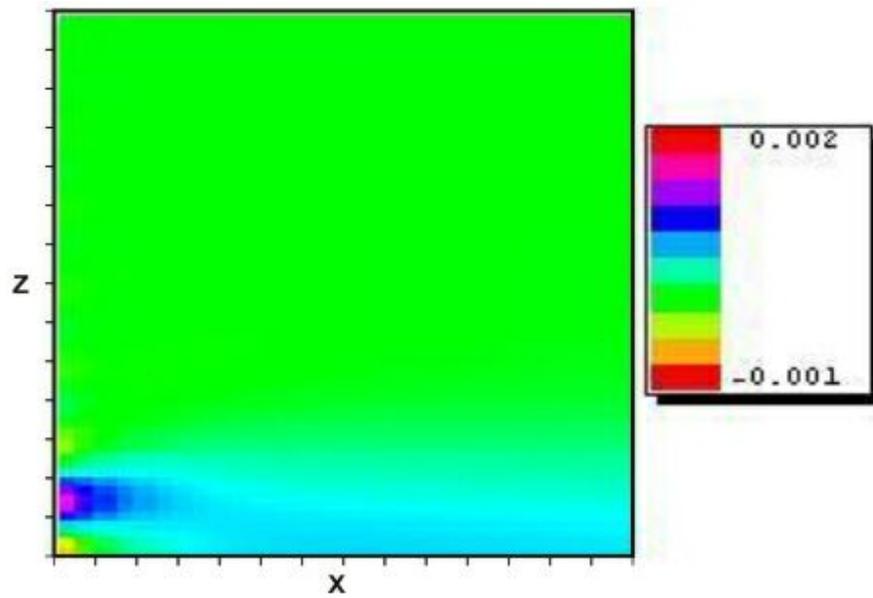


Figura 5.17: Gráfico de isolinhas dos dados de concentração do modelo(C_p) para $t = 18000s$

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentada a aplicação da técnica GITT dupla para a solução de um problema bidimensional transiente de poluição na CLC que utiliza o chamado Modelo Kzz. A equação difusivo-advecção utilizada para representar o problema é resolvida na sua forma completa sem que nenhum termo tenha sido desprezado ou simplificado. Os coeficientes de difusão e advecção utilizados, bem como as componentes longitudinal e vertical da velocidade do ar são dependentes das variáveis espaciais.

Além disso, como há condição de contorno não homogênea, utiliza-se um filtro matemático, que permite o uso da técnica GITT. O filtro escolhido garantiu que o problema fosse resolvido com boa precisão dos resultados mesmo para uma ordem relativamente baixa de autovalores. Isto é de especial relevância na aplicação multidimensional de métodos espectrais.

A solução final é encontrada na forma de somatórios infinitos, que para obtenção dos resultados são truncados. A escolha da ordem de truncamento permite controlar o erro da solução. Este detalhe é de muita utilidade para avaliação do modelo matemático utilizado. Diferenças da solução obtida, quando comparada com resultados de referência, tanto podem ter origem na metodologia de solução, quanto no modelo utilizado. Uma vez que o erro da técnica de solução é passível de estimativa, a acuidade do modelo usado é verificada de imediato.

Uma análise geral dos resultados mostra que o modelo de dispersão de poluentes com as parametrizações utilizadas produz uma boa concordância com as concentrações medidas para o experimento de Copenhagen. Quando a concordância é maior com outra solução obtida, é de se concluir que o modelamento utilizado pode não ser capaz de reproduzir algumas situações físicas.

No que se refere ao conhecimento da autora, este é o único trabalho existente na literatura que utiliza GITT dupla com solução do problema transfor-

mado construída a partir de Transformada de Laplace e diagonalização de matrizes aplicado a esta classe de problemas. Pode-se citar que esta metodologia tem como principais vantagens inexistência de inversões das transformadas integrais numéricas e excelente generalização do algoritmo no que se refere às características dos coeficientes de advecção e difusão da equação resolvida. O código construído permite que estes coeficientes sejam variáveis, constantes ou mesmo nulos. Outras abordagens analíticas como Transformada de Laplace dupla e GITT simples não podem ser tão genéricas e ainda correm o risco de apresentar problemas de mal condicionamento se algum destes coeficientes estiver próximo de zero. No caso de problemas de poluição atmosférica, esta situação ocorre, por exemplo, na simulação em condições de vento fraco. Além do que, estas abordagens têm sua complexidade aumentada se a equação a ser resolvida tiver coeficientes variáveis.

Em trabalhos futuros, pretende-se testar novas parametrizações turbulentas que dependam das coordenadas longitudinal e transversal simultaneamente.

Além disso, objetiva-se utilizar a mesma técnica para determinação dos perfis de velocidade do ar atmosférico. Para isso seriam resolvidas as equações de Navier-Stokes bidimensionais. Num primeiro momento para situações de vento fraco e num segundo de vento forte onde seriam contemplados a Hipótese de Reynolds e modelamentos de turbulência. Em uma abordagem deste tipo, a não-linearidade das equações de Navier-Stokes é carregada para o problema transformado, obrigando o uso de algoritmos de linearização como em [43]. Esta seria, inclusive, uma boa oportunidade para utilizar diferentes formas de linearização em confrontos com àquela usada em [43].

Pode-se sugerir, também, a solução de problemas de poluição tridimensionais transientes pela técnica GITT tripla e Transformada de Laplace, ou ainda, GITT tripla e solução recursiva do problema transformado por expansão em polinômios; uma vez que a Transformada de Laplace associada a diagonalização tem limitações para solução de sistemas EDO muito grandes.

Por último, pretende-se investigar a solução de problemas que contemplem o relevo, tornando mais realista a abordagem e permitindo a simulação de casos não idealizados. Para isso, pretender-se-ia usar uma simples mudança de variáveis que contemplasse o relevo, uma vez que uma transformação conforme acarreta em severas complicações matemáticas do problema transformado. Outra alternativa seria a discretização e solução por diferenças finitas da variável axial.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ALMEIDA, G. L. *Análise da dispersão de poluentes na atmosfera via Técnica da Transformada Integral Generalizada -GITT*. Qualificação (doutorado em engenharia mecânica), Programa de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2003.
- [2] ALMEIDA, G. L., PIMENTEL, L. C. G., AND COTTA, R. M. Analysis of pollutants atmospheric dispersion from a point source using integral transforms. *Proceedings of the 3RD BANFF, Canadá* (2003).
- [3] ARYA, S. P. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. *J. Appl. Meteor.* 34 (1995), 1112–1122.
- [4] BERKOWICZ, R. R., OLESEN, H. R., AND TORP, U. The danish gaussian air pollution model (oml): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. *Air Pollution modeling and its application Edited by C. De Wispelare, F.A. Schiermeirier and N.V. Gillani*, Plenum Publishing Corporation (1986).
- [5] BULIGON, L. *Solução da equação de difusão unidimensional transiente para o estudo da dispersão de poluentes na camada limite planetária*. Dissertação (mestrado em matemática aplicada), Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2004.
- [6] BUSKE, D. *Simulação de dispersão de poluentes atmosféricos em condições de ventos fracos pelo método GILTT*. Qualificação (doutorado em engenharia mecânica), Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2005.
- [7] BUSKE, D., VILHENA, M. T., AND MOREIRA, D. M. Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the tur-

- bulent diffusion by the gillt method. *Proceedings of the XXVI Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering - CILAMCE* (2005).
- [8] CASSOL, M., WORTMANN, S., AND VILHENA, M. T. Simulação analítica transiente da dispersão de poluente na atmosfera pela técnica gillt dupla. *In: Congresso Brasileiro de Matemática Aplicada e Computacional .[Anais]* (2005).
- [9] COSTA, C. P. *Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada limite Planetária*. Dissertação (mestrado em matemática aplicada), Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2004.
- [10] COTTA, R. M. *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*. CRC Press, 1993.
- [11] COTTA, R. M., AND MIKHAYLOV, M. *Heat Conduction. Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation*. John Wiley Sons, England, 1997.
- [12] DEGRAZIA, G. A., ANFOSSI, D., CARVALHO, J. C., MANGIA, C., TIRABASSI, T., AND VELHO, H. F. C. Turbulence parameterisation for pbl dispersion models in all stability conditions. *Atmospheric Environment* 34 (2000), 3575–3583.
- [13] 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), 227–231.
- [14] DEGRAZIA, G. A., AND MORAES, O. L. L. Uma revisão da teoria estatística da difusão turbulenta. *Ciência e Natura* 14 (1992), 65–70.
- [15] DEGRAZIA, G. A., MOREIRA, D. M., AND VILHENA, M. T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous

- geneous turbulence in a convective boundary layer. *American Meteorological Society* (2001), 1233–1240.
- [16] 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.
- [17] GOULART, A., DEGRAZIA, G., RIZZA, U., AND ANFOSSI, D. A theoretical model for the study of convective turbulence decay and comparison with large-eddy simulation data. *Boundary-Layer Meteorology* 107 (2003), 143–155.
- [18] GRYNING, S. E., HOLTSLAG, A., IRWING, J., AND SILVERSTEN, B. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmos. Environment* 21 (1987), 79–89.
- [19] 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.
- [20] GRYNING, S. E., AND P. VAN ULDEN, A. L. E. L. Dispersion from a continuous ground-level source investigated by a k-model. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 109 (1983), 355.
- [21] HANNA, S. R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment* 23 (1989), 1385–1395.
- [22] KREIDER, D., KULLER, R. C., PERKINS, F. W., AND OSTBERG, D. R. *Introdução à Análise Linear: Equações Diferenciais Lineares*, vol. 3. Ao livro técnico S/A, Rio de Janeiro, 1972.
- [23] MOREIRA, D. *Modelo Euleriano semi-analítico de dispersão turbulenta de contaminantes*. Tese (doutorado em engenharia mecânica), Programa

- de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1999.
- [24] MOREIRA, D. M., VILHENA, M. T., CARVALHO, J. C., AND DEGRAZIA, G. A analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion. *Environment Modelling and Software* 20 (2005), 1347–1351.
- [25] MOREIRA, D. M., VILHENA, M. T., TIRABASSI, T., BUSKE, D., AND COTTA, R. M. Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new gillt method. *Atmospheric Environment* 39 (2005), 6289–6294.
- [26] 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.
- [27] MOURA, A. B. D. *Modelos multidimensionais analíticos de dispersão de contaminantes na atmosfera : coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte*. Tese (doutorado em engenharia mecânica), Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1999.
- [28] MOURA, A. B. D. Solução analítica de um modelo tridimensional de dispersão de contaminantes na camada limite planetária convectiva: coeficientes de difusão dependentes da distância da fonte e da altura. *In: Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas .[Anais]* (2000).
- [29] OETTL, D., ALMBAUER, R. A., AND STURM, P. J. A new method to estimate diffusion in stable, low-wind conditions. *American Meteorological Society* (2000).
- [30] OZISIK, M. N. *Heat Conduction*. John Wiley Sons, 1980.

- [31] PANOFSKY, H. A., AND DUTTON, J. A. *Atmospheric Turbulence*, 397 ed. Wiley-Interscience, J. Wiley and Sons, 1984.
- [32] PASQUILL, F. *Atmospheric Diffusion*, 2nd ed. John Wiley and Sons, New York, 1974.
- [33] PASQUILL, F., AND SMITH, F. B. *Atmospheric diffusion*. Ellis Howood Ltd., Chichester, 1983.
- [34] PAULSEN, C. A. The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer. *J. Appl. Met.* 9 (1970), 857–861.
- [35] SPIEGEL, M. R. *Transformadas de Laplace*, pp. 267 ed. McGraw-Hill do Brasil Ltda, São Paulo, 1971.
- [36] STULL, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (Olanda), 1988.
- [37] 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.
- [38] TIRABASSI, T., AND RIZZA, U. A non-gaussian puff model. *Il Nuovo Cimento 20* (1997).
- [39] 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.
- [40] VAN DOP, H., AND VERVER, G. Countergradient transport revisited. *J. Atmospheric Science 58* (2001), 2240–2247.
- [41] VILHENA, M. T., RIZZA, U., DEGRAZIA, G. A., MANGIA, C., MOREIRA, D. M., AND TIRABASSI, T. An analytical air pollution model: development and evaluation. *Contr. Atmos. Phys 71*, 3 (1998), 315–320.

- [42] WEIL, J. C., SULLIVAN, P. P., AND MOENG, C. The use of large-eddy simulations in lagrangian particle dispersion models. *American Meteorological Society* (2004).
- [43] WORTMANN, S. *Formulação Semi-analítica para Equação Transformada Resultante da Aplicação da GITT em Problemas Difusivos Advectivos*. Tese (doutorado em engenharia mecânica), Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2003.
- [44] WORTMANN, S., VILHENA, M. T., MOREIRA, D. M., AND BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the pbl. *Atmospheric Environment* 39 (2005), 2171–2178.
- [45] WORTMANN, S., VILHENA, M. T., AND MOURA, A. Analytical solution of the one dimensional transient pollutat problem with variable eddy diffusivity coefficient. *In: Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas. [Anais]* (2000).