UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática

Dissertação

Influência da Velocidade de Deposição no Solo na Modelagem Multidimensional da Dispersão de Poluentes Atmosféricos

Karine Rui

Pelotas, 2016

Karine Rui

Influência da Velocidade de Deposição no Solo na Modelagem Multidimensional da Dispersão de Poluentes Atmosféricos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática

Orientadora: Prof.ª Dr.ª Camila Pinto da Costa

Pelotas, 2016

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

R934i Rui, Karine

Influência da velocidade de deposição no solo na modelagem multidimensional da dispersão de poluentes atmosféricos / Karine Rui ; Camila Pinto da Costa, orientadora. — Pelotas, 2016.

96 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2016.

1. Dispersão de poluentes. 2. Deposição seca. 3. Equação de advecção-difusã. 4. Admm. 5. Giadmt. I. Costa, Camila Pinto da, orient. II. Título.

CDD : 530.15

Elaborada por Maria Beatriz Vaghetti Vieira CRB: 10/1032

Karine Rui

Influência da Velocidade de Deposição no Solo na Modelagem Multidimensional da Dispersão de Poluentes Atmosféricos

Dissertação aprovada, como requisito parcial, para obtenção do grau de Mestre em Modelagem Matemática, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

Data da Defesa: 26 de fevereiro de 2016

Banca examinadora:

Prof.ª Dr.ª Camila Pinto da Costa (Orientadora)
Doutora em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Prof. Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho
Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Prof.ª Dr.ª Rejane Pergher
Doutora em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Prof. Dr. Leslie Darien Pérez Fernández
Doutor em Matemática pelo Instituto de Cibernética, Matemática e Física, Cuba

Dedico este trabalho aos meus pais e ao meu amor Andrei.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família, especialmente aos meus pais, Ireneo Rui e Terezinha Grando Rui, e aos meus irmãos: Fernando, Marcos, Rodrigo e Camila por todo o incentivo, apoio e carinho em toda esta jornada e no decorrer de toda a minha vida. Agradeço-os pela compreensão à minha ausência.

Agradeço, ao meu namorado Andrei Costa por seu companheirismo, compreensão, dedicação, paciência, ajuda e principalmente por seu carinho e cumplicidade.

Agradeço a minha orientadora Profª. Drª. Camila Pinto da Costa, por sua orientação prestada, conhecimento compartilhado, paciência, incentivo e dedicação durante o desenvolvimento deste trabalho e durante toda a minha formação acadêmica. Agradeço-a principalmente por sua amizade.

Agradeço aos amigos e colegas por seus incentivos e apoios, em especial a Daniela Dalla Chiesa por seu companheirismo, amizade e parceria.

Agradeço aos professores da UFPel, em especial aos do PPGMMat, que colaboraram com a minha formação.

Agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS) por seu suporte financeiro.

Agradeço a Deus por estar sempre iluminando os meus passos.

Agradeço a todos que acreditaram e torceram por mim durante esta jornada de estudo e a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

RUI, Karine. **Influência da Velocidade de Deposição no Solo na Modelagem Multidimensional da Dispersão de Poluentes Atmosféricos**. 2016. 96 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2016.

Os poluentes atmosféricos tendem a se depositar sobre a superfície da terra. Por isso é conveniente modificar os modelos de difusão atmosférica para que estes considerem a perda de poluentes por deposição seca. O objetivo do presente trabalho é estudar e analisar a dispersão de poluentes, considerando a velocidade de deposição seca no solo, e o decaimento da concentração nas diferentes classes de estabilidade na Camada Limite Planetária. Nesta dissertação, apresenta-se a resolução da equação de advecção-difusão bidimensional estacionária, que descreve a deposição seca como uma condição de contorno de fluxo não nulo no solo, por meio do ADMM, e a resolução através do GIADMT para a equação tridimensional. Na avaliação do desempenho do modelo bidimensional são utilizados os dados experimentais de Hanford e para a velocidade de deposição uma fórmula sugerida por Arya e estimada por Hanna em 1982. O modelo bidimensional é validado utilizando diferentes parametrizações do coeficiente de difusão vertical e do perfil do vento, considerando condições atmosféricas estáveis. Também são realizadas simulações multidimensionais da dispersão e transporte de poluentes em diferentes classes de estabilidade atmosférica, e o efeito da velocidade de deposição seca no solo é analisada. É possível mostrar que a velocidade de deposição seca tem uma forte influência na dispersão da concentração de poluentes.

Palavras-chave: Dispersão de poluentes, deposição seca, equação de advecção-difusão, ADMM, GIADMT.

ABSTRACT

RUI, Karine. **Influence of Deposition Velocity to the Ground in Multidimensional Modeling of Dispersion of the Air Pollutants**. 2016. 96 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2016.

The air pollutants tend to deposit on the surface of the earth. Therefore it is appropriate to modify the atmospheric diffusion models so that they consider the loss of pollutants by dry deposition. The objective of this work is to study and analyze the dispersion of pollutants, considering the dry deposition velocity to the ground and the decay of concentration in the different classes of stability in the planetary boundary layer. This dissertation presents the resolution of the two-dimensional stationary advection-diffusion equation, which describes dry deposition as a boundary condition of nonzero flow at the ground level, through ADMM, and the resolution by GIADMT of the three-dimensional equation. In evaluating the performance of the two-dimensional model the data of the Hanford experiment are used as well as a deposition rate formula suggested by Arya, and estimated by Hanna in 1982. The two-dimensional model is validated using different parameterizations of the vertical diffusion coefficient and the wind profile, considering stable atmospheric conditions. Also, multi-dimensional simulations of the dispersion and transport of pollutants in different classes of atmospheric stability are performed, and the effect of dry deposition velocity to the ground is analyzed. Furthermore, it is possible to show that dry deposition rate has a strong influence on the dispersion of the concentration of pollutants.

Keywords: Pollutant dispersion, dry deposition, advection-diffusion equation, ADMM, GIADMT.

LISTA DE FIGURAS

1 Evolução da camada limite planetária. Adaptada de STULL (1988). 29

2 Desenho esquemático do modelo ADMM. Adaptado de COSTA, 2007. 46

3 Estabilidade numérica da solução da equação de advecção-difusão utilizando o Algoritmo de Fixed-Talbot. 53

4 Gráfico de espalhamento entre as concentrações observadas (C_o) no experimento e preditas (C_p) pelo modelo utilizando o coeficiente de difusão vertical de Hanna (1982) e o vento potência. 70

5 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fortemente instável com fonte perto do solo, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 72

6 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fracamente instável com fonte perto do solo, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 72

7 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera estável com fonte perto do solo, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 73

8 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fortemente instável com altura de fonte de $100m$, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 74

9 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fracamente instável com altura de fonte de $100m$, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 74

10 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera estável com altura de fonte de $100m$, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 75

11 Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fortemente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$. 76

12 Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fracamente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$. 77
13 Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera estável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$. 77
14 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução tridimensional em uma atmosfera fortemente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 79
15 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução tridimensional em uma atmosfera fracamente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 79
16 Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução tridimensional em uma atmosfera estável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$. 80
17 Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fortemente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$. 81
18 Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fracamente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$. 81
19 Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera estável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$. 82
20 Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo para diferentes valores da deposição seca em condições fortemente instáveis (Classe A). 83
21 Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo para diferentes valores da deposição seca em condições fracamente instáveis (Classe C). 84
22 Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo para diferentes valores da deposição seca em condições estáveis (Classe E). 85

LISTA DE TABELAS

1 Classes de Estabilidade Atmosférica segundo Pasquill 32
2 Classificação da Estabilidade Atmosférica de Pasquill 33
3 Relação entre o comprimento de Monin-Obukhov e as condições de estabilidade 34
4 Relação entre a estabilidade atmosférica e a estratificação da temperatura real T e potencial Θ na atmosfera 35
5 Dados micrometeorológicos e concentrações observadas para os seis experimentos de Hanford 63
6 Dados meteorológicos para três diferentes cenários difusivos 66
7 Avaliação estatística do modelo 69

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADMM	Advection Diffusion Multilayer Method
CFC	Clorofluorcarboneto
CLC	Camada Limite Convectiva ou Camada de Mistura
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária ou Camada Limite Atmosférica
CLR	Camada Limite Residual
CLS	Camada Limite Superficial
CO	Monóxido de Carbono
CO_2	Dióxido de Carbono
C_o	Concentrações observadas experimentalmente
Cor	Coeficiente de correlação [1]
C_p	Concentrações preditas pelo modelo
$Fa2$	Fator de 2 [1]
Fb	Erro fracional [1]
Fs	Desvio fracional padrão [1]
GITT	Generalized Integral Transform Technique
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique
GIADMT	Generalized Integral Advection Diffusion Technique
HCl	Ácido Clorídrico
HNO_3	Ácido Nítrico
I_2	Iodo
MP	Material Particulado
NH_3	Amônia
$NMSE$	Erro quadrático médio normalizado [1]
NO	Monóxido de Nitrogênio

[1] Sigla em inglês

NO_2	Dióxido de Nitrogênio
O_3	Ozônio
SF_6	Hexafluoreto de Enxofre
SO_2	Dióxido de Enxofre
ZE	Zona de entranhamento
ZnS	Sulfeto de Zinco

LISTA DE SÍMBOLOS

Caracteres latinos

A	constante empírica
c	concentração adimensional de um poluente passivo (g/m^2)
$\overline{c}$	concentração média de um poluente passivo (g/m^2)
c'	parte turbulenta da concentração (g/m^2)
$\overline{c}^y$	concentração média integrada lateralmente (g/m^2)
$\overline{\overline{c}}^y(s,z)$, $\widehat{c}_j(s,z)$	concentração transformada pela aplicação da transformada de Laplace
$\overline{\overline{c}}^y_{n_h}$, $\widehat{c}_{j_n h}$	soluções gerais da equação homogênea
$\overline{\overline{c}}^y_{n_p}$, $\widehat{c}_{j_n p}$	soluções particulares da equação diferencial linear não homogênea
$\overline{\overline{c}}_j(x,z)$	concentração transformada pela GITT
D_j	coeficiente de difusão molecular de uma espécie j em ar (m^2/s)
F	fluxo descendente (g/ms)
g	aceleração da gravidade (m/s^2)
$G(z,\xi)$	função de Green
H	função de Heaviside
h	altura da Camada Limite Planetária (m)
H_s	altura da fonte de poluente (m)
κ	constante de von Kármám
K_x	coeficiente de difusão na direção x (m^2/s)
K_y	coeficiente de difusão na direção y (m^2/s)
K_z	coeficiente de difusão na direção z (m^2/s)
L	comprimento de Monin-Obukhov (m)
L_y	ponto no eixo y suficientemente grande onde o fluxo é nulo (m)
N	número de subcamadas
N_a	número de autovalores

N_j	norma de L^2
n^*	região de emissão do poluente
Q	intensidade da fonte de poluentes (g/s)
R_a	resistência aerodinâmica sobre a superfície (s/m)
R_{ac}	resistência aerodinâmica em dossel (s/m)
R_b	resistência da camada limite quase-laminar (s/m)
R_c	resistência de superfície ou de transferência (s/m)
R_{cut}	resistência de cutícula (associada à deposição de um poluente nas partes externas das plantas) (s/m)
R_g	resistência do solo (associada à deposição de um poluente no solo) (s/m)
R_m	resistência de mesófilo (s/m)
R_{ns}	resistência não-estomática (associada à deposição de um poluente em todas as partes da superfície, exceto os estômatos) (s/m)
R_{st}	resistência de estômatos (s/m)
S	termo que contém a fonte de poluentes
$S_{p_n^*}$	solução particular da equação aplicada na região de emissão
$S'_{p_n^*}$	derivada da solução particular da equação aplicada na região de emissão
T	temperatura real ($^\circ C$)
t	variável temporal
u	velocidade do vento na direção x (m/s)
$\overline{u}$	velocidade média do vento na direção x (m/s)
u'	parte turbulenta do vento na direção x (m/s)
u_*	velocidade de fricção (m/s)
$\overline{u'c'}$	fluxo turbulento na direção longitudinal $g/(sm^2)$
v	velocidade do vento na direção y (m/s)
V_d	velocidade de deposição seca (m/s)
V_g	velocidade de sedimentação (m/s)
$\overline{v}$	velocidade média do vento na direção y (m/s)
v'	parte turbulenta do vento na direção y (m/s)
$\overline{v'c'}$	fluxo turbulento na direção lateral $g/(sm^2)$
w	velocidade do vento na direção z (m/s)
$\overline{w}$	velocidade média do vento na direção z (m/s)

w'	parte turbulenta do vento na direção z (m/s)
$\overline{w'c'}$	fluxo turbulento na direção vertical $g/(sm^2)$
$(\overline{w\theta})_0$	fluxo de calor turbulento na superfície
w_*	velocidade convectiva (m/s)
x	distância longitudinal da fonte (m)
y	distância lateral da fonte (m)
y_0	posição da fonte no eixo y (m)
z	altura acima da superfície (m)
z_i	altura da Camada Limite Convectiva (m)
z_r	altura de referência (m)
z_0	comprimento da rugosidade (m)

Caracteres gregos

δ	função Delta de Dirac
Δz	discretização da altura da subcamada (m)
λ_j	autovalor do problema de Sturm-Liouville
ν	viscosidade cinemática do ar (m^2/s)
Θ	temperatura potencial média $(^\circ C)$
ψ_j	autofunção do problema de Sturm-Liouville
ψ_m	função de similaridade
Ψ_m	função estabilidade
ω_{st}	fração de estômatos fechados em condições úmidas
υ_c	coeficiente de difusão molecular

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 17

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 21

3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA 28

4 CLASSES DE ESTABILIDADE 32

5 TEORIA DA DEPOSIÇÃO 36

6 MODELO MATEMÁTICO 42
6.1 Modelo Bidimensional - Solução via ADMM 44
6.2 Modelo Tridimensional - Solução via GIADMT 53

7 DADOS PARA AVALIAÇÃO E ANÁLISE DO MODELO MATEMÁTICO . . . 61
7.1 Dados Utilizados para a Validação do Modelo Bidimensional 61
7.1.1 Experimento de Hanford 61
7.1.2 Parametrização da Turbulência 64
7.1.3 Índices Estatísticos 65
7.2 Dados Utilizados para Analisar a Influência da Velocidade de Deposição nas Diferentes Classes de Estabilidade 66
7.2.1 Parametrização no Cenário Instável - Classe A e C 67
7.2.2 Parametrização no Cenário Estável - Classe E 67

8 RESULTADOS E DISCUSSÕES 69

9 CONCLUSÕES 86

REFERÊNCIAS 89

1 INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica é uma condição em que estão presentes no ar substâncias em concentrações mais elevadas ao encontrado em um ambiente limpo, gerando efeitos nocivos à população, à fauna, à flora, aos materiais e ao meio ambiente em geral. Os componentes principais da poluição são as fontes de emissão de poluentes para a atmosfera, o transporte, difusão e transformações químicas ou físicas e os seus receptores.

Os poluentes atmosféricos são oriundos de várias fontes, sejam elas naturais ou antropogênicas. As fontes naturais geram as partículas presentes na atmosfera que são provenientes de vulcões, da ação do vento sobre o solo, da combustão natural, entre outros. A poluição ocasionada por fontes antropogênicas vêm principlamente da queima de combustíveis fósseis, dos veículos automotores e da atividade industrial. A baixa qualidade do ar ocorre devido a altas concentrações de dióxido de enxofre (SO_2), material particulado (MP), monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2), ozônio (O_3), monóxido de nitrogênio (NO), dióxido de nitrogênio (NO_2), clorofluorcarbonetos (CFC), entre outros (POPESCU; IONEL, 2010).

Os problemas causados pela poluição do ar são diversos, afetando a saúde e bem-estar dos seres humanos e animais e danificando o ecossistema. A emissão de poluentes afeta a população em escala local, onde a qualidade do ar nas proximidades das fontes tende a ser pior devido a constantes emissões, em escala regional ou continental, devido à facilidade de transporte das substâncias pelo vento e à chuva ácida, e em escala global, com a concentração crescente da emissão dos gases de efeito estufa e o aumento do buraco na camada de ozônio (ARYA, 1999).

Os níveis de concentração de poluentes na atmosfera têm aumentado devido ao crescimento industrial e tecnológico, ao intenso tráfego de veículos automotores e à expansão da atividade agrícola com o aumento do uso de agrotóxicos e queimadas, causando sérios danos ao meio ambiente e na qualidade do ar, prejudicando a saúde do ser humano. Por este motivo, estudar e entender o processo da dispersão de poluentes na atmosfera é importante na busca de alternativas que minimizem os impactos ocasionados por fontes poluidoras aos diversos ecossistemas, bem como

desenvolver e melhorar modelos que avaliam a concentração e a dispersão destes.

A modelagem matemática é fundamental na estimativa de concentrações de poluentes que auxiliem num planejamento ambiental e na implementação de novas indústrias. Somente com esses modelos é possível descrever os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes, pois estes são numerosos e complexos. Segundo MOREIRA; TIRABASSI (2004) os modelos matemáticos são capazes de:

- descrever e interpretar os dados experimentais;
- analisar a qualidade do ar;
- avaliar as áreas de risco;
- avaliar a contribuição de uma única fonte à carga poluidora;
- administrar e planejar o território, por exemplo, através do monitoramento da qualidade do ar via problemas inversos.

Estes modelos possibilitam realizar simulações através de dados experimentais que estimam o campo de concentração de poluentes próximo à fonte, na busca de analisar o estado da qualidade do ar e avaliar o impacto ambiental causado, buscando soluções para evitar campos elevados de concentração de poluentes.

Existem duas abordagens de investigação que são utilizadas no estudo da dispersão de poluentes: experimento de campo e simulação computacional. A primeira mede valores de concentração dos principais parâmetros meteorológicos que influenciam a dispersão, e a segunda consiste no desenvolvimento de modelos para estimar a concentração e simular as medidas efetuadas. Devido ao fato das observações de campo serem muitas vezes dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos financeiros, torna-se a simulação um método importante de informação para a descrição destes processos.

Para que um modelo descreva adequadamente a relação entre as emissões de poluentes na atmosfera e a qualidade do ar, este deve levar em conta os parâmetros físicos, meteorológicos e micrometeorológicos que ocasionam o transporte de poluentes. Principalmente, o modelo matemático deve ser capaz de reproduzir o campo de concentração de poluentes medido nos experimentos.

A dispersão de poluentes na atmosfera é estudada utilizando basicamente duas formulações que se diferenciam pelo sistema de referência: a formulação euleriana, cuja trajetória da concentração é descrita através de um sistema de referência fixo no espaço, e a formulação lagrangiana que utiliza um sistema de coordenadas seguindo o movimento de determinadas partículas de fluidos.

Na estimativa do campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera, emprega-se, normalmente, a equação de advecção-difusão, considerando-se a

parametrização dos fluxos turbulentos. Sob certas condições, pode-se obter expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma (MONIN; YAGLOM, 1971; PASQUILL, 1974).

Nos modelos matemáticos de dispersão de poluentes, tem-se o chamado problema de fechamento que ocorre quando existe um maior número de incógnitas do que de equações. Uma das formas de solucionar este problema é através da Teoria do Transporte por Gradiente, ou teoria K, que é baseada na hipótese de que a turbulência é responsável por transportar uma quantidade de uma região de maior concentração para uma de menor concentração. Os fluxos turbulentos executam este transporte (MORAES, 2010). Esta teoria assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média através de um coeficiente de difusão turbulento. Em outras palavras, a ideia principal da teoria K é supor que a difusão turbulenta age de maneira análoga à difusão molecular e, portanto, o fluxo de qualquer propriedade é proporcional ao gradiente de seu campo médio (STULL, 1988).

Os poluentes atmosféricos tendem a se depositar sobre a superfície da terra. Desta forma, os modelos de difusão atmosféricos devem considerar a perda de poluentes por deposição seca e estimar a contaminação da superfície.

A deposição seca de partículas é um processo pelo qual os produtos químicos atmosféricos são transferidos por movimentos de ar para a superfície da terra. Ela é responsável pela remoção de alguns contaminantes do ar, reduzindo assim os níveis de concentração de poluentes a longas distâncias da fonte poluidora. O acúmulo de material poluente, em locais próximos ao nível do solo, juntamente com a absorção na superfície, afetando o solo e as construções, deve-se à deposição seca. Estimar a deposição de partículas é fundamental para avaliar o impacto de usinas de energia e fontes industriais.

A velocidade de deposição, denotada por V_d, descreve a taxa de deposição seca das partículas e é estimada a partir de relações teóricas adequadas ou é especificada de forma empírica.

A modelagem para a dispersão de poluentes abordada no presente trabalho é euleriana. O objetivo desta dissertação é analisar a distribuição da poluição na atmosfera e o decaimento da concentração nas diferentes classes de estabilidade na Camada Limite Planetária (CLP), a partir da equação de advecção-difusão estacionária bidimensional, e depois através da solução da equação tridimensional, considerando a velocidade de deposição seca do poluente. A deposição será incorporada no modelo de difusão como uma condição de contorno ao nível do solo, ou seja, o gradiente de concentração é definido pelo produto entre a concentração do poluente ao nível do solo e a velocidade de deposição seca de uma espécie.

A solução da equação bidimensional será obtida através do ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*) (MOREIRA et al., 2006) e, a fim de mostrar o desempenho da solução, o modelo será avaliado, para condições estáveis da atmosfera, considerando uma formulação teórica para a velocidade de deposição no solo conforme sugerido por ARYA (1999) a qual foi estimada por HANNA (1982). Serão também introduzidas algumas parametrizações da turbulência e os resultados preditos comparados com dados experimentais de Hanford (DORAN; HORST, 1985). O modelo tridimensional será resolvido usando o GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*) (COSTA et al., 2006).

A dispersão difusiva e o transporte advectivo de poluentes, tanto para a solução bidimensional quanto para a tridimensional, serão simuladas em diferentes classes de estabilidade atmosférica, especificadas por PASQUILL (1961), a fim de analisar o efeito da velocidade de deposição seca no solo.

A dissertação encontra-se estruturada em nove capítulos. No capítulo 2, apresenta-se a revisão bibliográfica de alguns dos principais trabalhos sobre modelos matemáticos que abordam a velocidade de deposição seca do poluente no solo. No capítulo 3, é introduzida uma breve descrição da estrutura da CLP. No capítulo 4, apresentam-se as classes de estabilidade presentes na atmosfera e a definição de alguns conceitos básicos. No capítulo 5, apresentam-se alguns conceitos da deposição de partículas. No capítulo 6, descreve-se o modelo matemático de poluição do ar e os métodos de solução da equação de advecção-difusão estacionária multidimensional considerando a velocidade de deposição seca. No capítulo 7, descrevem-se os dados utilizados para a avaliação e análise do modelo matemático, são detalhadas as características do Experimento de Hanford, as parametrizações da turbulência e os índices estatísticos empregados na validação do modelo bidimensional. Ainda neste capítulo são apresentados os dados micrometeorológicos das classes de estabilidade consideradas neste estudo e também as parametrizações da turbulência no cenário instável e no cenário estável. No capítulo 8, apresentam-se os resultados obtidos das simulações computacionais para ambos os modelos. No capítulo 9, finaliza-se o trabalho com as conclusões.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Os modelos aplicados a poluição do ar, baseados na formulação de pluma gaussiana, ou seja, na suposição de que a concentração pode ser descrita por uma distribuição normal, começaram a ser objetos de estudo no início do século XX, quando as teorias estatísticas de difusão e transporte de gradiente foram estabelecidas. As soluções para os modelos eram chamadas gaussianas, consideravam coeficientes de difusão constantes, e aproximavam a distribuição espacial do poluente a uma curva gaussiana por meio de parâmetros de dispersão empíricos obtidos a partir das variáveis micrometeorológicas (ARYA, 1999).

Um dos primeiros trabalhos de dispersão de poluentes que inclui a deposição seca no solo foi proposto por SUTTON (1947), no qual ele derivou a equação de dispersão da pluma, incluiu a hipótese de distribuição de Gauss para a dispersão vertical e o vento cruzado, e também incluiu o efeito de reflexão a terra da pluma.

CHAMBERLAIN (1953) derivou um modelo de deposição com base nas equações de SUTTON (1947) para a deposição de partículas finas e de gases. Ele apresentou um modelo de dispersão de poluentes através da modificação do modelo de pluma gaussiana incluindo a deposição seca no solo. A mudança consiste na intensidade da fonte, que depende da quantidade do poluente removido da pluma e esta intensidade diminui a distâncias mais afastadas da fonte. Esta modificação foi chamada de depleção de fonte, e baseia-se no pressuposto fisicamente irrealista que a forma do perfil de concentração não é alterada pela deposição, visto que o material perdido a partir da borda inferior da pluma de poluentes é distribuído uniformemente por toda a sua profundidade. Chamberlain observa que na descrição da difusão atmosférica de um material em uma pluma gaussiana habitual, a deposição seca de contaminantes sobre a superfície subjacente é geralmente apresentada reduzindo a intensidade da fonte de forma adequada.

CSANADY (1955) estende as equações de SUTTON (1947) para a difusão atmosférica de gases poluentes, para o caso da velocidade de deposição de partículas de poeira com velocidade uniforme de queda livre a partir de uma fonte pontual contínua elevada. Em artigos posteriores, CSANADY (1957, 1958) reformula suas

equações em forma gaussiana.

CALDER (1961) aborda o problema de difusão de partículas na atmosfera através da teoria K e chama a atenção para a necessidade de soluções mais realistas que considerem a deposição do material no solo. Ele destaca que a sedimentação gravitacional das partículas e a sua deposição na superfície devem estar representadas no problema. A sedimentação gravitacional está representada na equação de difusão por um termo de fluxo que envolve a velocidade de sedimentação (V_g) e a variação da concentração na direção z. A deposição é especificada como uma condição de contorno no solo e essa taxa de deposição deve ser proporcional à concentração de poluentes em $z = 0$. O fator de proporcionalidade tem dimensões físicas de uma velocidade e é chamado de velocidade de deposição (V_d).

Um ano depois SMITH (1962) primeiramente considera a velocidade de deposição constante para qualquer lançamento, depois busca estimar um valor adequado para V_d, no qual suspeita que este depende de fatores complexos tais como a natureza do terreno, a velocidade do vento e a aridez da superfície. Para considerar esses fatores complexos, Smith assume que a equação de advecção-difusão, considerando a sedimentação e a deposição de partículas, é capaz de representar fenômenos como:

- absorção química no solo do material transportado pelo ar (quando $V_d > V_g$).
- impacto do vento onde as partículas colidem em obstáculos que ficam próximos ao solo por causa da inércia (quando $V_d > V_g$).
- o retorno para a atmosfera das partículas depositadas, como em uma tempestade de poeira (quando $V_d < V_g$).

A equação é resolvida aplicando os métodos operacionais de Heaviside para cinco esquemas diferentes de V_d, V_g e coeficiente de difusão. Smith conclui que a velocidade de deposição é importante no sentido de reduzir rapidamente as concentrações de poluentes ao nível do solo.

HEINES; PETERS (1974) estudaram analiticamente a emissão de poluentes atmosféricos a partir de uma fonte pontual ou de linha para o caso em que o poluente pode ou não ser absorvido ao nível do solo, estudando os seus efeitos. Eles apresentaram a solução da equação de conservação de massa que considera as expressões para a concentração jusante a deposição (o fluxo de um ponto mais alto para um mais baixo) da fonte de emissão. A absorção ao nível do solo (na água) foi especificada como uma condição de contorno. Os perfis de concentração são afetados considerando apenas gases mais solúveis, tais como SO_2, amônia (NH_3) e ácido clorídrico (HCl). Heines e Peters concluiram, a partir dos cálculos feitos, que a concentração do nível do solo sobre a água é afetada apenas quando o gás é altamente solúvel em água, como o SO_2. Enquanto os oceanos podem servir como importantes repositórios

de gases menos solúveis, como CO e CO_2, a concentração ao nível do solo sobre a água perto de uma fonte de emissão não é susceptível de ser muito afetada pela taxa de absorção ou dessorção.

OVERCAMP (1976) propôs uma modificação do modelo de pluma gaussiana para a deposição fina e pesada de partículas e gases emitidos de uma fonte pontual elevada. Ele combina uma pluma negativamente inclinada, para dar conta da velocidade de sedimentação e da velocidade de deposição constantes, para obter uma solução que satisfaça a equação integral da conservação de massa, especificando que a mudança do fluxo do ar na direção do vento é igual a deposição no solo. Um exemplo é dado comparando este método com o modelo gaussiano convencional para deposição seca de gases ou partículas finas. Overcamp estende a teoria proposta por CSANADY (1955) para o caso em que a velocidade de sedimentação gravitacional não é igual a velocidade de deposição. O modelo de Overcamp, quando aplicado ao caso de deposição de gases e partículas, mostra boa concordância com o modelo de deposição seca convencional para a condição instável, mas apresenta estimativas substancialmente inferiores da deposição em condições estáveis.

Um ano depois HORST (1977) desenvolve um modelo que elimina a pluma gaussiana apenas na vizinhança da superfície de deposição, em vez de eliminar em toda coluna como feito no modelo de depleção de fonte, ou seja, no ponto de deposição vai efetuar uma redução da concentração do ar através da sobreposição de soluções na equação de difusão. O modelo é chamado de depleção de superfície, e é usado para mostrar que o modelo de depleção de fonte prevê a concentração do ar ao longo da superfície e a deposição em locais próximos da fonte e a favor do vento e, em consequência, é polarizado no sentido oposto para locais distantes da fonte. Em todas as distâncias da fonte, o modelo de depleção de fonte superestima a deposição total entre fonte e receptor e, consequentemente, subestima a quantidade restante de material transportado pelo ar.

No mesmo ano, ERMAK (1977) apresenta uma solução analítica da equação de difusão atmosférica tridimensional, considerando os coeficientes de difusão como uma função da distância a favor do vento, a partir da fonte e com a média da velocidade do vento considerada constante. Ele representa um modelo de transporte e deposição de poluentes emitidos a partir de uma fonte pontual elevada sobre um terreno plano. A deposição de poluentes é contabilizada como um termo de sedimentação gravitacional na equação e a absorção no solo como uma condição de fronteira na superfície, como proposto por CALDER (1961). Os resultados para o caso geral, com sedimentação e deposição, são expressos em termos de parâmetros da pluma gaussiana.

RAO (1981) apresenta uma breve revisão dos métodos analíticos, disponíveis na literatura, que incluem a deposição seca do poluente em um modelo de pluma gaussiana. O autor descreve um modelo analítico de difusão da pluma e deposição seca

no solo de partículas e gases emitidos a partir de uma fonte pontual contínua elevada, com base na teoria K. As soluções são apresentadas através de um modelo de pluma gaussiana para as diferentes estabilidades atmosféricas.

HORST (1984) compara quatro modelos de depleção de pluma que considera a deposição seca: um modelo de depleção de superfície, dois modelos de depleção de fonte e uma adaptação da solução da equação de advecção-difusão para coeficientes de difusividade constantes. Ele recomenda dois modelos simples de depleção de pluma, um modelo que é uma correção do modelo de pluma gaussiana geral para a deposição, ou seja, a solução analítica da equação de advecção-difusão com coeficientes de difusão constantes que estima o transporte, a deposição e a sedimentação de partículas. O segundo é um modelo de correção para a depleção de fonte simples que representa a mudança no perfil de concentração vertical provocada pela deposição.

DORAN; HORST (1985) avaliam quatro modelos de depleção de pluma gaussiana, que consideram a deposição seca de poluentes, a partir de dados obtidos no experimento de Hanford. Todos os modelos foram resolvidos analiticamente com velocidade média do vento constante e difusividade turbulenta uniforme na vertical. Foram analisados o modelo de depleção de fonte (CHAMBERLAIN, 1953) que contabiliza a perda da concentração do poluente na pluma pela redução da emissão, e o modelo modificado de depleção de fonte (HORST, 1980, 1983) no qual é aplicado um fator de correção na distribuição de concentração para considerar as mudanças provocadas pela deposição. Também consideraram o modelo K[1] (ERMAK, 1977) que é baseado na solução da equação de advecção-difusão considerando a difusão turbulenta constante e a deposição escrita na condição de contorno, e o modelo K corrigido (RAO, 1981) para representar fisicamente atmosferas estáveis e instáveis. Os autores observaram que os modelos de depleção de fonte e de coeficientes de difusão constantes superestimam a concentração de poluentes, com e sem deposição, perto da superfície. Assim, aplicaram um perfil de correção para ambos os modelos a fim de melhorar visivelmente as estimativas destes. Os melhores resultados foram obtidos para o modelo de depleção de fonte.

KOCH (1989) apresentou uma solução analítica da equação bidimensional de difusão atmosférica incluindo os efeitos de absorção ao nível do solo. A solução considera para a velocidade do vento e o coeficiente de difusão turbulenta vertical funções potência de z. A equação foi resolvida através da aplicação da Transformada de Laplace e do uso da função de Bessel para resolver a equação diferencial resultante. A velocidade de deposição foi escrita em termos da função hipergeométrica especial, também chamada de função de Kummer.

CHRYSIKOPOULOS; HILDEMANN; ROBERTS (1992) apresentaram uma solução

[1]Modelo matemático baseado na teoria K.

analítica para a equação tridimensional de dispersão atmosférica em estado estacionário para o transporte de poluentes de emissões sem empuxo (não flutuantes), a partir de uma fonte aérea contínua ao nível do solo que inclui a deposição seca como um mecanismo de remoção. O modelo usa perfis de lei de potência com a altura para a velocidade do vento e a difusividade turbulenta vertical. A difusidade turbulenta lateral é representada como uma função da velocidade do vento e o coeficiente de dispersão de vento cruzado. Na solução, foram incorporadas funções hipergeométricas e foi analisada a distribuição da concentração em diversas classes de estabilidade atmosférica.

LIN; HILDEMANN (1997) desenvolveram uma solução analítica da equação de difusão atmosférica através da aplicação de funções de Green representadas por funções de Bessel modificadas. O modelo é desenvolvido para simular a dispersão de poluentes que são absorvidos ou depositados no solo.

Dois anos depois, HUANG (1999) desenvolveu soluções analíticas para a equação tridimensional de difusão atmosférica para fontes pontuais em fluxo de cisalhamento turbulento considerando a deposição seca no solo com e sem sedimentação. A velocidade média do vento e a difusividade turbulenta foram descritas por leis de potência.

SMITH (2003) resolveu a equação de advecção-difusão para uma fonte de distribuição usando a transformada rápida de Fourier. Ele incluiu na equação quatro processos físicos: a deposição seca no solo, o assentamento gravitacional, o decaimento e a conversão no transporte pelo ar para espécies secundárias.

ESSA; ETMAN; EMBABY (2007) fazem um estudo analítico da dispersão de poluentes de uma fonte pontual sob diferentes estabilidades, considerando a variação vertical da velocidade do vento e do coeficiente de difusão. No estudo da equação bidimensional de advecção-difusão, a deposição de partículas no solo é considerada como uma condição de contorno na superfície e a difusão vertical é limitada por uma camada elevada de inversão. Para a modelagem da dispersão de poluentes, é assumido que a forma do perfil vertical da concentração do contaminante varia com a altura z, com a altura da CLP e com o comprimento de Monin-Obukhov (MONIN; OBUKHOV, 1954). A concentração é obtida com a suposição que a distribuição de poluentes na direção vertical é dada por um polinômio. O vento utilizado é logarítmico e o coeficiente de difusão é diferente de zero na superfície do solo para ser possível a difusão vertical.

No presente trabalho, são de particular interesse as soluções analíticas [2] da equação de advecção-difusão obtidas através de técnicas de transformadas inte-

[2] Por solução analítica entende-se uma expressão que descreve a solução do problema. Uma técnica analítica pode nos levar a uma solução exata ou aproximada. Esta última se verifica quando usamos, por exemplo, análise assintótica ou expansão em série (se a truncamos) (NACHBIN; TABAK, 1997). O teorema de Cauchy-Kovalevskaya garante a existência e unicidade da solução da equação de advecção-difusão (COURANT; HILBERT, 1989).

grais. Exemplos destas técnicas são os métodos ADMM, GITT e GILTT. As soluções analíticas podem ser expressas na forma integral, como é o caso da solução encontrada via ADMM, ou com uma formulação em série, pela transformada integral generalizada, conhecida como GILTT. Como pode ser visto em (MOREIRA et al., 2010a) estas soluções são similares, assim sendo, a partir deste momento os modelos que utilizam o método ADMM será o enfoque para obtenção da solução analítica da equação de advecção-difusão.

COSTA et al. (2007) apresentaram uma comparação entre os métodos ADMM e GILTT através da resolução da equação de advecção-difusão bidimensional estacionária descrevendo a deposição seca como uma condição de contorno de fluxo não nulo para o solo. Os modelos foram avaliados utilizando os dados observados no experimento de Hanford e os resultados apresentados por ambos são similares.

TIRABASSI et al. (2008) apresentaram uma solução analítica da equação de advecção-difusão bidimensional estacionária obtida através da técnica GILTT e considerando a velocidade de deposição seca no solo. O modelo foi avaliado com os dados do experimento de Hanford e a solução foi comparada com quatro modelos diferentes encontrados na literatura para a deposição no solo.

MOREIRA et al. (2010b) resolveram semianaliticamente a equação de advecção-difusão bidimensional estacionária com velocidade de deposição através do método ADMM. Foram consideradas condições moderadamente estáveis a condições quase neutras para a atmosfera e diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical. A solução foi avaliada de acordo com os dados do experimento de Hanford e comparada com cinco modelos: modelo de depleção de fonte (CHAMBERLAIN, 1953), modelo de depleção de fonte corrigido (HORST, 1980); (HORST, 1983), modelo K (ERMAK, 1977); (RAO, 1981), modelo K corrigido (RAO, 1981) e o GILTT (TIRABASSI et al., 2008).

CHANDRA; JAIPAL; K. (2011) resolveram a equação bidimensional de transporte de massa no estado estacionário considerando a velocidade de sedimentação gravitacional e a deposição seca no chão. A solução é obtida pela aplicação da técnica GILTT. A velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical variam com a altura e foram especificados por leis de potência. Os resultados são apresentados graficamente mostrando o efeito da sedimentação gravitacional e da deposição seca no solo na concentração de poluentes ao nível do solo.

MOREIRA; GOULART; MORAES (2013) apresentaram a solução semianalítica da equação de advecção-difusão bidimensional estacionária, através de um método da Transformada de Laplace. O modelo leva em consideração a velocidade de queda de partículas, remoção (deposição seca e úmida) e reações químicas de primeira ordem. Dois métodos de inversão são testados: o esquema da quadratura gaussiana (STROUD; SECREST, 1966) e o método Fixed-Talbot (ABATE; VALKÓ, 2004).

A solução é avaliada através de dados obtidos no experimento de Hanford, condições estáveis, considerando a solução com e sem velocidade de deposição, e no experimento de Praire Grass, condições instáveis, sem considerar a deposição do poluente.

Através das informações descritas acima, pode-se observar o interesse em investigar e buscar soluções mais abrangentes da equação de advecção-difusão com deposição seca no solo, ou seja, considerar na equação a perda de substâncias por deposição uma vez que esse fenômeno está presente em vários poluentes. Com o presente trabalho, espera-se complementar os estudos por meio da análise de distribuição da poluição na atmosfera e o decaimento da concentração nas diferentes classes de estabilidade na CLP para as soluções multidimensionais da equação.

3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

A atmosfera terrestre é composta por quatro camadas nessa ordem: troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera. Os escoamentos atmosféricos e fenômenos relacionados podem ser classificados em três categorias de acordo com suas dimensões horizontais e temporais (ARYA, 1999):

- Macroescala: distâncias superiores à $1000Km$ e escala de tempo de 1 dia ou mais;
- Mesoescala: distâncias entre 5 e $1000Km$ e escala de tempo de 1 hora a 1 dia;
- Microescala: distâncias menores que $5Km$ e escala de tempo de 1 hora ou menos.

O enfoque deste trabalho se concentra dentro da troposfera que é onde ocorre a formação da maioria dos fenômenos climáticos e movimentos de microescala.

A troposfera é a camada inferior da atmosfera que se estende do solo até uma altura média de aproximadamente $11Km$ e é caracterizada por apresentar uma diminuição da temperatura com a altura. A troposfera pode ser dividida em duas partes, a Camada Limite Planetária (CLP) (ou Camada Limite Atmosférica) e a Atmosfera Livre.

A CLP está situada na baixa atmosfera, e nela encontram-se a maioria das fontes emissoras de poluentes, tanto fontes naturais como antropogênicas, por estar em contato com a superfície. É nesta camada que predominam as características turbulentas, e os poluentes são lançados e transportados pelo vento e difundidos pela turbulência.

A Atmosfera Livre é a parte acima da CLP se estendendo por todo o restante da Troposfera, essa camada é dominada por processos meteorológicos associados aos sistemas atmosféricos de larga escala.

A CLP é definida como uma parte da troposfera que sofre influências diretas da superfície e responde a forçantes superficiais com uma escala de tempo de aproximadamente uma hora ou menos. A espessura dessa camada é muito variável podendo atingir desde algumas centenas de metros a poucos quilômetros (STULL, 1988). Esses forçantes incluem arrastro friccional, evaporação, transpiração, transferência de

calor, modificações do fluxo induzidas pelo terreno e emissão de poluentes. A troca de energia e o atrito viscoso devido à superfície tornam o escoamento da CLP tipicamente turbulento e este está associado ao fluxo vertical de calor.

O fluxo de ar é dividido em três grandes categorias: vento médio, ondas e turbulência. O vento médio é responsável pelo transporte advectivo horizontal e a velocidade comum na CLP varia de 2 a $10\,m/s$. Ventos verticais são muito menores (de ordem de centímetros por segundo) e, devido ao atrito com o chão, a velocidade média do vento é menor perto do solo. As ondas são responsáveis pelo transporte de quantidade de movimento e energia, e são geradas pelo cisalhamento do vento e do fluxo médio sobre obstáculos. STULL (1988) define a turbulência como muitos turbilhões de tamanhos diferentes sobrepostos, que são como redemoinhos irregulares, e ela é gerada por forçantes a partir do solo.

A espessura da CLP representa a região na qual as propriedades atmosféricas como a pressão, umidade, densidade e temperatura são modificadas. A altura varia conforme a superfície, terra ou água, e é menor em regiões de alta pressão do que em regiões de baixa pressão.

Segundo STULL (1988), sobre a superfície terrestre em regiões de alta pressão a CLP tem uma estrutura bem definida que evolui com o ciclo diurno. A figura 1 mostra a evolução temporal da CLP ao longo do dia.

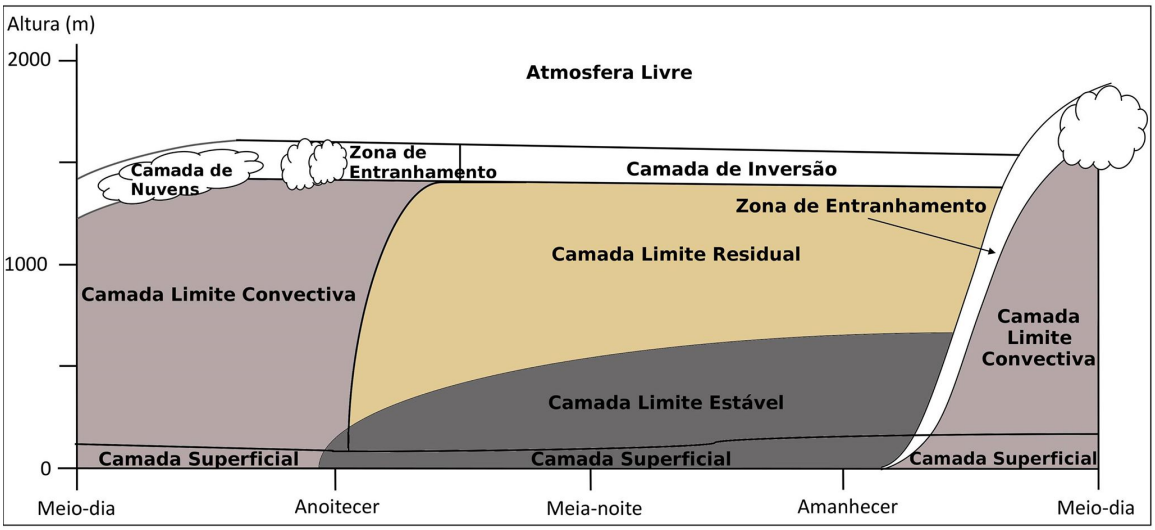


Figura 1: Evolução da camada limite planetária. Adaptada de STULL (1988).

Na CLP entre o solo e 10% da sua altura, existe uma região chamada Camada Limite Superficial (CLS), nesta região os fluxos turbulentos e cisalhantes variam menos de 10% de suas magnitudes. É caracterizada por grandes gradientes de temperatura, umidade e velocidade do vento por estar em contato direto com o solo. A direção do vento, do fluxo de calor e da quantidade de movimento é constante sobre a superfície e a temperatura potencial decai com a altura. A estrutura desta camada perdura durante todo o período.

A superfície terrestre começa a ser aquecida com o nascer do sol, pela radiação solar. Essa radiação é absorvida pela superfície e através de fluxo positivo de energia na forma de calor da superfície para a atmosfera, induzindo correntes térmicas, aquecendo a CLP. Com o aquecimento da CLP, a Camada Limite Convectiva (CLC), ou Camada de Mistura, começa a se desenvolver e vai crescendo atingindo seu máximo por volta do meio-dia. Com a diminuição da incidência de radiação a CLC começa a decair, deixando de existir no pôr do sol quando começa a formar a Camada Limite Estável (CLE) pelo resfriamento radiativo da superfície, quando o fluxo de energia na forma de calor da superfície para a atmosfera começa a decrescer até ficar negativo durante a noite. Esta camada é formada pela estratificação térmica e acima desta forma-se a Camada Limite Residual (CLR) formada por resíduos da CLC. A CLR forma-se aproximadamente 1 hora após o pôr do sol e é caracterizada pelo decaimento da turbulência convectiva. Nas transições das camadas quando não há cobertura de nuvens ou campos intensos de velocidade tem-se a presença da Camada Limite Neutra (CLN).

A CLC é formada pelo aquecimento da superfície por radiação solar, aproximadamente meia hora depois do amanhecer, onde as termas de ar [1] se elevam da superfície e são responsáveis pela turbulência atmosférica. Essa mistura convectiva provoca um crescimento profundo na CLC e produz ventos quase uniformes com a altura, na qual a altura típica varia de $1000m$ a $3000m$ no meio da tarde e esta camada cessa no pôr do sol. A CLC é caracterizada por uma intensa mistura definindo-a como instável, no seu topo encontra-se a Zona de Entranhamento (ZE), que atua como uma tampa para correntes térmicas, restringindo o domínio da turbulência. A ZE é a camada onde ocorre a inversão térmica, massas de ar quente sobem e se encontram com as massas de ar frio que descem. Essa camada funciona como uma barreira para o transporte de poluentes, pois a pluma do contaminante fica confinada abaixo da inversão. A ZE é frequentemente chamada de camada de inversão, a altura média da base de inversão é denotada por z_i e é frequentemente utilizada para determinar a altura (h) aproximada da CLC. Acima da ZE tem-se a atmosfera livre.

Cerca de meia hora antes do pôr do sol, as termas de ar não são mais formadas, devido à ausência de advecção de ar frio, assim a turbulência decai iniciando o processo de decaimento da convecção. Uma fina e densa camada estável forma-se junto com a superfície quando o fluxo desta torna-se negativo. Acima desta camada estável encontra-se uma camada de ar resultante, a CLR, pois as suas variáveis de estado e concentração são as mesmas do recente decaimento da camada convectiva. Esta camada não tem contato com o solo pois encontra-se acima da CLE. Os poluentes liberados durante o dia tendem a ficar confinados nesta camada durante a noite na ausência de advecção. As propriedades dessa camada dependem do cisalhamento

[1] São massas de ar quente que se elevam da superfície por serem menos densas.

do vento e do gradiente de temperatura potencial [2] da camada anterior. A CLR está envolvida nos processos de troca de calor entre a atmosfera e a superfície terrestre. Esta camada é estratificada neutramente e as plumas de poluentes emitidas para esta camada se dispersam em proporções iguais nas direções vertical e transversal criando uma pluma em forma de cone (STULL, 1988).

A CLE ou Noturna é formada perto do solo, quando a superfície encontra-se mais fria do que a camada de ar adjacente, ou seja, no anoitecer, quando houve o decaimento da convecção. Ocorre uma transferência de calor da atmosfera para o solo e os movimentos ascendentes das termas de ar são freados por ação da força de empuxo. Esse resfriamento e a mistura da turbulência mais fraca relacionada com o cisalhamento do vento na superfície fazem com que a CLE fique muito rasa. A velocidade e a direção do vento variam significativamente com a altura, tendo um valor máximo próximo ao topo da camada, a turbulência é reduzida e a taxa de variação da temperatura potencial aumenta com a altura. O crescimento da CLE pode atingir alturas de dezenas de metros até 200 ou 300 metros.

A CLN ocorre sobre o oceano, na qual a atmosfera não inibe nem intensifica a turbulência. Quando o fluxo de calor é próximo ou igual a zero durante o período de transição do dia para a noite, isto é, a temperatura não varia com a altura e a superfície do solo não atua como fonte de energia térmica, tem-se a CLN. Também é formada em dias de céu encoberto, quando a superfície perde calor para a atmosfera durante o dia. A ocorrência da CLN é observada na atmosfera apenas em intervalos de tempo pequenos de modo a considerar a CLP em condições quase-neutras.

[2] A temperatura potencial de uma parcela de ar é definida como a temperatura que a parcela teria se fosse expandida ou comprimida adiabaticamente de seu estado real de pressão e temperatura para uma pressão padrão (geralmente $1000kPa$). Um escoamento adiabático é aquele que ocorre sem que haja troca de energia com o meio.

4 CLASSES DE ESTABILIDADE

O transporte e dispersão de poluentes atmosféricos são influenciados pela velocidade média do vento, pela distribuição vertical da temperatura e também pela presença de turbulência na atmosfera, além de outros fatores. Para analisar o comportamento da dispersão é necessário conhecer as condições de estabilidade atmosférica.

A estabilidade atmosférica pode ser definida como sendo a sua capacidade de resistir ou intensificar os movimentos verticais. Quando ela resiste aos movimentos verticais é chamada de atmosfera estável, quando intensifica os movimentos verticais é dita atmosfera instável ou convectiva e quando é indiferente a qualquer tipo de movimento vertical é chamada de atmosfera neutra (MORAES, 2004).

Um sistema de classificação de estabilidade foi proposto por Pasquill (PASQUILL, 1961) e é a caracterização mais usada para a modelagem da difusão de poluentes e parametrizações da turbulência devido a sua simplicidade e praticidade.

PASQUILL (1961, 1974) classificou a atmosfera em seis classes de estabilidade de A à F, sendo que a classe A corresponde a classe extremamente instável e F, a mais estável, conforme tabela 1.

Tabela 1: Classes de Estabilidade Atmosférica segundo Pasquill

Classes de Estabilidade Atmosférica	
A	extremamente instável
B	moderadamente instável
C	levemente instável
D	neutra
E	levemente estável
F	moderadamente estável

Estas classes dependem de alguns parâmetros meteorológicos como a velocidade do vento a uma altura de cerca de 10 metros, a incidência de radiação solar na superfície terrestre durante o dia e a fração de cobertura de nuvens durante a noite, conforme tabela 2.

Pode-se destacar que quanto maior a incidência de radiação solar, maior será a

radiação absorvida pela superfície terrestre, consequentemente maior será o fluxo de calor entre a superfície e as camadas adjacentes de ar, dessa forma a turbulência será maior. À noite, uma atmosfera menos turbulenta se faz presente devido a uma maior incidência de cobertura de nuvens, que mantém o calor na superfície terrestre, dificultando as trocas térmicas.

Tabela 2: Classificação da Estabilidade Atmosférica de Pasquill

Velocidade do Vento em $10m$	Incidência de Radiação Solar			Cobertura de Nuvens durante a noite [1]	
(m/s)	Forte	Moderado	Leve	$\geq 4/8$	$\leq 3/8$
< 2	A	A-B	B		
$2-3$	A-B	B	C	E	F
$3-5$	B	B-C	C	D	E
$5-6$	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Existe um grande número de características consistentes e repetidas na CLP que permitem desenvolver relações empíricas entre as variáveis e inferir uma dependência direta entre distintas variáveis que caracterizam o estado da CLP. A Teoria de Similaridade baseia-se na organização das variáveis em grupos adimensionais e na dedução de relações empíricas entre estes grupos, que são universais, isto é, aplicáveis sempre e em qualquer lugar (STULL, 1988).

A Teoria de Similaridade proposta por MONIN; OBUKHOV (1954) para a camada superficial baseia-se no fato de que nesta camada as variações dos fluxos verticais são tratadas como constantes. A partir de uma aproximação originada nos argumentos da teoria estabeleceram um parâmetro que avalia o grau de estabilidade da camada limite atmosférica: o comprimento de Monin-Obukhov (L). De acordo com SEINFELD; PANDIS (1997) L pode ser interpretado fisicamente como a altura acima do solo, na qual há um equilíbrio entre produção de energia cinética turbulenta por efeitos mecânicos (cisalhamento do vento) e a sua destruição por efeitos de empuxo, isto é, onde os fluxos turbulentos mecânicos e térmicos apresentam os mesmos valores. O comprimento de Monin-Obukhov exprime a relação entre o fluxo turbulento de origem mecânica e convectiva e é dado pela equação:

$$L = -\frac{u_*^3 \Theta}{\kappa g (\overline{w\theta})_0} \tag{4.1}$$

onde u_* é a velocidade de fricção na superfície, Θ é a temperatura potencial média, κ

[1]Segundo as normas meteorológicas, definidas pela Organização Mundial Meteorológica (OMM), a determinação da cobertura de nuvens ocorre através da inspeção do céu, por técnicos que trabalham em estações meteorológicas. O céu é dividido em oito partes e a quantidade de nuvens é expressa por uma fração proporcional à área encoberta e com aproximações em oitavos, a fim de se obter um total máximo de 8/8 (SOUZA ECHER; MARTINS; PEREIRA, 2006; SILVA; SOUZA ECHER, 2013).

é a constante de von Kármán, g é a aceleração da gravidade e $(\overline{w\theta})_0$ é o fluxo de calor turbulento na superfície.

O L é um comprimento em módulo e o seu sinal indica a direção do fluxo de calor, se o fluxo de calor for positivo o valor de L é negativo, indicando instabilidade atmosférica e quando o fluxo de calor é negativo, o valor de L é positivo, ou seja, a atmosfera é estável.

A velocidade convectiva, w_*, é a combinação entre o fluxo de empuxo e a altura da CLP (h). Ela é utilizada na CLC para definir a ordem de magnitude das flutuações de termas. A velocidade de fricção, u_*, mede a intensidade do cisalhamento do vento, ou seja, quanto está variando a direção e/ou velocidade do vento ao longo de uma dada distância. O comprimento de rugosidade aerodinâmico, z_0, é definido como a altura em que a velocidade do vento se torna zero. O valor varia de acordo com o tipo de superfície.

A razão entre a altura da CLC e o comprimento de Monin-Obukhov, $z_i/|L|$, expressa a importância da turbulência convectiva em relação à turbulência mecânica e pode ser considerada um parâmetro de estabilidade determinando se o experimento é de convecção fraca, moderada ou alta (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

- se $z_i/|L| < 5$ tem-se convecção fraca;
- se $5 < z_i/|L| < 10$ tem-se convecção moderada;
- se $z_i/|L| > 10$ tem-se convecção alta.

SEINFELD; PANDIS (1997) relacionaram L com a estabilidade atmosférica, conforme a tabela 3:

Tabela 3: Relação entre o comprimento de Monin-Obukhov e as condições de estabilidade

Estabilidade Atmosférica de Pasquill	$L(m)$
Extremamente Instável - A	$-100 < L < 0$
Instável - B,C	$-10^5 < L < -100$
Neutra - D	$\|L\| > 10^5$
Levemente Estável - E	$10 < L < 10^5$
Moderadamente Estável - F	$0 < L < 10$

A estabilidade atmosférica também pode ser determinada através do perfil vertical de temperatura. SEINFELD (1986) apresentou uma relação entre as classes de estabilidade de Pasquill e o gradiente vertical de temperatura real (T) e de temperatura potencial (Θ), conforme a tabela 4.

Quando $\partial\Theta/\partial z < 0$ a atmosfera encontra-se em condições instáveis, com $\partial\Theta/\partial z = 0$ em condições neutras e $\partial\Theta/\partial z > 0$ em condições estáveis.

Tabela 4: Relação entre a estabilidade atmosférica e a estratificação da temperatura real T e potencial Θ na atmosfera

Estabilidade Atmosférica de Pasquill	$\partial T/\partial z(^{\circ}\mathrm{C}/100m)$	$\partial \Theta/\partial z(^{\circ}\mathrm{C}/100m)$
A	$< -1,9$	$< -0,9$
B	$-1,9$ a $-1,7$	$-0,9$ a $-0,7$
C	$-1,7$ a $-1,5$	$-0,7$ a $-0,5$
D	$-1,5$ a $-0,5$	$-0,5$ a $0,5$
E	$-0,5$ a $1,5$	$0,5$ a $2,5$
F	$> 1,5$	$> 2,5$

5 TEORIA DA DEPOSIÇÃO

A remoção de partículas e gases da atmosfera para a superfície ocorre diretamente por deposição. Existem duas formas de deposição de poluentes: deposição úmida e deposição seca.

Deposição úmida é definida como o processo de remoção de composto pelo qual poluentes transportados pelo ar (gases e partículas) são absorvidos em elementos de precipitação (gotas de água, partículas de gelo e flocos de neve) e, assim, depositam sobre a superfície da terra durante a precipitação (ARYA, 1999). Deposição úmida é entregue à superfície da terra em forma de chuva, neve e neblina (CHANTARA; CHUNSUK, 2008). Ela ocorre através de interações físicas e químicas complexas envolvendo propriedades dos meios de eliminação e das espécies removidas. Mas tais processos de deposição úmida não serão aqui considerados.

Deposição seca é o processo pelo qual os produtos químicos atmosféricos são transferidos por movimentos do ar para a superfície da Terra (WESELY; HICKS, 2000). Ela ocorre por transferência turbulenta e por sedimentação gravitacional sobre a terra e sobre superfícies de água (LOVETT, 1994). Deposição seca é governada pela concentração no ar, por processos de transporte de turbulência na camada limite atmosférica, por assentamento gravitacional (para partículas suficientemente grandes), por difusão molecular ou outros processos de transporte perto da superfície, pela natureza química e física de deposição das espécies, e pela capacidade da superfície para capturar ou absorver gases e partículas (ERISMAN et al., 1994).

A sedimentação gravitacional é negligenciada em comparação com a difusão turbulenta em gases e partículas com raios menores que $10\mu m$. Devido ao fato que os poluentes que não sedimentam incluem partículas respiráveis e são transportados para distâncias maiores a partir da fonte de lançamento, considera-se apenas a deposição seca do poluente.

A deposição seca é governada por três componentes maiores: variáveis micrometeorológicas, propriedades do poluente depositado e variáveis de superfície. Devido à complexidade de interação desses componentes, que são influenciados por parâmetros específicos, não são completamente compreendidos.

Os fenômenos de transporte são os processos meteorológicos mais importantes que afetam a deposição seca. Os processos regidos pelo perfil do vento, temperatura, coeficiente de difusão e por sedimentação gravitacional (para partículas suficientemente grandes) entre a camada limite e o solo são os que mais afetam a deposição seca. Eles são fortemente influenciados por duas variáveis micrometeorológicas, a velocidade de fricção (u_*) e a rugosidade da superfície aerodinâmica (z_0). A estabilidade atmosférica também intervém na deposição seca, uma vez que tem uma forte influência sobre a distribuição média do vento e da turbulência na camada superficial.

A taxa de deposição seca de gases e partículas pode ser expressa na forma de um termo de velocidade, V_d (CHAMBERLAIN; CHADWICK, 1953, 1966):

$$V_d = -\frac{F}{C}\,. \tag{5.1}$$

A velocidade de deposição seca de um determidado poluente é definida como a razão entre o fluxo descendente F, da deposição seca do poluente para a superfície, e a concentração do poluente C na altura especificada (tipicamente de 1 à 2 metros acima da superfície). Ela é positiva por convenção micrometeorológica e por isso requer um sinal negativo no fluxo descendente, F, por definição. Sua unidade é cm/s.

As velocidades de deposição secas mais medidas são as de dióxido de enxofre (SO_2) com V_d variando entre 0.04 e $7.5cm/s$ e iodo (I_2) entre 0.02 e $26cm/s$. A variabilidade é muito grande por causa da dependência esperada de V_d em variáveis micrometeorológicas, seu valor muda dependendo do tipo de superfície, da velocidade do vento, da estabilidade, entre outros fatores.

Velocidade de deposição seca não pode ser prevista com certeza a partir de medições de campo. Muitas vezes uma velocidade de deposição de $1cm/s$ é assumida, devido tanto à falta de qualquer estimativa melhor, quanto às incertezas conhecidas pelo modelador (SEHMEL, 1980).

Como regra geral, uma velocidade de deposição de $1cm/s$ é moderadamente grande e é um valor típico para o ozônio (O_3) a poucos metros de algumas superfícies com vegetação. Substâncias inertes têm um valor médio nulo para V_d; substâncias altamente reativas, como o ácido nítrico (HNO_3), têm velocidades de deposição de $2cm/s$ ou mais. Para substâncias cujas taxas de emissão do poluente a partir da superfície são significativas, o conceito de uma velocidade de deposição não é aplicável (WESELY; HICKS, 2000).

As medidas diretas de deposição seca demonstraram que a deposição seca para superfícies pode ser razoavelmente inferida pela multiplicação da concentração de gás acima de uma superfície de rastreio por uma velocidade de deposição, que pode ser estimada a partir de características micrometeorológicos ou de superfície (WALCEK, 1987). As medições diretas são limitadas pela dificuldade em se garantir a precisão.

A velocidade de deposição é obtida utilizando um modelo de resistência múltipla de transferência (HICKS et al., 1987) para contabilizar os processos químicos e biológicos que controlam a absorção de poluentes e na captura de superfícies naturais. Para gases residuais V_d é obtida da soma de três principais componentes como uma expressão similar a Lei de Ohm para circuitos elétricos. São três fases envolvidas: uma fase que envolve o transporte do material através da camada superficial da atmosfera até a vizinhança da superfície, utilizando o mecanismo de transferência caracterizado como a turbulência na superfície, ou seja, o componente aerodinâmico da transferência; a etapa chamada de superfície do componente de transporte, que envolve a difusão do material através da subcamada molecular adjacente à própria superfície; e a fase que envolve a absorção do material e a sua remoção a partir da superfície, chamada de componente de transferência de substrato. A parametrização é representada como:

$$V_d = \frac{1}{R_a + R_b + R_c}, \tag{5.2}$$

onde R_a é uma resistência aerodinâmica sobre a superfície, R_b é a resistência da camada quase-laminar e R_c é a resistência de superfície ou de transferência. Os três termos de resistência representam propriedades de massa da baixa atmosfera ou da superfície e eles devem ser descritos por parametrizações.

O termo R_a é uma resistência aerodinâmica sobre a superfície e tem o mesmo valor para todas as substâncias. É a resistência para transferir uma espécie, como resultado da difusão turbulenta na camada de superfície entre uma altura z e a superfície, caracterizado por z_0 (comprimento de rugosidade). R_a depende também de outros parâmetros micrometeorológicos como a velocidade do vento, velocidade de fricção e estabilidade atmosférica. Através da introdução de uma analogia elétrica, a resistência aerodinâmica para transferência de impulso pode ser definida como a relação do gradiente de impulso para o momento de fluxo. É calculada a partir da seguinte equação (ARYA, 1999):

$$R_a = \frac{\ln(z_r/z_0) - \psi_m(z_r/L)}{\kappa u_*}, \tag{5.3}$$

onde u_* é a velocidade de fricção, $\kappa = 0.4$ é a constante de von Kármán, ψ_m é a função de similaridade para a velocidade normalizada, z_r é a altura de referência, z_0 é o parâmetro comprimento de rugosidade e L é o comprimento de Monin-Obukhov.

O termo R_b é a resistência da camada quase-laminar para o transporte através da fina camada de ar em contato com elementos da superfície e varia com a difusividade da substância. Pode ser estimada a partir de medições da velocidade média do vento e radiação e informações da rugosidade da superfície, juntamente com parametrizações encontradas na literatura. Em outras palavras, R_b está associada à transferência de

massa, através da camada de ar onde a difusão molecular predomina sobre o transporte turbulento. Esta resistência é fortemente influenciada pela difusividade do material, pela rigidez da superfície e a velocidade do vento (FELICIANO, 2001).

Também é calculada a partir da seguinte equação (WESELY; HICKS, 1977):

$$R_b = \frac{2}{\kappa u_*}(\nu/D_j)^{2/3}, \tag{5.4}$$

onde ν é a viscosidade cinemática do ar e D_j é a difusividade molecular de uma espécie j no ar.

Outra relação da resistência de subcamada é descrita por ARYA (1999) e depende somente de variáveis micrometeorológicas:

$$R_b = \frac{A}{\kappa u_*}, \tag{5.5}$$

em que a constante empírica A é estimada para estar entre 2 e 2.6 (WESELY; HICKS, 1977).

O termo R_c é a resistência de superfície ou de transferência e caracteriza a afinidade da superfície para a absorção de poluentes (suposição de que a concentração C tende para zero no ponto de remoção). R_c depende da interação físico-química entre o material e a superfície, o que é provavelmente mais difícil de expressar quantitativamente. É estimada a partir de considerações teóricas baseadas, por exemplo, na solubilidade e no equilíbrio químico dos gases, em combinação com a simulação dos processos específicos da vegetação (acumulação, absorção, transferência através dos estômatos), do solo, etc. (ERISMAN et al., 1994) ou a partir de medições experimentais.

Uma grande parte da incerteza do método das três resistências pode ser atribuída à parametrização de R_c, uma vez que esta é mais difícil de descrever matematicamente, face ao número e à natureza complexa dos mecanismos que integra (FELICIANO, 2001). ZHANG; BROOK; VET (2003a) propuseram uma parametrização revisada de R_c, incluindo parametrizações da resistência não-estomática (R_{ns}) (associada à deposição de um poluente em todas as partes da superfície, exceto os estômatos) com base em resultados de estudos ao longo de cinco diferentes tipos de vegetação na América do Norte (ZHANG; BROOK; VET, 2002, 2003b):

$$\frac{1}{R_c} = \frac{1-\omega_{st}}{R_{st}+R_m} + \frac{1}{R_{ns}}, \tag{5.6}$$

$$\frac{1}{R_{ns}} = \frac{1}{R_{cut}} + \frac{1}{R_{ac}+R_g}, \tag{5.7}$$

onde as sub-resistências R_{st}, R_m, R_{cut} representam as diferentes vias de remoção do

coberto vegetal (estômatos, mesófilo e cutícula, respectivamente), R_{ac} caracteriza a resistência aerodinâmica em dossel (coberto vegetal) e R_g caracteriza a remoção do poluente no solo. ω_{st} é a fração de estômatos fechados em condições úmidas [1].

Dados experimentais sobre a velocidade de deposição seca de gases em diferentes tipos de superfícies naturais foram tabelados e analisados por MCMAHON; DENISON (1979); SEHMEL (1980, 1984). As estimativas da taxa de deposição variam ao longo de várias ordens de grandeza (SEHMEL, 1980) para superfícies distintas. A gama de valores de V_d para cada um dos gases abrange uma ordem de magnitude, pelo menos, iguais para superfícies de mesmo tipo.

Descrição das diferentes técnicas que foram desenvolvidas ou adaptadas para estimar os fluxos de deposição seca de partículas podem ser encontradas em (MCMAHON; DENISON (1979); SEHMEL (1980, 1984); BUSINGER (1986); NICHOLSON (1988); GALLAGHER et al. (1997); WESELY; HICKS (2000); GARLAND (2001)).

Vários artigos recentes têm revisado o estado da arte na evolução da deposição seca (ERISMAN et al. (1994); LOVETT (1994); FOKEN; DLUGI; KRAMM (1995); RUIJGROK; TIEBEN; EISINGA (1997)).

A deposição seca de um poluente é importante por reduzir a sua concentração no ar e, se tratando de uma substância nociva à saúde humana, o fato da substância depositar é benéfico para quem recebe o contaminante em locais afastados da fonte poluidora. Por outro lado, a deposição seca é um mecanismo de acumulação de material no solo, prejudicando as superfícies de contato com o poluente e agravando os níveis de exposição em locais próximos a fonte.

Poluentes atmosféricos tendem se depositar sobre o solo, devido ao transporte turbulento de material para baixo e sua absorção parcial na superfície, incluindo solo, água e vegetação, dessa forma é conveniente modificar os modelos de difusão atmosférica para que estes considerem a perda de poluentes por deposição seca.

Para os modelos que estimam a concentração de poluentes transportada pelo ar, resolvendo a equação de advecção-difusão usando a teoria K, a velocidade de deposição do poluente é inserida como uma condição de contorno no solo, devido ao fato de que a deposição é naturalmente expressa como fluxo na fronteira inferior da atmosfera. Para modelos de pluma gaussiana, é difícil de incorporar a deposição de uma forma fisicamente realista uma vez que não tratam explicitamente o processo de transporte vertical. Esses modelos gaussianos deduzem a forma e a dimensão da distribuição de concentração de poluentes a partir da média e da estrutura turbulenta da atmosfera, e para considerar a deposição eles devem modificar um pouco o modelo de difusão.

DORAN; HORST (1985) ressaltam a incerteza na medição da velocidade de deposição, uma vez que V_d pode variar com o tamanho da partícula, ela também varia

[1] Considera-se que a parte superior da vegetação está molhada pela chuva ou pelo orvalho.

com a distância da fonte a favor do vento. Fazer uma previsão exata da velocidade de deposição é improvável uma vez que há incertezas quanto as estimativas encontradas na literatura de V_d como uma função do tamanho das partículas, a turbulência atmosférica, e características de superfície (SEHMEL, 1980) e a incerteza sobre a distribuição do tamanho da partícula do poluente liberado.

No experimento de Hanford, determinar a quantidade de poluente depositado na superfície teria sido extremamente difícil devido a artemísia (tipo de vegetação) na grade de difusão (DORAN; HORST, 1985). A variação da velocidade de deposição com a distância a partir da fonte de emissão do poluente exigiria medições da deposição em várias distâncias que estivessem na mesma direção e sentido que o vento, e foi medido em apenas 5 traçadores, o que é muito pouco para estimar V_d.

6 MODELO MATEMÁTICO

A concentração de poluentes na atmosfera é determinada pelo transporte advectivo, dispersão difusiva, deposição no solo e por transformações químicas. Os modelos matemáticos são capazes de descrever os processos que regem o transporte advectivo e a difusão de poluentes.

O modelo matemático assume a abordagem Euleriana, na qual, considera o movimento do fluido dentro de um sistema de referência espacial fixo e a difusão é considerada proporcional ao gradiente local da concentração do material difundido, ou seja, teoria K.

O modelo K baseia-se na resolução da equação de conservação da massa das espécies químicas poluentes, expressa em termos da concentração $c(x, y, z, t)$. O transporte advectivo e a dispersão difusiva de poluentes atmosféricos, geralmente, são representados pela equação de advecção-difusão que descreve concentrações a partir de uma fonte contínua. Essa equação pode ser obtida pela aplicação da equação de conservação de massa. Considerando uma espécie genérica c que se conserve na atmosfera:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} + v\frac{\partial c}{\partial y} + w\frac{\partial c}{\partial z} = \upsilon_c\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right) + S, \tag{6.1}$$

onde u, v e w representam as componentes da velocidade do vento nas direções x, y e z, respectivamente, υ_c é o coeficiente de difusão molecular e S é o termo fonte. Em escoamentos turbulentos a difusividade turbulenta é muito maior que o transporte laminar, assim a difusão molecular pode ser desprezada (ZANNETTI, 1990).

Considerando fluxos turbulentos, presentes na camada limite planetária, as variáveis de velocidade, concentração, temperatura, entre outras, variam no tempo e no espaço. Essas variáveis são irregulares e tendem a oscilar em torno de seus valores médios de forma randômica. Reynolds propôs um modelo conceitual onde decompõem essas variáveis como a soma de seus valores médios (denotada pela barra superior) e partes flutuantes em torno do valor médio (denotada pela linha) com o intuito de definir equações para a evolução das variáveis médias:

$$u = \overline{u} + u',\ v = \overline{v} + v',\ w = \overline{w} + w',\ c = \overline{c} + c'. \tag{6.2}$$

Consideram-se as regras do método de Reynolds (STULL, 1988), onde u e v são variáveis de velocidade dependentes do tempo e de s, onde s é uma variável independente, tal como x, y ou z e k é uma constante:

1. $\overline{u'} = 0$
2. $\overline{\overline{u}} = \overline{u}$
3. $\overline{u + v} = \overline{u} + \overline{v}$
4. $\overline{\overline{u}.v} = \overline{u}.\overline{v}$
5. $\overline{\dfrac{\partial u}{\partial s}} = \dfrac{\partial \overline{u}}{\partial s}$
6. $\overline{k} = k$
7. $\overline{u.v} \neq \overline{u}.\overline{v}$

As componentes médias são definidas através de médias temporais da forma:

$$\overline{u} = \frac{1}{t}\int_0^t u\,\mathrm{d}t,\ \overline{v} = \frac{1}{t}\int_0^t v\,\mathrm{d}t,\ \overline{w} = \frac{1}{t}\int_0^t w\,\mathrm{d}t,\ \overline{c} = \frac{1}{t}\int_0^t c\,\mathrm{d}t. \tag{6.3}$$

O valor de t deve ser suficientemente grande quando comparado com o tempo característico das flutuações turbulentas, mas deve ser pequeno quando comparado com as escalas temporais típicas das variações do escoamento médio, caso este não seja permanente (TENNEKES, 1972).

Com a definição de média, dada pela equação (6.3), todas as regras do método de Reynolds são satisfeitas. Introduzindo a equação (6.2) na equação (6.1) e aplicando as regras do método de Reynolds, acima descritas, a equação de advecção-difusão é reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u}\frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + \overline{v}\frac{\partial \overline{c}}{\partial y} + \overline{w}\frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = -\frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} - \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S, \tag{6.4}$$

onde $\overline{c}$ é a concentração média de poluentes, $\overline{u}$, $\overline{v}$ e $\overline{w}$ são as componentes do vento médio na direção x, y e z, respectivamente, e $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam os fluxos turbulentos de poluentes nas direções longitudinal, lateral e vertical, respectivamente.

A equação (6.4) apresenta quatro variáveis desconhecidas, a concentração $\overline{c}$ e os fluxos turbulentos, dessa forma, não pode ser resolvida. Uma forma de solucionar o problema de fechamento da turbulência da equação (6.4) é baseada na teoria de transporte por gradiente, proveniente de hipóteses entre fluxos de massa turbulentos

e gradientes médios espaciais de concentração. A teoria K estabelece que os fluxos são proporcionais aos gradientes médios de difusão:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \overline{c}}{\partial x}, \tag{6.5}$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \overline{c}}{\partial y}, \tag{6.6}$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z}, \tag{6.7}$$

onde K_x, K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta nas direções x, y e z respectivamente.

Assim, introduzindo as equações (6.5), (6.6) e (6.7) na equação (6.4) de conservação de massa obtém-se a equação de advecção-difusão:

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u}\frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + \overline{v}\frac{\partial \overline{c}}{\partial y} + \overline{w}\frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x \frac{\partial \overline{c}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial \overline{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z}\right) + S. \tag{6.8}$$

onde $\overline{c} = \overline{c}(x, y, z, t)$ representa a concentração média de poluentes.

Na equação (6.8), o primeiro termo representa a variação temporal de $\overline{c}$, os demais termos antes da igualdade representam o transporte, ou advecção, de $\overline{c}$ em cada uma das direções pelas componentes do vento, S é o termo fonte e os demais termos depois da igualdade representam a difusão de poluentes.

6.1 Modelo Bidimensional - Solução via ADMM

Considera-se que um poluente começa a ser liberado continuamente por uma fonte elevada sem qualquer empuxo vertical na atmosfera. Considera-se um regime estacionário, ou seja, $\overline{c} = \overline{c}(x, y, z)$. A concentração de poluentes é integrada em todo o domínio de y, assim obtém-se a concentração média integrada lateralmente dependente apenas de x e z, dessa forma tem-se um modelo bidimensional. O eixo x é posicionado na direção do vento, assim, $\overline{w} = 0$. Sabendo que o termo de advecção em x é muito maior que a difusão em x, o termo difusivo em x pode ser desprezado, ou seja, $K_x = 0$. Aplicando essas considerações na equação (6.8) obtém-se a seguinte equação:

$$\overline{u}\frac{\partial \overline{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z}\right) + S. \tag{6.9}$$

O termo fonte de poluentes é considerado como condição de entrada e não como um termo da equação, assim a equação (6.9) pode ser reescrita e considerada como a equação de advecção-difusão bidimensional estacionária da seguinte forma:

$$\overline{u}\frac{\partial \overline{c}^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \overline{c}^y}{\partial z}\right), \tag{6.10}$$

para $0 < z < h$ e $x > 0$, onde $\overline{c}^y$ é a concentração média de poluente integrada lateralmente, $\overline{u}$ é a velocidade média do vento na direção horizontal e K_z é o coeficiente de difusão vertical. A equação (6.10) está sujeita às condições de contorno de fluxo nulo, na direção z, no topo da CLP e à velocidade de deposição seca no solo:

$$K_z \frac{\partial \overline{c}^y}{\partial z} = V_d.\overline{c}^y \quad \text{em} \quad z = 0, \tag{6.10a}$$

$$K_z \frac{\partial \overline{c}^y}{\partial z} = 0 \qquad \text{em} \quad z = h, \tag{6.10b}$$

e à condição de fonte contínua:

$$\overline{u}\,\overline{c}^y(0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0, \tag{6.10c}$$

onde h é a altura da CLP, V_d é a velocidade de deposição seca do poluente, Q é a taxa de emissão da fonte, H_s é a altura da fonte e δ é a função Delta de Dirac.

Uma das formas de resolver a equação de advecção-difusão é considerar os coeficientes difusivos e a velocidade do vento constantes, tendo assim uma solução da equação para uma turbulência homogênea. Outra maneira é considerar uma turbulência não homogênea, ou seja, a velocidade do vento e as difusidades turbulentas variam com a altura z da CLP.

A fim de resolver a equação de advecção-difusão para uma turbulência não-homogênea, os parâmetros que dependem da altura da CLP devem ser variáveis, tais como, o perfil da velocidade média do vento ($\overline{u}$) e o coeficiente difusivo (K_z). Uma forma de resolver a equação para tal situação é através do ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Model*) (MOREIRA et al., 2006) que propõe dividir a altura h da CLP em N subcamadas considerando-a como um sistema multicamadas, ou seja, o domínio da variável z é dividido em vários subdomínios, como pode ser visto na figura 2, onde n^* é a camada na qual ocorre a emissão do poluente.

Assim, em cada subcamada são tomados valores médios para o coeficiente de difusão K_z e o perfil da velocidade do vento $\overline{u}$, que são parâmetros que dependem da altura z, ou seja, é realizada uma aproximação constante por partes desses coeficientes:

$$K_{z_n} = \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} K_z(z)\,\mathrm{d}z, \tag{6.11}$$

$$\overline{u}_n = \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} \overline{u}(z)\,\mathrm{d}z, \tag{6.12}$$

para $n = 1, \ldots, N$.

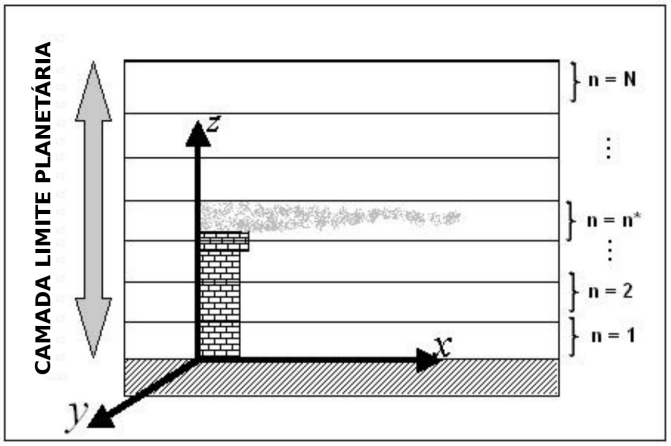


Figura 2: Desenho esquemático do modelo ADMM. Adaptado de COSTA, 2007.

Desta forma, o problema com coeficiente de difusão e perfil da velocidade do vento variáveis é substituído por um conjunto de problemas com coeficientes difusivos médios constantes e perfil do vento médio constante, acoplados por condições de continuidade de concentração e de fluxo de contaminantes nas interfaces. Assim, tem-se para $\overline{u}$ e K_z valores constantes em cada subcamada mas que variam ao longo de todo o domínio z.

Aplicando o ADMM no problema bidimensional (6.10), onde considera-se a CLP como um sistema de multicamadas, as equações (6.10), (6.10a), (6.10b) e (6.10c) podem ser reescritas como:

$$\overline{u}_n \frac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial x} = K_{z_n} \frac{\partial^2 \overline{c}_n^y}{\partial z^2}, \tag{6.13}$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial z} = V_d . \overline{c}_n^y \quad \text{em} \quad z = 0, \tag{6.13a}$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = h, \tag{6.13b}$$

$$\overline{u}_n \overline{c}_n^y(0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0, \tag{6.13c}$$

com $n = 1, 2, \ldots, N$ onde N denota o número de subcamadas e $\overline{c}_n^y$ denota a concentração média no enésimo subintervalo.

Supõe-se contato perfeito entre as subcamadas e considera-se as seguintes condições de continuidade para a concentração, equação (6.14a), e fluxo de concentração, equação (6.14b), nas interfaces:

$$\overline{c}_n^y = \overline{c}_{n+1}^y \qquad \text{para} \quad z = z_n \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{6.14a}$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \frac{\partial \overline{c}_{n+1}^y}{\partial z} \quad \text{para} \quad z = z_n \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1\,. \tag{6.14b}$$

Resultando assim em N problemas do mesmo tipo, onde N é o número de subcamadas. Reescrevendo a equação (6.13) com as condições de contorno, condição de fonte e considerando as condições de interfaces, tem-se:

$$\begin{cases} \overline{u}_n \dfrac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial x} = K_{z_n} \dfrac{\partial^2 \overline{c}_n^y}{\partial z^2}, \\[2ex] K_{z_n} \dfrac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial z} = V_d \overline{c}_n^y \quad \text{em} \quad z = 0, \\[2ex] K_{z_n} \dfrac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = h, \\[2ex] \overline{u}_n \overline{c}_n^y(0, z) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0, \\[2ex] \overline{c}_n^y = \overline{c}_{n+1}^y \quad \text{em} \quad z = z_n \quad \text{para} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \\[2ex] K_{z_n} \dfrac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \dfrac{\partial \overline{c}_{n+1}^y}{\partial z} \quad \text{em} \quad z = z_n \quad \text{para} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \end{cases} \tag{6.15}$$

com $z_{n-1} \leq z \leq z_n$ para $n = 1, \ldots, N$.

Cada problema da equação (6.15) é resolvido aplicando-se a Transformada de Laplace em x, denotando $\mathscr{L}\{\overline{c}_n^y(x, z)\} = \overline{\overline{c}_n^y}(s, z)$, conforme os cálculos abaixo:

$$\mathscr{L}\left\{ \overline{u}_n \frac{\partial \overline{c}_n^y(x, z)}{\partial x} = K_{z_n} \frac{\partial^2 \overline{c}_n^y(x, z)}{\partial z^2} \right\} \tag{6.16}$$

$$\mathscr{L}\left\{ \overline{u}_n \frac{\partial \overline{c}_n^y(x, z)}{\partial x} \right\} = \mathscr{L}\left\{ K_{z_n} \frac{\partial^2 \overline{c}_n^y(x, z)}{\partial z^2} \right\} \tag{6.17}$$

$$\overline{u}_n \mathscr{L}\left\{ \frac{\partial \overline{c}_n^y(x, z)}{\partial x} \right\} = K_{z_n} \mathscr{L}\left\{ \frac{\partial^2 \overline{c}_n^y(x, z)}{\partial z^2} \right\} \tag{6.18}$$

$$\overline{u}_n \left[s\overline{\overline{c}_n^y}(s, z) - \overline{c}_n^y(0, z) \right] = K_{z_n} \frac{\mathrm{d}^2 \overline{\overline{c}_n^y}(s, z)}{\mathrm{d}z^2} \tag{6.19}$$

$$\overline{u}_n s\overline{\overline{c}_n^y}(s, z) - \overline{u}_n \overline{c}_n^y(0, z) = K_{z_n} \frac{\mathrm{d}^2 \overline{\overline{c}_n^y}(s, z)}{\mathrm{d}z^2}. \tag{6.20}$$

Aplicando-se a condição de fonte:

$$\overline{u}_n s\overline{\overline{c}_n^y}(s,z) - \overline{u}_n \frac{Q\delta(z-H_s)}{\overline{u}_n} = K_{z_n}\frac{\mathrm{d}^2\overline{\overline{c}_n^y}(s,z)}{\mathrm{d}z^2}. \tag{6.21}$$

Dividindo ambos os lados da equação (6.21) por $-K_{z_n}$, obtém-se:

$$-\frac{\overline{u}_n s\overline{\overline{c}_n^y}(s,z)}{K_{z_n}} + \frac{Q\delta(z-H_s)}{K_{z_n}} = -\frac{\mathrm{d}^2\overline{\overline{c}_n^y}(s,z)}{\mathrm{d}z^2} \tag{6.22}$$

que é uma equação diferencial linear não homogênea com coeficientes constantes. Reescrevendo a equação (6.22):

$$\overline{\overline{c}_n^y}'' - \frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}\overline{\overline{c}_n^y} = -\frac{Q}{K_{z_n}}\delta(z-H_s). \tag{6.23}$$

A solução geral da equação (6.23) é dada por: $\overline{\overline{c}_n^y} = \overline{\overline{c}_{n_h}^y} + \overline{\overline{c}_{n_p}^y}$, onde $\overline{\overline{c}_{n_h}^y}$ é a solução geral da equação homogênea associada e $\overline{\overline{c}_{n_p}^y}$ é uma solução particular de (6.23). A equação homogênea associada à equação (6.23) é dada por:

$$\overline{\overline{c}_n^y}''(s,z) - \frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}\overline{\overline{c}_n^y}(s,z) = 0. \tag{6.24}$$

Resolvendo a equação (6.24):

$$\gamma^2 - \frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}} = 0 \tag{6.25}$$

$$\gamma = \pm\sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}. \tag{6.26}$$

Portanto, para γ_1 e γ_2 distintos tem-se que a solução da equação homogênea é dada por:

$$\overline{\overline{c}_{n_h}^y} = A_n e^{\sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}z} + B_n e^{-\sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}z}. \tag{6.27}$$

onde A_n e B_n são constantes arbitrárias.

Denotando:

$$R_n = \sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}.$$

Reescrevendo a solução da seguinte forma:

$$\overline{\overline{c}_{n_h}^y} = A_n e^{R_n z} + B_n e^{-R_n z}. \tag{6.28}$$

A solução particular $\overline{\overline{c}_{n_p}^y}$ da equação (6.23) é obtida através da resolução da integral a seguir, conforme KREIDER et al. (1972):

$$\overline{\overline{c}^{y}_{n_p}} = \int_0^h G(z,\xi) f(\xi)\,\mathrm{d}\xi, \tag{6.29}$$

onde $z, \xi \in [0, h]$, sendo h a altura da CLP, $f(\xi)$ é uma função impulso, neste caso dada por: $f(\xi) = -\dfrac{Q}{K_{z_n}}\delta(\xi - H_s)$, e $G(z,\xi)$ é a função de *Green* definida por:

$$G(z,\xi) = \frac{y_2(z)y_1(\xi) - y_1(z)y_2(\xi)}{W\left[y_1(\xi), y_2(\xi)\right]}, \tag{6.30}$$

onde $y_1(z)$ e $y_2(z)$ são duas soluções linearmente independentes da equação homogênea associada e $W\left[y_1(\xi), y_2(\xi)\right]$ é o *Wronskiano* das duas soluções, dado por:

$$W\left[y_1(\xi), y_2(\xi)\right] = \begin{vmatrix} y_1(\xi) & y_2(\xi) \\ y_1'(\xi) & y_2'(\xi) \end{vmatrix}. \tag{6.31}$$

Como $y_1 = e^{R_n z}$ e $y_2 = e^{-R_n z}$, obtém-se que:

$$W\left[y_1(\xi), y_2(\xi)\right] = -2R_n. \tag{6.32}$$

Logo, a função de *Green* é da forma:

$$G(z,\xi) = \frac{e^{-R_n z}e^{R_n \xi} - e^{R_n z}e^{-R_n \xi}}{-2R_n}. \tag{6.33}$$

Assim, substituindo (6.33) em (6.29):

$$\overline{\overline{c}^{y}_{n_p}} = \int_0^h \frac{e^{-R_n z}e^{R_n \xi} - e^{R_n z}e^{-R_n \xi}}{-2R_n}\left[-\frac{Q}{K_{z_n}}\delta(\xi - H_s)\right]\mathrm{d}\xi \tag{6.34}$$

$$= \frac{Q}{2R_n K_{z_n}}\left[e^{-R_n z}\int_0^h e^{R_n \xi}\delta(\xi - H_s)\,\mathrm{d}\xi - e^{R_n z}\int_0^h e^{-R_n \xi}\delta(\xi - H_s)\,\mathrm{d}\xi\right], \tag{6.35}$$

sabendo que $\displaystyle\int_0^h \delta(\xi - a)F(\xi)\,\mathrm{d}\xi = F(a)H(\xi - a)$, onde $H(\xi - a)$ é a função de Heaviside, obtém-se:

$$\overline{\overline{c}^{y}_{n_p}} = \frac{Q}{2R_n K_{z_n}}\left[e^{-R_n z}e^{R_n H_s}H(z - H_s) - e^{R_n z}e^{-R_n H_s}H(z - H_s)\right]. \tag{6.36}$$

Portanto, a solução particular é da forma:

$$\overline{\overline{c}^{y}_{n_p}} = \frac{Q}{2R_n K_{z_n}}\left[e^{-R_n(z - H_s)} - e^{R_n(z - H_s)}\right]H(z - H_s). \tag{6.37}$$

Assim, tem-se que a solução geral da equação (6.23), que é dada por $\overline{\overline{c}^{y}_{n}} = \overline{\overline{c}^{y}_{n_h}} + \overline{\overline{c}^{y}_{n_p}}$, é expressa da seguinte forma:

$$\overline{\overline{c}_n^y}(s,z) = A_n e^{R_n z} + B_n e^{-R_n z} + \frac{Q}{2R_n K_{z_n}}\left[e^{-R_n(z-H_s)} - e^{R_n(z-H_s)}\right]H(z-H_s), \qquad (6.38)$$

onde o último termo do lado direito da equação somente é válido na subcamada onde contém a fonte de emissão.

Para poder determinar as constantes A_n e B_n, aplica-se as condições de contorno e as condições de continuidade de interface:

$$\begin{array}{lll}
\text{em} \quad z=0: & & K_{z_1}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_1^y}(s,0)}{\partial z} = V_d\overline{\overline{c}_1^y}(s,0) \\
\text{em} \quad z=z_1: & & \left\{\begin{array}{l} \overline{\overline{c}_1^y}(s,z_1) = \overline{\overline{c}_2^y}(s,z_1) \\ K_{z_1}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_1^y}(s,z_1)}{\partial z} = K_{z_2}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_2^y}(s,z_1)}{\partial z} \end{array}\right. \\
\text{em} \quad z=z_2: & & \left\{\begin{array}{l} \overline{\overline{c}}_2(s,z_2) = \overline{\overline{c}}_3(s,z_2) \\ K_{z_2}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_2^y}(s,z_2)}{\partial z} = K_{z_3}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_3^y}(s,z_2)}{\partial z} \end{array}\right. \\
\quad\vdots & & \quad\vdots \\
\text{em} \quad z=z_{N-1}: & & \left\{\begin{array}{l} \overline{\overline{c}_{N-1}^y}(s,z_{N-1}) = \overline{\overline{c}_N^y}(s,z_{N-1}) \\ K_{z_{N-1}}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_{N-1}^y}(s,z_{N-1})}{\partial z} = K_{z_N}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_N^y}(s,z_{N-1})}{\partial z} \end{array}\right. \\
\text{em} \quad z=h: & & K_{z_N}\dfrac{\partial\overline{\overline{c}_N^y}(s,h)}{\partial z} = 0
\end{array} \qquad (6.39)$$

Com as expressões obtidas em (6.39) chega-se a um sistema linear de dimensão $d = 2N$ dado por $Mv = b$:

$$M = \begin{bmatrix}
M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & M_{46} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
0 & 0 & M_{53} & M_{54} & M_{55} & M_{56} & 0 & 0 & \dots & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & M_{65} & M_{66} & M_{67} & M_{68} & \dots & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & M_{75} & M_{76} & M_{77} & M_{78} & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d-1,d-3} & M_{d-1,d-2} & M_{d-1,d-1} & M_{d-1,d} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d,d-1} & M_{d,d}
\end{bmatrix} \qquad (6.40)$$

$$v = [\, A_1 \quad B_1 \quad A_2 \quad B_2 \quad A_3 \quad B_3 \quad \cdots \quad \cdots \quad A_N \quad B_N \,]^T \qquad (6.41)$$

e

$$b = [\,0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad \cdots \quad -Sp_{n^*} \quad -Sp'_{n^*} \quad \cdots \quad 0 \quad 0\,]^T \tag{6.42}$$

onde n^* indica a região de emissão do poluente, Sp_{n^*} é a solução particular da equação (6.37):

$$Sp_{n^*} = \frac{Q}{2R_{n^*}K_{z_{n^*}}}\left[e^{-R_{n^*}(z-H_s)} - e^{R_{n^*}(z-H_s)}\right], \tag{6.43}$$

e Sp'_{n^*} é a derivada da solução particular da equação (6.37):

$$Sp'_{n^*} = -\frac{Q}{2K_{z_{n^*}}}\left[e^{-R_{n^*}(z-H_s)} + e^{R_{n^*}(z-H_s)}\right], \tag{6.44}$$

as equações (6.43) e (6.44) são aplicadas somente na região de emissão.

A matriz M, é definida como segue:

$$\begin{aligned} M_{11} &= K_{z_1}R_1 - V_d \\ M_{12} &= -K_{z_1}R_1 - V_d \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} M_{2n,2n-1} &= e^{[R_n]z_n} \\ M_{2n,2n} &= e^{[-R_n]z_n} \\ M_{2n,2n+1} &= -e^{[R_{n+1}]z_n} \\ M_{2n,2n+2} &= -e^{[-R_{n+1}]z_n} \\ M_{2n+1,2n-1} &= K_{z_n}R_n e^{[R_n]z_n} \\ M_{2n+1,2n} &= -K_{z_n}R_n e^{[-R_n]z_n} \\ M_{2n+1,2n+1} &= -Kz_{(n+1)}R_{(n+1)}e^{[R_{n+1}]z_n} \\ M_{2n+1,2n+2} &= K_{z_{(n+1)}}R_{(n+1)}e^{[-R_{n+1}]z_n} \end{aligned}$$

e, por fim:

$$\begin{aligned} M_{2N,2N-1} &= R_N e^{[R_N]z_N} \\ M_{2N,2N} &= -R_N e^{[-R_N]z_N} \end{aligned}$$

O sistema $Mv = b$ é resolvido utilizando o método de *Eliminação de Gauss*.

Para obter a solução final da equação, aplica-se a Transformada Inversa de Laplace na equação transformada (6.38), obtendo:

$$\overline{c}_n^y(x,z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{sx}\left[A_n e^{\sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}z} + B_n e^{-\sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}z} + \right.$$
$$\left. + \frac{Q}{2\sqrt{\overline{u}_n K_{z_n} s}}\left(e^{-\sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{\overline{u}_n s}{K_{z_n}}}(z-H_s)}\right) H(z-H_s)\right] \mathrm{d}s\,. \quad (6.45)$$

Devido à complexidade da integral de linha, dada pela equação (6.45), optou-se em resolvê-la numericamente pelo método de *Fixed-Talbot* (FT) [1] proposto por ABATE; VALKÓ (2004). A escolha do algoritmo justifica-se pelo fato de ser um método robusto de inversão, pois de acordo com os autores fornece resultados com precisão de até M^* dígitos significativos, cujo erro relativo estimado é: $\left|\frac{\overline{c}_n^y(x,z)-\overline{c}_n^y(x,z,M^*)}{\overline{c}_n^y(x,z)}\right| \approx 10^{-0.6M^8}$ (ABATE; VALKÓ, 2004).

Além disso, RUI; COSTA (2015) analisaram o desempenho de três métodos de inversão para a transformada de Laplace na solução da equação de advecção-difusão: Quadratura Gaussiana (STROUD; SECREST, 1966), Algoritmo de *Fixed-Talbot* (ABATE; VALKÓ, 2004) e um método baseado na série de Fourier (CRUMP, 1976). Nesta análise, os autores concluíram que o Algoritmo de *Fixed-Talbot* é mais vantajoso computacionalmente, pois foi observado que quando o método da quadratura de Gauss é utilizado, há ocorrência de overflow e underflow e não é possível visualizar a estabilidade numérica. Quando o método utilizado é o baseado na série de Fourier é necessário usar muitos termos do somatório para obter a estabilidade da solução (em torno de 1000 termos), o que aumenta o tempo computacional. O Algoritmo de *Fixed-Talbot* não apresenta essas desvantagens, não há ocorrência de overflow e underflow e a estabilidade numérica já é observada com apenas 70 termos, conforme pode ser visto na figura 3.

Assim, obtém-se a concentração final de poluentes dada na forma:

$$\overline{c}_n^y(x,z) = \frac{r}{M^*}\left[\frac{1}{2}\overline{\overline{c}_n^y}(r,z)e^{rx} + \sum_{k=1}^{M^*-1} Re\left[e^{xS(\theta_k)}\overline{\overline{c}_n^y}(S(\theta_k),z)(1+i\overline{\omega}(\theta_k))\right]\right], \quad (6.46)$$

onde $S(\theta_k) = r\theta_k(\cot\theta_k + i)$, $\overline{\omega}(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k\cot\theta_k - 1)\cot\theta_k$, $\theta_k = k\pi/M^*$, $-\pi < \theta_k < +\pi$, r é um parâmetro baseado em experimentos numéricos e $i = \sqrt{-1}$. Considera-se $M^* = 100$ e $r = \dfrac{2M^*}{101x}$.

[1] O método *Fixed-Talbot* (FT) é baseado na deformação do contorno da integral inversa de Bromwich abordada por Talbot (TALBOT, 1979) e o termo "fixed" refere-se ao fato de que no algoritmo FT o caminho é fixado porque o parâmetro r tem um valor constante.

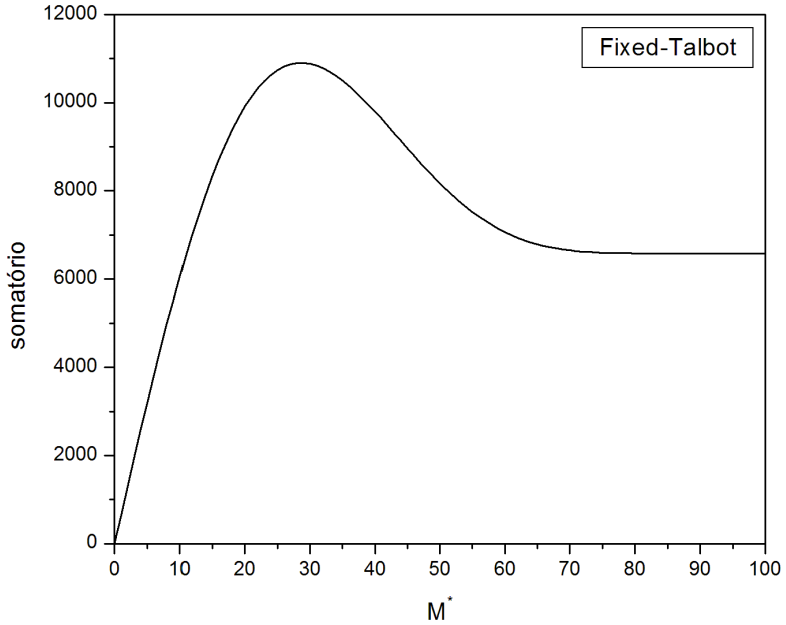


Figura 3: Estabilidade numérica da solução da equação de advecção-difusão utilizando o Algoritmo de Fixed-Talbot.

6.2 Modelo Tridimensional - Solução via GIADMT

Considerando na equação (6.8) de advecção-difusão um regime estacionário, ou seja, $\overline{c} = \overline{c}(x, y, z)$. O eixo x é posicionado na direção do vento, assim a componente lateral do vento pode ser desprezada, ou seja, $\overline{v} = 0$ e a componente vertical também será desprezada, isto é, $\overline{w} = 0$. Sabendo que o termo de advecção em x é muito maior que a difusão em x, o termo difusivo em x pode ser desprezado, ou seja, $K_x = 0$. Aplicando essas considerações na equação (6.8) obtém-se a seguinte equação:

$$\overline{u}\frac{\partial \overline{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial \overline{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z}\right), \tag{6.47}$$

sujeita às seguintes condições de contorno em z; fluxo nulo em $z = h$ e velocidade de deposição seca no solo:

$$K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = V_d.\overline{c} \quad \text{em} \quad z = 0, \tag{6.47a}$$

$$K_z \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = 0 \qquad \text{em} \quad z = h, \tag{6.47b}$$

para as condições de contorno em y tem-se concentração máxima em $y = 0$ e concentração homogênea (sem variação) em $y = L_y$:

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial y} = 0 \qquad \text{em} \quad y = 0 \,\text{e}\, L_y, \tag{6.47c}$$

e condição de fonte contínua:

$$\overline{u}\,\overline{c}(0,y,z) = Q\delta(z-H_s)\delta(y-y_0) \quad \text{em} \quad x=0, \tag{6.47d}$$

para $0 < z < h$, $0 < y < L_y$ e $x > 0$, onde $\overline{c}$ é a concentração média do poluente, L_y é a distância da fonte em y suficientemente grande onde a concentração é homogênea e y_0 é a posição da fonte em y.

A solução do problema tridimensional (6.47) é obtida com a aplicação do GIADMT (COSTA et al., 2006), que consiste na solução do problema transformado da GITT (COTTA, 1993) pela abordagem ADMM (MOREIRA et al., 2006).

A GITT é uma técnica de transformação integral que combina uma expansão em série com uma integração. Por este método, resolve-se um problema auxiliar de Sturm-Liouville e expande-se a concentração de poluentes numa série em termos de autofunções, substitui-se esta expansão na equação de advecção-difusão e utiliza-se a propriedade de ortogonalidade das autofunções, resultando em um sistema infinito de equações diferenciais que são resolvidas numericamente.

Seguindo o formalismo da GITT, postula-se que a concentração média $\overline{c}(x,y,z)$, no contexto da GITT chamada de potencial, pode ser expressa como uma expansão em série de autofunções ortogonais $\psi_j(y)$ para a direção y onde j é a ordem dos correspondentes autovalores λ_j, ou seja,

$$\overline{c}(x,y,z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\overline{\overline{c}}_j(x,z)\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}}, \tag{6.48}$$

onde

$$N_j = \int_y \psi_j^2(y)\,\mathrm{d}y\,. \tag{6.49}$$

Os autovalores e as correspondentes autofunções são determinados resolvendo um problema auxiliar, para a variável espacial analisada, similar ao problema original. Dessa forma, é preciso uma transformação no problema (6.47) para eliminar y, ou seja, um problema adicional. O seguinte problema de Sturm-Liouville é então determinado:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_j(y)}{\mathrm{d}y^2} + \lambda_j^2\psi_j(y) = 0, \tag{6.50}$$

com as condições de contorno:

$$\psi_j^{'}(y) = 0 \text{ em } y = 0,\ L_y. \tag{6.51}$$

A solução do problema auxiliar (6.50) é da forma (ÖZISIK, 1974):

$$\psi_j(y) = \cos(\lambda_j y), \tag{6.52}$$

onde λ_j são as raízes não negativas de $\operatorname{sen}(\lambda_j L_y) = 0$. Assim:

$$\lambda_0 = 0 \text{ e } \lambda_j = \frac{j\pi}{L_y} \text{ e } N_j = \begin{cases} \dfrac{L_y}{2} & \text{para } \lambda_j \neq 0 \\ L_y & \text{para } \lambda_0 = 0 \end{cases} \tag{6.53}$$

$\psi_j(y)$ são as autofunções e λ_j são os autovalores associados ao problema de Sturm-Liouville.

As autofunções da equação (6.48) são agora conhecidas. É preciso determinar a concentração $\overline{c}(x, y, z)$ ainda desconhecida. Para isso, substitui-se a equação (6.48) na equação (6.47), obtendo-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \overline{u} \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial x} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} = \sum_{j=0}^{\infty} K_y \overline{\overline{c}}_j(x,z) \frac{\partial^2 \psi_j(y)}{\partial y^2} \frac{1}{\sqrt{N_j}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial z^2} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \,. \tag{6.54}$$

Da equação (6.50), tem-se que $\psi_j''(y) = -\lambda_j^2 \psi_j(y)$, substituindo na equação (6.54) obtém-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \overline{u} \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial x} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} = -\sum_{j=0}^{\infty} K_y \lambda_j^2 \overline{\overline{c}}_j(x,z) \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} + \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial z^2} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} \,. \tag{6.55}$$

Aplicando o operador $\displaystyle\int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{\sqrt{N_i}} \, \mathrm{d}y$ na equação (6.55), para fazer uso da propriedade da ortogonalidade das autofunções, chega-se:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \overline{u} \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)\psi_i(y)}{\sqrt{N_j}\sqrt{N_i}} \, \mathrm{d}y = &-\sum_{j=0}^{\infty} K_y \lambda_j^2 \overline{\overline{c}}_j(x,z) \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)\psi_i(y)}{\sqrt{N_j}\sqrt{N_i}} \, \mathrm{d}y + \\ &+ \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial z^2} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)\psi_i(y)}{\sqrt{N_j}\sqrt{N_i}} \, \mathrm{d}y. \end{aligned} \tag{6.56}$$

Observe que, como as autofunções são ortogonais, as integrais na equação (6.56) se anulam para $j \neq i$ e valem 1 se $i = j$. Desenvolvendo os somatórios da equação (6.56), matricialmente, para o truncamento da série em N_a termos, tem-se:

$$-\overline{u}\begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{\partial \overline{\overline{c}}_0}{\partial x} \\ \frac{\partial \overline{\overline{c}}_1}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial \overline{\overline{c}}_{(N_a-1)}}{\partial x} \end{bmatrix} - K_y \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \lambda_0^2 \overline{\overline{c}}_0 \\ \lambda_1^2 \overline{\overline{c}}_1 \\ \vdots \\ \lambda_{(N_a-1)}^2 \overline{\overline{c}}_{(N_a-1)} \end{bmatrix} +$$

$$+K_z \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_0}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_1}{\partial z^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_{(N_a-1)}}{\partial z^2} \end{bmatrix} = 0 \quad (6.57)$$

onde N_a é o número de autovalores.

Nota-se que se obteve apenas matrizes diagonais. Assim, tem-se N_a problemas do mesmo tipo:

$$-\overline{u}\frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial x} - K_y \lambda_j^2 \overline{\overline{c}}_j(x,z) + K_z \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_j(x,z)}{\partial z^2} = 0, \quad (6.58)$$

onde $j = 0, 1, \dots, N_a - 1$.

Para as condições de fonte e de contorno, do modelo tridimensional, o procedimento é análogo.

Considerando a condição de fonte (6.47d), $u\overline{c}(0,y,z) = Q\delta(z - H_s)\delta(y - y_0)$ em $x = 0$, e expandindo na equação (6.48) tem-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\overline{\overline{c}}_j(0,z)\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} = \frac{Q\delta(z - H_s)\delta(y - y_0)}{\overline{u}}. \quad (6.59)$$

Aplicando o operador $\displaystyle\int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)}{\sqrt{N_i}}\,\mathrm{d}y$ na equação (6.59) obtém-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} \overline{\overline{c}}_j(0,z) \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)\psi_i(y)}{\sqrt{N_j}\sqrt{N_i}}\mathrm{d}y = \frac{Q\delta(z - H_s)}{\overline{u}} \int_0^{L_y} \frac{\psi_i(y)\delta(y - y_0)}{\sqrt{N_i}}\mathrm{d}y. \quad (6.60)$$

Observe que $\displaystyle\int_0^{L_y} \delta(y - y_0) f(y)\mathrm{d}y = f(y_0)$ se $0 \leq y_0 \leq L_y$, e fazendo as devidas substituições obtém-se:

$$\overline{\overline{c}}_j(0,z) = \frac{Q\delta(z - H_s)}{\overline{u}} \frac{\psi_j(y_0)}{\sqrt{N_j}}. \quad (6.61)$$

Considerando a condição de contorno (6.47b), $K_z \partial\overline{c}/\partial z = 0$ em $z = h$, e expandindo na equação (6.48) chega-se a:

$$\sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,h)}{\partial z} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} = 0 \Rightarrow \sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,h)}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)\psi_i(y)}{\sqrt{N_j}\sqrt{N_i}} \mathrm{d}y = 0. \tag{6.62}$$

logo,

$$K_z \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,h)}{\partial z} = 0. \tag{6.63}$$

Considerando a condição de contorno (6.47a), $K_z \partial \overline{c}/\partial z = V_d \overline{c}$ em $z = 0$, e expandindo na equação (6.48), tem-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,0)}{\partial z} \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}} = \sum_{j=0}^{\infty} V_d \overline{\overline{c}}_j(x,0) \frac{\psi_j(y)}{\sqrt{N_j}}, \tag{6.64}$$

$$\sum_{j=0}^{\infty} K_z \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,0)}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)\psi_i(y)}{\sqrt{N_j}\sqrt{N_i}} \mathrm{d}y = \sum_{j=0}^{\infty} V_d \overline{\overline{c}}_j(x,0) \int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)\psi_i(y)}{\sqrt{N_j}\sqrt{N_i}} \mathrm{d}y. \tag{6.65}$$

logo,

$$K_z \frac{\partial \overline{\overline{c}}_j(x,0)}{\partial z} = V_d \overline{\overline{c}}_j(x,0). \tag{6.66}$$

Para resolver o problema (6.58) sujeito a (6.61), (6.63) e (6.66), deve-se levar em conta a dependência dos coeficientes de difusão e o perfil de velocidade do vento sobre a variável z de altura. Para isso utiliza-se a técnica ADMM onde esses coeficientes são aproximados de forma gradual, dividindo a altura h da CLP em N subcamadas de maneira que no intervalo de cada subcamada $\overline{u}$, K_z e K_y assumem os valores médios conforme as equações (6.11), (6.12) e (6.67):

$$K_{y_n} = \frac{1}{z_n - z_{n-1}} \int_{z_{n-1}}^{z_n} K_y(z)\, \mathrm{d}z\,. \tag{6.67}$$

Primeiramente o problema (6.58) é reformulado como um conjunto de problemas advectivos-difusivos com parâmetros constantes, onde para cada subcamada n tem-se:

$$-\overline{u}_n \frac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_n}(x,z)}{\partial x} - K_{y_n} \lambda_j^2 \overline{\overline{c}}_{j_n}(x,z) + K_{z_n} \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_{j_n}(x,z)}{\partial z^2} = 0, \tag{6.68}$$

com $z_{n-1} \leq z \leq z_n$, $x > 0$, $0 < y < L_y$, $n = 1, 2, \ldots, N$, onde N denota o número de subcamadas e $\overline{c}_n$ denota a concentração média na n-ésima subcamada.

Supõe-se contato perfeito entre as subcamadas, considera-se as condições de continuidade para a concentração e fluxo de concentração nas interfaces:

$$\overline{\overline{c}}_{j_n} = \overline{\overline{c}}_{j_{n+1}} \qquad \text{para} \quad z = z_n \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \tag{6.69a}$$

$$K_{z_n} \frac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_n}}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \frac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_{n+1}}}{\partial z} \quad \text{para} \quad z = z_n \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1\,. \tag{6.69b}$$

Assim, a equação (6.68) é resolvida considerando a condição inicial (6.61), as condições de contorno dadas pelas equações (6.63), (6.66) e as condições de interfaces (6.69a) e (6.69b), resolvendo N problemas do tipo:

$$\begin{cases} \overline{u}_n \dfrac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_n}}{\partial x} = -K_{y_n} \lambda_j^2 \overline{\overline{c}}_{j_n} + K_{z_n} \dfrac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_{j_n}}{\partial z^2}, \\[2ex] \overline{\overline{c}}_{j_n}(0, z) = \dfrac{Q\delta(z - H_s)}{\overline{u}_n} \dfrac{\psi_j(y_0)}{\sqrt{N_j}} \quad \text{em} \quad x = 0, \\[2ex] K_{z_n} \dfrac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_n}}{\partial z} = V_d \overline{\overline{c}}_{j_n} \quad \text{em} \quad z = 0, \\[2ex] K_{z_n} \dfrac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_n}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = h, \\[2ex] \overline{c}_n^y = \overline{c}_{n+1}^y \quad \text{em} \quad z = z_n \quad \text{para} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \\[2ex] K_{z_n} \dfrac{\partial \overline{c}_n^y}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \dfrac{\partial \overline{c}_{n+1}^y}{\partial z} \quad \text{em} \quad z = z_n \quad \text{para} \quad n = 1, 2, \ldots, N-1, \end{cases} \tag{6.70}$$

com $z_{n-1} \leq z \leq z_n$ para $n = 1, \ldots, N$.

Cada problema da equação (6.70) é resolvido aplicando-se a Transformada de Laplace em x, denotando $\mathscr{L}\{\overline{\overline{c}}_{j_n}(x, z)\} = \widehat{c}_{j_n}(s, z)$, conforme os cálculos abaixo:

$$\mathscr{L}\left\{\overline{u}_n \frac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_n}(x, z)}{\partial x}\right\} = -\mathscr{L}\left\{K_{y_n} \lambda_j^2 \overline{\overline{c}}_{j_n}(x, z)\right\} + \mathscr{L}\left\{K_{z_n} \frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_{j_n}(x, z)}{\partial z^2}\right\} \tag{6.71}$$

$$\overline{u}_n \mathscr{L}\left\{\frac{\partial \overline{\overline{c}}_{j_n}(x, z)}{\partial x}\right\} = -K_{y_n} \lambda_j^2 \mathscr{L}\left\{\overline{\overline{c}}_{j_n}(x, z)\right\} + K_{z_n} \mathscr{L}\left\{\frac{\partial^2 \overline{\overline{c}}_{j_n}(x, z)}{\partial z^2}\right\} \tag{6.72}$$

$$\overline{u}_n \left[s\widehat{c}_{j_n}(s, z) - \overline{\overline{c}}_{j_n}(0, z)\right] = -K_{y_n} \lambda_j^2 \left[\widehat{c}_{j_n}(s, z)\right] + K_{z_n} \left[\frac{\mathrm{d}^2 \widehat{c}_{j_n}(s, z)}{\mathrm{d}z^2}\right]. \tag{6.73}$$

Aplicando a condição de fonte, tem-se:

$$\overline{u}_n \left[s\widehat{c}_{j_n}(s,z) - \frac{Q\delta(z-H_s)}{\overline{u}_n}\frac{\psi_j(y_0)}{\sqrt{N_j}} \right] = -K_{y_n}\lambda_j^2 \left[\widehat{c}_{j_n}(s,z)\right] + K_{z_n}\left[\frac{\mathrm{d}^2\widehat{c}_{j_n}(s,z)}{\mathrm{d}z^2}\right] \tag{6.74}$$

$$-\overline{u}_n s\widehat{c}_{j_n}(s,z) + Q\delta(z-H_s)\frac{\psi_j(y_0)}{\sqrt{N_j}} - K_{y_n}\lambda_j^2\widehat{c}_{j_n}(s,z) + K_{z_n}\frac{\mathrm{d}^2\widehat{c}_{j_n}(s,z)}{\mathrm{d}z^2} = 0, \tag{6.75}$$

reordenando a equação:

$$K_{z_n}\frac{\mathrm{d}^2\widehat{c}_{j_n}(s,z)}{\mathrm{d}z^2} + \left(-\overline{u}_n s - K_{y_n}\lambda_j^2\right)\widehat{c}_{j_n}(s,z) = -Q\delta(z-H_s)\frac{\psi_j(y_0)}{\sqrt{N_j}}. \tag{6.76}$$

A fim de simplificar a notação, denota-se:

$$\begin{aligned} P_{j_n} &= -\overline{u}_n s - K_{y_n}\lambda_j^2, \\ D_{j_n} &= \frac{-Q\psi_j(y_0)}{\sqrt{N_j}}, \end{aligned}$$

reescrevendo a equação:

$$K_{z_n}\frac{\mathrm{d}^2\widehat{c}_{j_n}(s,z)}{\mathrm{d}z^2} - P_{j_n}\widehat{c}_{j_n}(s,z) = -D_{j_n}\delta\left(z-H_s\right). \tag{6.77}$$

Dividindo ambos os lados por K_{z_n}, tem-se:

$$\frac{\mathrm{d}^2\widehat{c}_{j_n}(s,z)}{\mathrm{d}z^2} - \frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}\widehat{c}_{j_n}(s,z) = -\frac{D_{j_n}}{K_{z_n}}\delta\left(z-H_s\right). \tag{6.78}$$

A equação (6.78) é uma equação diferencial linear não homogênea com coeficientes constantes. Sua solução geral é dada por $\widehat{c}_{j_n} = \widehat{c}_{j_n h} + \widehat{c}_{j_n p}$, onde $\widehat{c}_{j_n h}$ é a solução da equação homogênea associada e $\widehat{c}_{j_n p}$ é a solução particular.

De modo análogo à equação bidimensional da seção 6.1, chega-se em:

$$\widehat{c}_{j_n h} = A_n e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z} + B_n e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z}, \tag{6.79}$$

e

$$\widehat{c}_{j_n p} = \frac{D_{j_n}}{2\sqrt{P_{j_n}K_{z_n}}}\left[e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)}\right]H(z-H_s). \tag{6.80}$$

Assim, a solução da equação (6.78) é dada por:

$$\widehat{c}_{j_n}(s,z) = A_n e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z} + B_n e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z} + \\ + \frac{D_{j_n}}{2\sqrt{P_{j_n}K_{z_n}}}\left[e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)}\right] H(z-H_s). \quad (6.81)$$

Para poder determinar as constantes A_n e B_n, aplica-se as $2N-2$ condições de continuidade de interface e as condições de contorno em z e resolve-se o sistema linear resultante utilizando o método de *Eliminação de Gauss*. Este sistema é similar ao sistema da equação bidimensional.

Para se obter a solução de $\overline{\overline{c}}_{j_n}(x,z)$, aplica-se a Transformada Inversa de Laplace na solução dada pela equação (6.81) obtendo a solução integral dada por:

$$\overline{\overline{c}}_{j_n}(x,z) = \frac{1}{2\pi i}\int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{sx}\left[A_n e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z} + B_n e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z} + \right. \\ \left. + \frac{D_{j_n}}{2\sqrt{P_{j_n}K_{z_n}}}\left(e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)}\right) H(z-H_s)\right] \mathrm{d}s\,. \quad (6.82)$$

Portanto, a concentração $\overline{c}_n(x,y,z)$ é então obtida:

$$\overline{c}_n(x,y,z) = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{\cos(\lambda_j y)}{\sqrt{N_j}}\left\{\frac{1}{2\pi i}\int_{\xi-i\infty}^{\xi+i\infty} e^{sx}\left[A_n e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z} + B_n e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}z} + \right.\right. \\ \left.\left. + \frac{D_{j_n}}{2\sqrt{P_{j_n}K_{z_n}}}\left(e^{-\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)} - e^{\sqrt{\frac{P_{j_n}}{K_{z_n}}}(z-H_s)}\right) H(z-H_s)\right] \mathrm{d}s\right\}. \quad (6.83)$$

A integral de linha dada pela equação (6.83), é resolvida numericamente pelo método de *Fixed-Talbot* (FT) (ABATE; VALKÓ, 2004). Assim, a concentração final de poluentes é dada na forma:

$$\overline{c}_n(x,y,z) = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{\cos(\lambda_j y)}{\sqrt{N_j}}\left\{\frac{r}{M^*}\left[\frac{1}{2}\overline{\overline{c}}_{j_n}(r,z)e^{rx} + \right.\right. \\ \left.\left. + \sum_{k=1}^{M^*-1} Re\left[e^{xS(\theta_k)}\overline{\overline{c}}_{j_n}(S(\theta_k),z)(1+i\overline{\omega}(\theta_k))\right]\right]\right\}, \quad (6.84)$$

onde $S(\theta_k) = r\theta_k(\cot\theta_k + i)$, $\overline{\omega}(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k\cot\theta_k - 1)\cot\theta_k$, $\theta_k = k\pi/M^*$, $-\pi < \theta_k < +\pi$, r é um parâmetro baseado em experimentos numéricos e $i = \sqrt{-1}$. Considera-se $M^* = 100$ e $r = \dfrac{2M^*}{101x}$.

Convém ressaltar que se a solução (6.83) da equação tridimensional for integrada lateralmente, isto é, em todo domínio de y, obtém-se a solução bidimensional dada pela equação (6.45).

7 DADOS PARA AVALIAÇÃO E ANÁLISE DO MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo, são descritos os dados que foram utilizadas para validar o modelo bidimensional e analisar os modelos matemáticos multidimensionais. São detalhadas as características principais do Experimento de Hanford, além das parametrizações utilizadas para a avaliação bidimensional. Além destas informações, são apresentados os índices estatísticos utilizados para comparar os dados observados no experimento com os dados simulados através do modelo bidimensional. Também são descritos os dados micrometeorológicos das classes de estabilidade consideradas neste estudo e também as parametrizações da turbulência utilizadas para a análise tridimensional.

7.1 Dados Utilizados para a Validação do Modelo Bidimensional

Com o objetivo de testar, avaliar e validar o desempenho do modelo bidimensional, descrito na seção 6.1, apresentam-se neste capítulo a descrição do Experimento de Hanford e os dados micrometeorológicos coletados durante o experimento. As parametrizações para o coeficiente de difusão vertical e o perfil do vento são detalhadas. Também será apresentada a descrição dos índices estatísticos utilizados neste trabalho na comparação entre a concentração predita pelo modelo com a concentração observada no experimento.

7.1.1 Experimento de Hanford

Este experimento foi realizado em Hanford, uma região semiárida no sudeste de Washington (EUA), no período entre $18/05/1983$ a $27/06/1983$. A superfície do terreno é plana com vegetação de gramíneas de 1 a $2m$ de altura de artemísia e comprimento de rugosidade de $0.03m$. O experimento consistiu em liberar dois traçadores, um poluente que deposita sulfeto de zinco (ZnS) e outro não depositante hexafluoreto de enxofre (SF_6), de uma torre a uma vazão de $0.3g/s$ a uma altura de $2m$. Foram conduzidos seis experimentos. Os dados foram coletados a $1.5m$ do solo em cinco arcos de amostra localizados a distância de $100, 200, 800, 1600$ e $3200m$ a partir da fonte com distância

angular de $8°, 4°, 4°, 2°$ e $3°$, respectivamente. Uma torre meteorológica de $122m$ foi instalada a $100m$ ao norte da área de lançamento, essa torre possuia sensores de velocidade e direção do vento e temperatura em $2.1, 9.1, 15.2, 30.5, 61, 91$ e $122m$ de altitude (várias elevações), a fim de monitorar as condições durante os lançamentos dos traçadores para garantir que o material fosse lançado durante períodos com condições de vento e de estabilidade adequadas. Os lançamentos foram feitos durante condições de moderadamente estáveis a quase-neutras. Uma segunda torre de $61m$ de altura foi instalada no centro do arco de $1600m$ para coletar dados meteorológicos detalhados do experimento.

Durante o experimento, a velocidade de deposição só foi avaliada nos três últimos arcos. O tempo de liberação do poluente foi de $30min$ exceto para o quinto experimento que foi de $22min$ devido a uma mudança na direção do vento. A separação lateral entre os pontos de liberação do SF_6 e do ZnS foi menor que $1m$. Os dados medidos durante os testes foram tabulados e apresentados por DORAN et al. (1984).

Na tabela 5, são descritos os dados micrometeorológicos coletados durante o experimento de Hanford. São mostrados, para cada traçador, o comprimento de Monin-Obukhov, $L(m)$, a velocidade de atrito, $u_*(m/s)$, a altura da camada limite turbulenta, $h(m)$, e a velocidade medida na altura de $2m$, $u_1(m/s)$. Os dados nos traçadores da concentração integrada lateralmente foram normalizados pela taxa de liberação Q, $C^y/Q(s/m^2)$, e estão listados na tabela 5, bem como a velocidade de deposição, $V_d(10^{-2}m/s)$, observada para ZnS.

A velocidade de deposição, V_d, que consta na tabela 5 foi calculada com o método de depleção de superfície (DORAN; HORST, 1985) e é eficaz para o traçador depositante ZnS, que é um aerossol polidisperso. DORAN; HORST (1985) justificam a utilização de um modelo para estimar V_d pelo fato de que a medição do marcador depositante na superfície teria sido extremamente difícil por causa da artemísia (tipo de vegetação) na grade de difusão.

A velocidade de deposição contribui para a avaliação dos modelos. Mas fazer uma previsão precisa da taxa da velocidade de deposição é improvável, combinando o fato das incertezas nas estimativas presentes na literatura de V_d como uma função do tamanho das partículas, da turbulência atmosférica e características da superfície (SEHMEL, 1980) e com a incerteza sobre a distribuição do tamanho da partícula no traçador. Além disso, a velocidade de deposição pode variar pela distribuição do tamanho da partícula e pela distância a favor do vento. Assim, para uma dada distância a favor do vento, uma velocidade de deposição efetiva é composta pela variação local de V_d entre a fonte e esta distância (DORAN; HORST, 1985).

Tabela 5: Dados micrometeorológicos e concentrações observadas para os seis experimentos de Hanford

Experimento	Dados	Posição arcos (m)	$C^y/Q(SF_6)$ $(10^{-3}s/m^2)$	$C^y/Q(ZnS)$ $(10^{-3}s/m^2)$	$V_d(ZnS)$ $(10^{-2}m/s)$
		100	19.50	13.20	–
1	$L = 166$	200	11.70	6.47	–
	$u_* = 0.40$	800	3.73	2.24	4.21
18/05/83	$h = 325$	1600	2.14	0.98	4.05
	$u_1 = 3.63$	3200	1.30	0.58	3.65
		100	51.90	38.90	–
2	$L = 44$	200	36.70	22.40	–
	$u_* = 0.26$	800	12.90	7.47	1.93
26/05/83	$h = 135$	1600	9.08	3.25	1.80
	$u_1 = 1.42$	3200	7.22	2.31	1.74
		100	27.10	27.10	–
3	$L = 77$	200	18.10	11.60	–
	$u_* = 0.27$	800	5.91	3.06	3.14
05/06/83	$h = 182$	1600	3.31	1.32	3.02
	$u_1 = 2.02$	3200	1.79	0.66	2.84
		100	91.80	40.90	–
4	$L = 34$	200	48.60	27.20	–
	$u_* = 0.20$	800	20.10	8.04	1.75
12/06/83	$h = 104$	1600	13.10	4.26	1.62
	$u_1 = 1.50$	3200	9.15	3.14	1.31
		100	83.90	53.90	–
5	$L = 59$	200	42.40	31.00	–
	$u_* = 0.26$	800	10.50	5.25	1.56
24/06/83	$h = 157$	1600	8.61	3.38	1.47
	$u_1 = 1.41$	3200	6.64	2.92	1.14
		100	88.40	64.30	–
6	$L = 71$	200	61.10	28.90	–
	$u_* = 0.30$	800	13.40	7.23	1.17
27/06/83	$h = 185$	1600	6.15	2.52	1.15
	$u_1 = 1.54$	3200	3.11	1.25	1.10

DORAN; HORST (1985) utilizaram um modelo para estimar a velocidade de deposição seca fazendo uso dos parâmetros micrometeorológicos medidos no experimento de Hanford, pois existem incertezas nas medições experimentais da V_d. Seguindo este raciocínio, optou-se por utilizar neste trabalho a velocidade sugerida por ARYA (1999), estimada por HANNA (1982):

$$V_d = 0.01\overline{u}. \tag{7.1}$$

7.1.2 Parametrização da Turbulência

Para modelar e simular a dispersão de poluentes na atmosfera pela equação de advecção-difusão, descrita neste trabalho, é necessário escolher parâmetros adequados para a turbulência e o perfil do vento que regem a física do transporte e dispersão de poluentes na camada limite planetária. Na literatura, existe uma variedade de parametrizações que descrevem os fluxos turbulentos (ULKE, 2000).

A seguir serão apresentadas as diferentes parametrizações, válidas para condições atmosféricas estáveis, para os coeficientes de difusão vertical e o perfil do vento utilizados neste trabalho na validação do modelo bidimensional.

7.1.2.1 Coeficientes de Difusão Vertical

- Fórmula de MANGIA et al. (2002):

$$K_z = \frac{0.3(1 - z/h)u_* z}{1 + 3.7z/\Lambda}, \tag{7.2}$$

  onde $\Lambda = L(1 - z/h)^{5/4}$.

- Fórmula de DEGRAZIA et al. (2000):

$$K_z = \frac{0.4(1 - z/h)^{3/4} u_* z}{1 + 3.7z/L(1 - z/h)^{5/4}}\,. \tag{7.3}$$

- Fórmula de HANNA (1982):

$$K_z = \tau_{L_w} \sigma_w^2, \tag{7.4}$$

  onde $\tau_{L_w} = 0.10(h/\sigma_w)(z/h)^{0.8}$ é a escala de tempo de decorrelação vertical e $\sigma_w = 1.3u_*(1 - z/h)$ é a variação da velocidade vertical turbulenta.

7.1.2.2 Perfil do Vento

- Perfil da velocidade média do vento descrito por uma lei de potência expressa por PANOFSKY; DUTTON (1984):

$$\frac{\overline{u_z}}{\overline{u_1}} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^p, \tag{7.5}$$

  onde $\overline{u_z}$ e $\overline{u_1}$ são as velocidades médias do vento nas alturas z e z_1, enquanto p é um expoente que está relacionado com a intensidade da turbulência (IRWIN, 1979).

- Perfil da velocidade média do vento parametrizado de acordo com a Teoria de

Similaridade (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

$$u = \frac{u_*}{\kappa}\left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_m\left(\frac{z}{L}\right)\right] \quad \text{se} \quad z \leq z_b, \tag{7.6}$$

onde u_* é a velocidade de fricção, $\kappa = 0.4$ é a constante de von Kármán, z_0 é o comprimento de rugosidade do terreno, L é o comprimento de Monin-Obukhov, $z_b = \min[|L|, 0.1h]$ e Ψ_m é a função de estabilidade descrita por PAULSON (1970) para condições estáveis:

$$\Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = -4.7\frac{z}{L} \quad \text{para} \quad 1/L \geq 0. \tag{7.7}$$

7.1.3 Índices Estatísticos

A avaliação do modelo apresentado, ou seja, a comparação dos dados de concentração observados no experimento de Hanford e os dados simulados no modelo, é realizada através de índices estatísticos sugeridos por HANNA (1989) e reconhecidos pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera. Para realização desta análise estatística, emprega-se um programa desenvolvido por HANNA (1989).

Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

1. Erro quadrático médio normalizado: $NMSE = \dfrac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o}\,\overline{C_p}}$
   informa sobre os desvios entre as quantidades preditas pelo modelo em relação às quantidades observadas no experimento. O seu valor deve ser o mais próximo de zero possível para que a confiabilidade do modelo seja maior.

2. Coeficiente de correlação: $Cor = \dfrac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}$
   descreve o grau de associação das concentrações observadas e preditas. Para um bom resultado o seu valor deve ser 1.

3. Fator de dois: $Fa2 = \dfrac{C_p}{C_o} \in [0.5, 2]$
   representa a fração de dados calculados, entre a concentração predita pelo modelo e a concentração observada no experimento, que estão entre 0.5 e 2. A confiabilidade do modelo aumenta quanto mais o valor deste índice se aproxima de 1.

4. Erro fracional: $Fb = \dfrac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}$
   indica se as concentrações previstas subestimam ou superestimam as observadas. Se $Fb > 0$ indica que o modelo está subestimando os dados experimentais

e se $Fb < 0$ indica que o modelo está superestimando os dados experimentais. Quando $Fb = 0$ se obtém a melhor estimativa.

5. Desvio padrão fracional: $Fs = \dfrac{\sigma_o - \sigma_p}{0.5(\sigma_o + \sigma_p)}$
representa o grau de distanciamento das concentrações observadas em relação às preditas. Se $Fs > 0$ o valor previsto está menos disperso que o observado e se $Fs < 0$ o valor previsto está mais disperso que o observado. O valor ideal é 0.

Nestes índices estatísticos, o índice o indica as quantidades observadas nos experimentos, o índice p indica as quantidades preditas pelo modelo, C é a concentração de poluentes e σ é o desvio padrão.

7.2 Dados Utilizados para Analisar a Influência da Velocidade de Deposição nas Diferentes Classes de Estabilidade

A partir da validação do modelo bidimensional estende-se a análise do problema para três diferentes cenários de turbulência atmosférica a fim de analisar a influência da velocidade de deposição seca na concentração de poluentes.

Considera-se um cenário fortemente instável, um fracamente instável e um cenário estável, identificados conforme as classes de estabilidade de Pasquill apresentadas na tabela 1 por classe A, C e E, respectivamente.

A tabela 6 descreve os dados meteorológicos relacionados com as três classes de estabilidade atmosférica, onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, u_* é a velocidade de fricção, u_1 a velocidade do vento em 10 metros e p é o expoente do perfil da velocidade do vento.

Tabela 6: Dados meteorológicos para três diferentes cenários difusivos

Classes	$L(m)$	$u_*(m/s)$	$u_1(m/s)$	p
A	-7.2	0.1	1.5	0.07
C	-30	0.25	4	0.1
E	30	0.16	3.5	0.35

Os resultados obtidos na validação do modelo bidimensional serão apresentados e discutidos no capítulo 8. Porém, adianta-se que o modelo apresenta melhor resultado quando o perfil de vento potência (descrito pela equação (7.5)) e o coeficiente de difusão vertical de HANNA (1982), dado pela equação (7.4), são empregados. Dessa forma, nas análises que seguem, esse perfil de vento será utilizado em todas as classes aqui testadas e essa parametrização de HANNA (1982) para o coeficiente de difusão vertical será utilizada na classe E.

Sendo assim, com o intuito de analisar a distribuição da poluição na atmosfera e o decaimento dessas substâncias nas diferentes classes de estabilidade na CLP, o

modelo bidimensional, descrito na seção 6.1, e o modelo tridimensional, descrito na seção 6.2, foram analisados utilizando o perfil de vento potência, dado pela equação (7.5), e para cada cenário será empregado uma única parametrização para os coeficientes de difusão de acordo com a classe de estabilidade.

7.2.1 Parametrização no Cenário Instável - Classe A e C

- Coeficiente de difusão vertical de DEGRAZIA et al. (1997):

$$\frac{K_z}{w_* h} = 0.22\left(\frac{z}{h}\right)^{1/3}\left(1-\frac{z}{h}\right)^{1/3}\left[1-\exp\left(-\frac{4z}{h}\right)-0.0003\exp\left(\frac{8z}{h}\right)\right] \tag{7.8}$$

  onde w_* é a escala de velocidade convectiva avaliada por $w_*/u_* = (-h/\kappa L)^{1/3}$, $\kappa = 0.4$ é a constante de von Kármán, u_* é a velocidade de fricção, L é o comprimento de Monin-Obukhov, z é a altura acima da superfície e h é a altura da CLP.

- Coeficiente de difusão lateral de DEGRAZIA et al. (1997):

$$K_y = \frac{\sqrt{\pi}\sigma_v z}{16(f_m)_v q_v} \tag{7.9}$$

  com

$$\sigma_v^2 = \frac{0.98 c_v}{(f_m)_v^{2/3}}\left(\frac{\psi_\epsilon}{q_v}\right)^{2/3}\left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2 \tag{7.10}$$

$$\psi_\epsilon^{1/3} = \left[\left(1-\frac{z}{L}\right)^2\left(-\frac{z}{L}\right)^{-2/3}+0.75\right]^{1/2} \tag{7.11}$$

  onde σ_v é o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal, $(f_m)_v = 0.16$ é o pico de onda lateral, ψ_ϵ é a função da taxa de dissipação molecular adimensional, $q_v = 4.16z/h$ é a função de estabilidade e $c_v = 0.4$.

7.2.2 Parametrização no Cenário Estável - Classe E

Conforme dito anteriormente, no cenário estável a fórmula do coeficiente de difusão vertical utilizado é a de HANNA (1982), dada pela equação (7.4), já a difusão lateral foi parametrizada através da fórmula de DEGRAZIA et al. (2000), dada por:

$$K_y = 0.14\sqrt{c_v}z\left\{\frac{w_*((\overline{-L}/h)h/L)^{1/2}(\psi_\epsilon z/h)^{1/3}}{[(f_m^*)_v^c]^{4/3}}+\frac{\phi_\epsilon^{1/3}u_*}{[(f_m^*)^{n+s}]^{4/3}}\right\} \tag{7.12}$$

para

$$(f_m^*)^{n+s} = (f_m)_{vs}^n\left(1+0.03a_v\frac{f_c z}{(u_*)_0}+3.7\frac{z}{\Lambda}\right) \tag{7.13}$$

onde $(f_m^*)_v^c = z/1.5h$ é a redução da frequência do pico espectral convectiva, $\phi_\epsilon = 1.25(1+3.7z/\Lambda)$ é a taxa de dissipação adimensional com parâmetros de escala da

camada de superfície com $\Lambda = L(1 - z/h)^{5/4}$, $(f_m^*)^{n+s}$ é a redução da frequência do pico espectral neutro ou estável, $(f_m)_{vs}^n = 0.16$, $a_v = 1094$, $f_c = 10^{-4}$s^{-1} é o parâmetro de Coriolis e $u_* = (u_*)_0(1 - z/h)^{3/2}$.

8 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, apresentam-se os resultados das simulações do modelo bidimensional obtidas pelo ADMM e as simulações do modelo tridimensional através do GIADMT.

A equação de advecção-difusão bidimensional estacionária com velocidade de deposição seca no solo foi resolvida com a utilização do ADMM e sua solução é dada pela equação (6.46). Para avaliar o desempenho do modelo bidimensional estacionário, foram utilizados os dados experimentais de Hanford apresentados na tabela 5. Os dados preditos pelo modelo foram confrontados com os valores de concentração ZnS medidos já que é uma substância que deposita. Conforme já foi dito na seção 7.1.1, os dados da velocidade de deposição do experimento de Hanford não foram utilizados, optou-se por utilizar a fórmula, equação (7.1), sugerida por ARYA (1999), estimada por HANNA (1982). Também foram utilizados os coeficientes de difusão vertical de MANGIA et al. (2002), equação (7.2), DEGRAZIA et al. (2000), equação (7.3) e HANNA (1982), equação (7.4) e os perfis de vento potência e logarítmico, descritos respectivamente pelas equações (7.5) e (7.6). Esta parametrização foi apresentada na seção 7.1.2.

Os resultados obtidos foram comparados com os valores experimentais através de uma avaliação estatística, na qual foram utilizados os índices estatísticos descritos na seção 7.1.3. A tabela 7 apresenta o resultado dos índices estatísticos dos dados observados no experimento de Hanford confrontado com os dados simulados no modelo.

Tabela 7: Avaliação estatística do modelo

$\overline{u}$	K_z	$NMSE$	Cor	$Fa2$	Fb	Fs
perfil	Mangia et al. (2002)	0.11	0.878	0.889	-0.033	-0.011
vento	Degrazia et al. (2000)	0.13	0.881	0.944	0.111	0.158
logarítmico	Hanna (1982)	0.18	0.854	0.833	0.182	0.177
perfil	Mangia et al. (2002)	0.17	0.928	0.833	-0.292	-0.236
vento	Degrazia et al. (2000)	0.09	0.932	0.889	-0.168	-0.087
potência	Hanna (1982)	0.09	0.903	1.000	-0.040	-0.011

Os índices estatísticos mostram que o modelo apresenta bons resultados indepen-

dente da parametrização utilizada. Pode-se perceber que o melhor desempenho do modelo ocorre ao utilizar o coeficiente de difusão vertical proposto por HANNA (1982), equação (7.4), e o vento potência, equação (7.5), pois o fator de dois ($Fa2$) tem o seu melhor resultado, que é 1, e os outros índices também estão se aproximando dos seus valores ideais, ou seja, o coeficiente de correlação (Cor) próximo de 1 e os demais índices se aproximam de 0.

A figura 4 mostra o gráfico de espalhamento entre as concentrações de ZnS observadas durante o experimento e as concentrações preditas pelo modelo utilizando o vento potência e o coeficiente de difusão de HANNA (1982). Os pontos que se encontram entre as linhas pontilhadas indicam que a razão entre a concentração predita pelo modelo e a concentração observada no experimento, está entre 0.5 e 2. Quando todos os pontos então dentro destas linhas o $Fa2$ é 1. A linha contínua representa que quanto mais próximo os pontos estiverem desta reta, melhores os resultados. Observa-se que o modelo reproduz bem a concentração observada, pois os dados calculados encontram-se dentro do fator de 2 dos dados observados. O modelo fornece valores médios obtidos pelo desempenho de muitos experimentos e se os valores estimados estiverem dentro de um fator de dois dos dados observados o modelo é considerado aceitável.

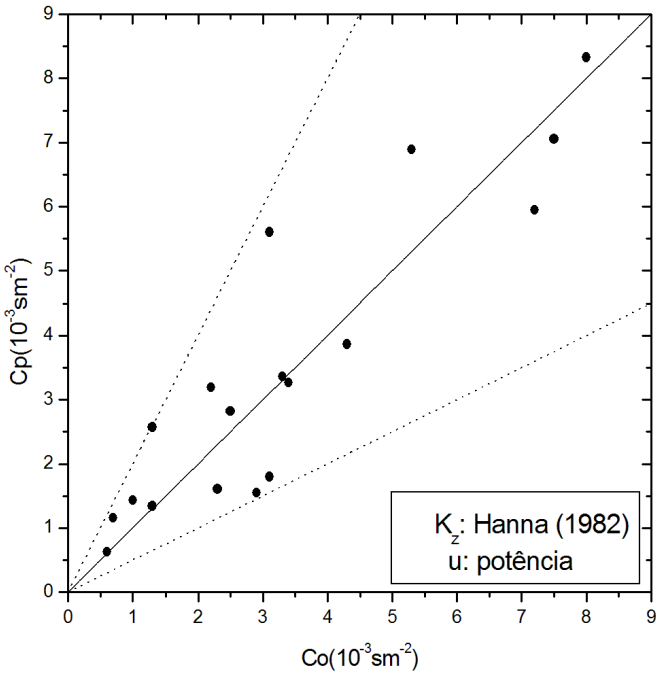


Figura 4: Gráfico de espalhamento entre as concentrações observadas (C_o) no experimento e preditas (C_p) pelo modelo utilizando o coeficiente de difusão vertical de Hanna (1982) e o vento potência.

Desta forma, o modelo bidimensional foi avaliado para condições estáveis da atmosfera, considerando uma formulação teórica para a velocidade de deposição no solo, utilizando diferentes parametrizações da camada limite e os resultados comparados com os dados experimentais de Hanford através de índices estatísticos. A partir

desta validação o próximo passo foi analisar o modelo em diferentes cenários de turbulência atmosférica a fim de investigar a influência da velocidade de deposição seca na concentração de poluentes. Foram testados seis valores diferentes para a velocidade de deposição seca do poluente. Considera-se um cenário fortemente instável, um fracamente instável e um cenário estável, identificados conforme as classes de estabilidade de Pasquill (ZANNETTI, 1990) respectivamente por classe A, C e E.

Para as próximas análises, foi utilizado o perfil de vento potência, equação (7.5), e para a parametrização da turbulência o coeficiente de difusão vertical de DEGRAZIA et al. (1997), equação (7.8), para as classes de estabilidade A e C e o coeficiente de difusão vertical de HANNA (1982), equação (7.4), para a classe E. O perfil de vento empregado nas classes A, C e E e a fórmula do coeficiente de difusão vertical utilizado na classe E, foram escolhidos para compor a parametrização da turbulência nas próximas análises do modelo já que foram os que apresentaram melhor desempenho nas simulações do modelo conforme resultados estatísticos descritos na tabela 7.

As figuras 5, 6 e 7 mostram as concentrações a nível do solo em função da distância da fonte para seis diferentes valores da velocidade de deposição seca em condições de estabilidade atmosférica fortemente instável, fracamente instável e estável, respectivamente, para uma fonte baixa de $10m$ de altura.

Observa-se nas figuras 5, 6 e 7 que o comportamento da concentração máxima não muda para diferentes valores da velocidade de deposição seca. Isso ocorre, pelo fato que o poluente que vem de fontes situadas próximas do solo atinge concentrações máximas próximo ao solo e muito perto da fonte. Dessa forma os fenômenos de deposição seca não conseguem agir em tempo suficiente para que o material emitido no ar perca substâncias.

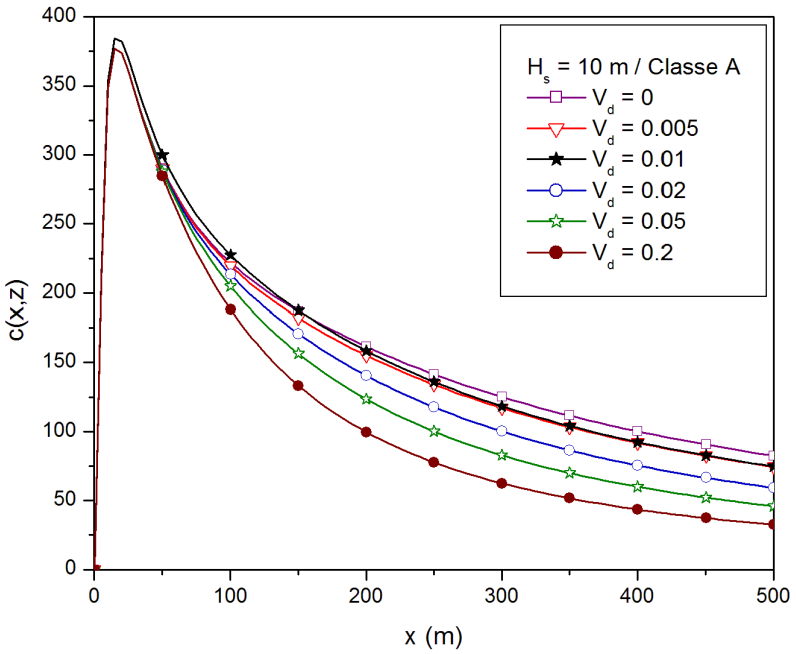


Figura 5: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fortemente instável com fonte perto do solo, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

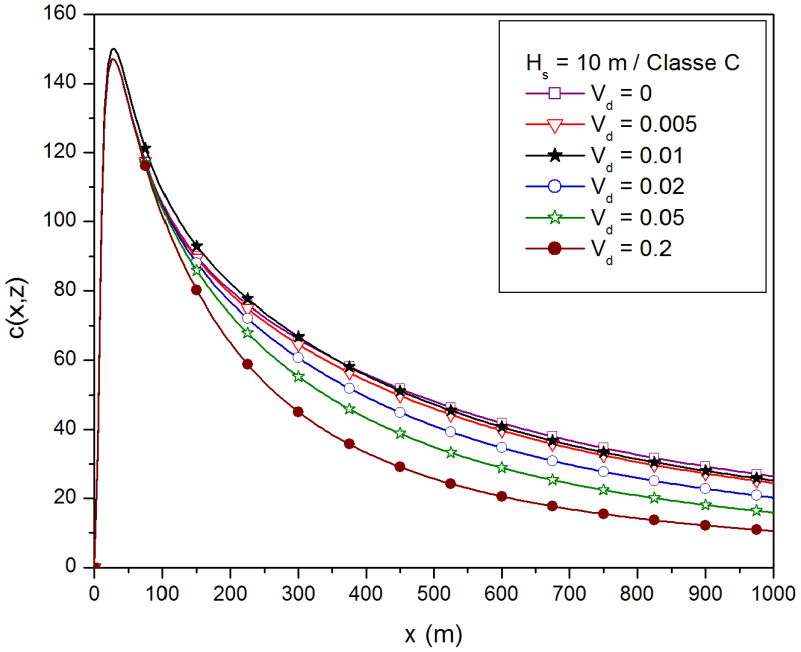


Figura 6: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fracamente instável com fonte perto do solo, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

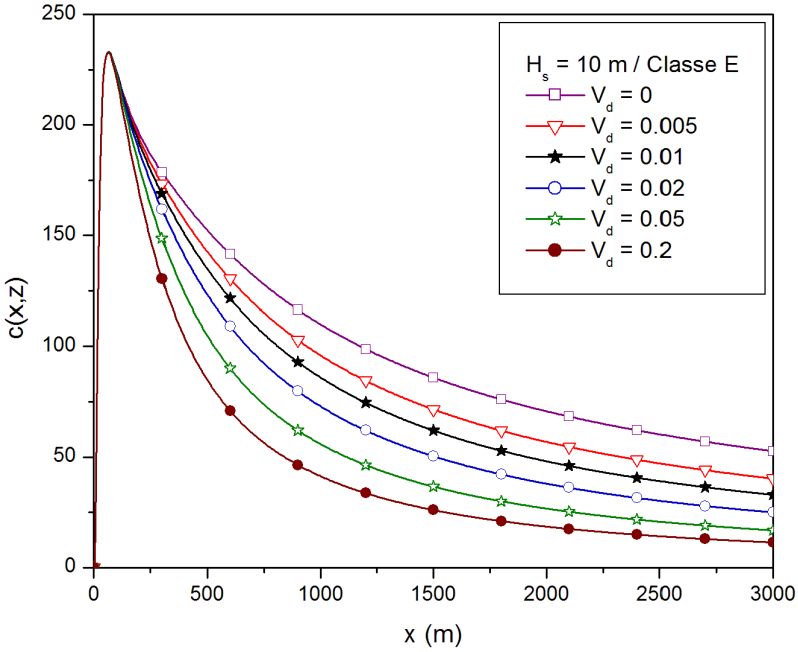


Figura 7: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera estável com fonte perto do solo, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

Um comportamento oposto está presente em cenários caracterizados por fontes altas, como pode ser visto nas figuras 8, 9 e 10. Nestas figuras as simulações foram realizadas para uma fonte de $100m$ de altura e mostram as concentrações ao nível do solo em função da distância da fonte para seis diferentes valores da velocidade de deposição seca em condições de estabilidade atmosférica fortemente instável, fracamente instável e estável, respectivamente.

Observa-se que para uma atmosfera convectiva, figuras 8 e 9, a medida que o valor da velocidade de deposição aumenta o valor da concentração máxima diminui e a posição onde ocorre esse valor máximo se aproxima da fonte. Quando o cenário é menos convectivo, classe C (figura 9) apresenta valores menores para as concentrações em relação ao caso fortemente instável, classe A (figura 8). No caso estável, figura 10, a concentração máxima de poluentes ocorre bem distante da fonte (a partir de $4000m$) e a velocidade de deposição influencia fortemente no seu valor, isto é, os valores do máximo da concentração diminuem de forma significativa quando o valor da velocidade de deposição aumenta, possibilitando uma maior deposição do poluente no solo.

Para um cenário convectivo, figuras 8 e 9, a concentração de poluentes possui seu valor máximo próximo da fonte e torna-se homogênea a distâncias pequenas em comparação com um cenário estável, figura 10, no qual a concentração máxima ocorre a distâncias mais afastadas da fonte e a sua homogeneidade a grandes distâncias da fonte. Esse comportamento ocorre devido ao fato que em condições convectivas existe

uma forte difusão turbulenta que expande a concentração mais rapidamente, já em uma atmosfera estável a pluma de poluentes tem pouca expansão vertical enquanto viaja horizontalmente a distâncias mais longas porque o processo advectivo é muito maior que o difusivo. Essas análises podem ser vistas nas figuras 8, 9 e 10.

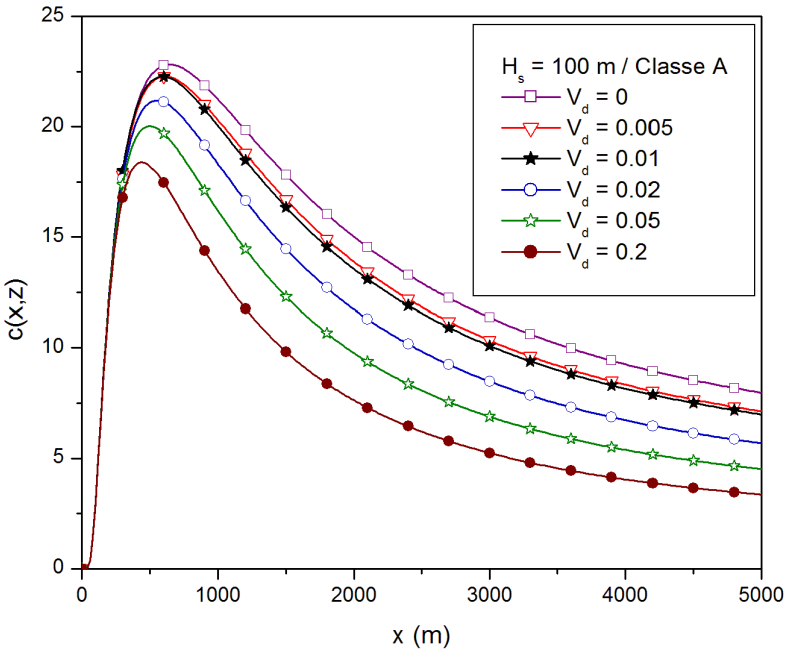


Figura 8: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fortemente instável com altura de fonte de $100m$, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

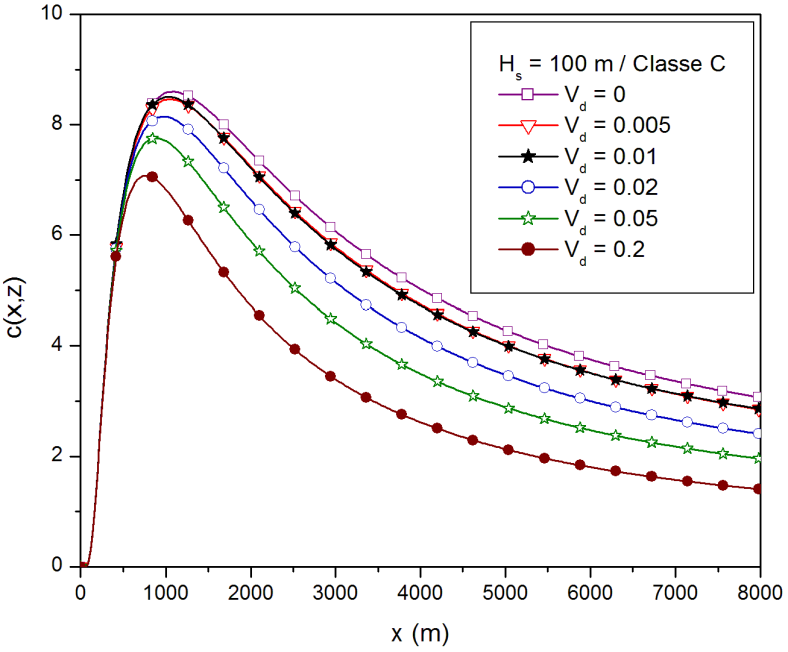


Figura 9: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera fracamente instável com altura de fonte de $100m$, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

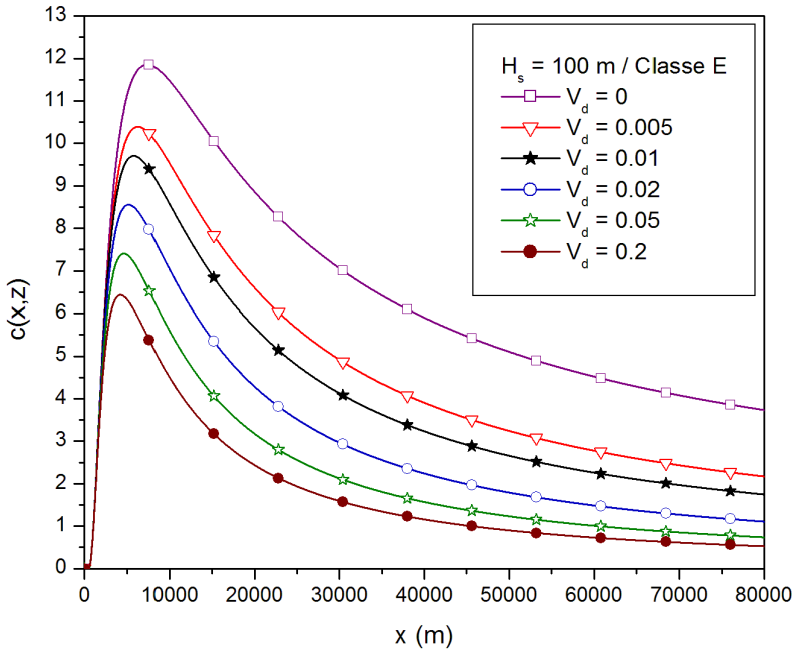


Figura 10: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução bidimensional em uma atmosfera estável com altura de fonte de $100m$, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

Observando os gráficos da concentração ao nível do solo em função da distância da fonte, pode-se concluir que os fenômenos de deposição seca influenciam no comportamento da dispersão do poluente em função da altura da fonte. Nas figuras 5, 6 e 7, o poluente é emitido de fontes próximas ao solo atingindo concentrações máximas muito perto da fonte dessa forma os fenômenos de deposição seca não tem tempo suficiente para agir sobre o material emitido no ar, fazendo que haja diferença na concentração para as diversas velocidades de deposição, apenas a distâncias maiores a partir da fonte. Por outro lado, em fontes altas, figuras 8, 9 e 10, o fenômeno da deposição seca influencia significativamente no valor da concentração máxima, no qual diminui e ao mesmo tempo se aproxima da fonte a medida que a velocidade de deposição aumenta. A partir desta conclusão, a fim de observar a influência da velocidade de deposição na dispersão do poluente, as próximas simulações de concentrações são realizadas considerando somente fonte alta.

As figuras 11, 12 e 13 mostram os perfis verticais de concentrações para seis diferentes valores de deposição seca em condições de estabilidade atmosférica fortemente instável, fracamente instável e estável, respectivamente, para uma fonte de $100m$ de altura e uma distância igual a vinte vezes a altura da fonte ($x = 20H_s$) para classe A e C e cem vezes a altura da fonte ($x = 100H_s$) para classe E. Justifica-se a escolha de uma distância em x maior em uma atmosfera estável, porque nessa condição a pluma de poluentes atinge a concentração máxima a distâncias maiores a partir da fonte.

Pode-se perceber que os perfis verticais de concentração variam substancialmente

do solo até a altura da fonte, mas até $0.5z_i$ é possível perceber a influência da velocidade de deposição. Isso é devido ao fato da deposição seca ser um fenômeno que ocorre próximo ao solo sendo que para grandes alturas não há diferenças na concentração com a variação da velocidade de deposição.

Para condições atmosféricas fortemente instáveis, é possível perceber a influência da velocidade de deposição nos perfis verticais de concentração de poluição do ar até $0.5z_i$, já para condições menos convectivas os perfis são alterados principalmente a alturas bem próximas da fonte. Isto ocorre porque a deposição é um fenômeno que ocorre perto do solo e existe uma fraca difusão turbulenta em uma atmosfera menos convectiva, assim os efeitos da deposição não conseguem atingir as regiões muito acima da fonte de emissão.

As simulações mostraram que a deposição seca é um fenômeno local que pode influenciar fortemente a distribuição das concentrações de poluição do ar e as concentrações máximas próximos do solo e que as concentrações de poluição, pela deposição, dependem da altura da fonte e da intensidade da turbulência.

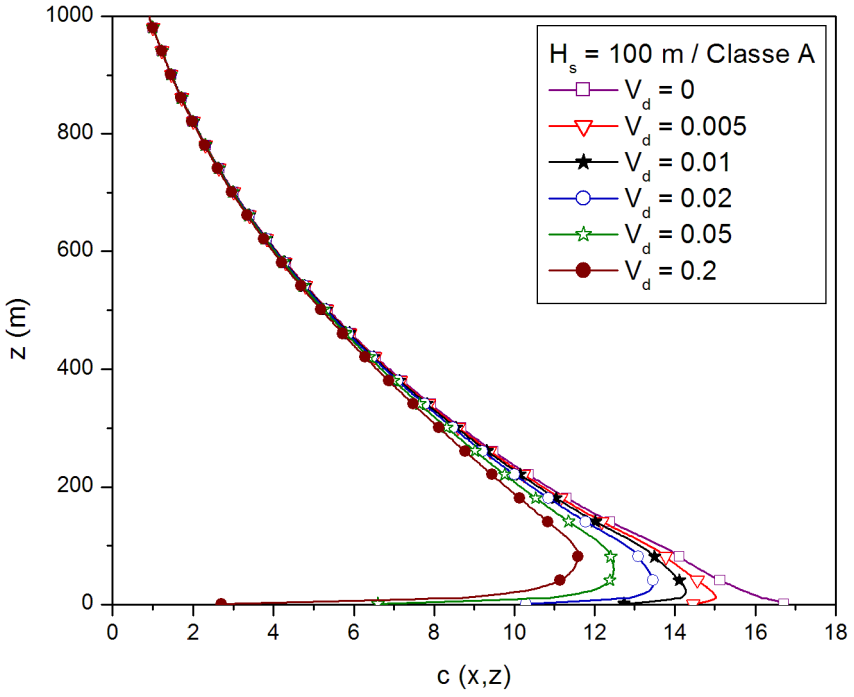


Figura 11: Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fortemente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$.

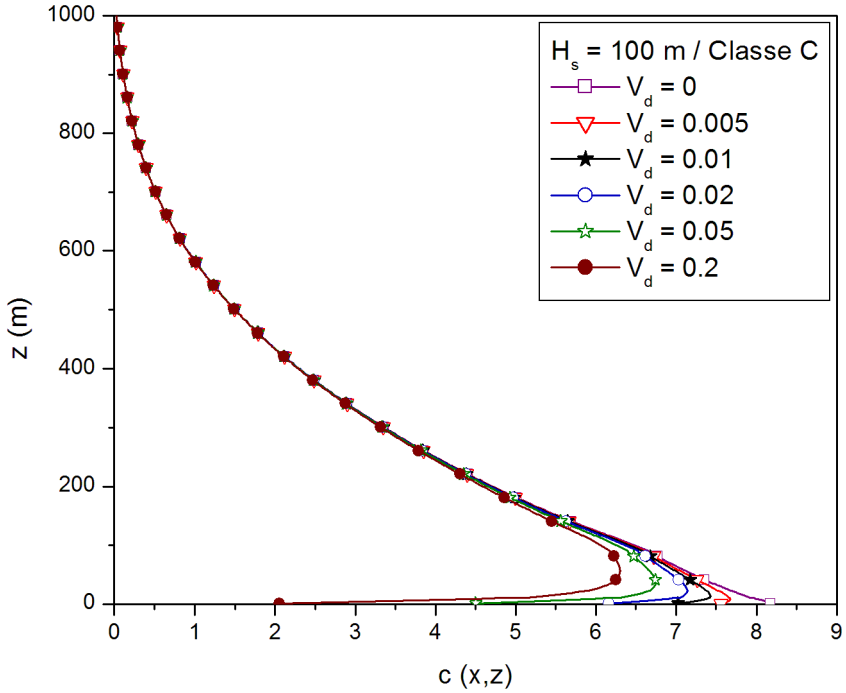


Figura 12: Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fracamente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$.

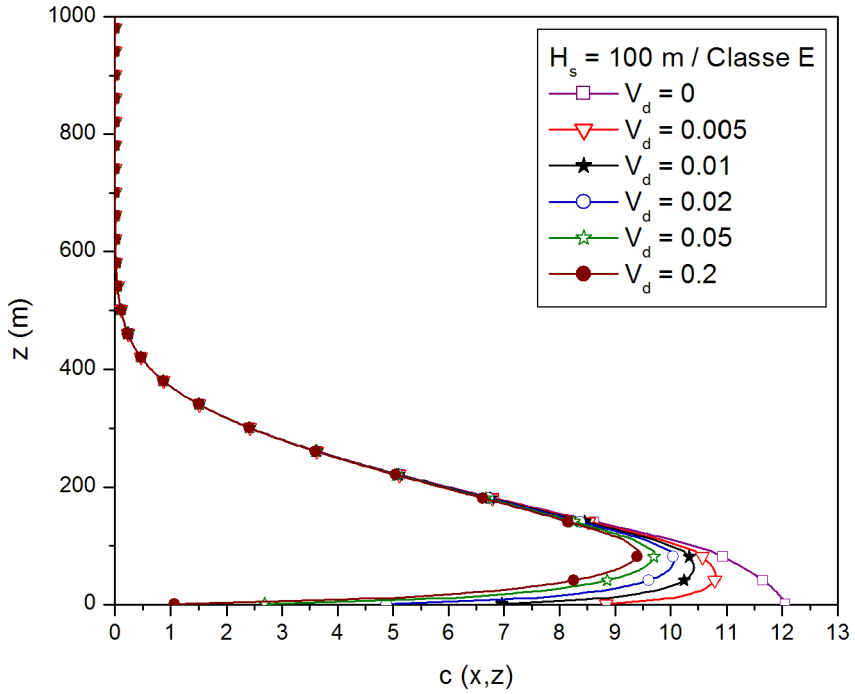


Figura 13: Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera estável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$.

Até o presente momento na literatura não existem dados experimentais que apresentam a concentração de poluentes tridimensional e que consideram a velocidade de deposição, devido a este fato neste trabalho não foi realizada a validação do modelo tridimensional. A validação da solução da equação de advecção-difusão tridimensio-

nal estacionária sem deposição, obtida pelo GIADMT, pode ser encontrada no trabalho de COSTA (2007).

A partir da validação do modelo bidimensional e as simulações em diversas classes de estabilidade utilizou-se o modelo tridimensional para estudar a influência da velocidade de deposição seca na concentração de poluentes. O comportamento das substâncias nas diferentes classes de estabilidade foi observado para analisar se os perfis de concentração são semelhantes ao caso bidimensional.

Para as próximas análises, foi utilizado o perfil de vento potência, equação (7.5), e para a parametrização da turbulência o coeficiente de difusão vertical de DEGRAZIA et al. (1997), equação (7.8) e o coeficiente de difusão lateral de DEGRAZIA et al. (1997), equação (7.9), para as classes de estabilidade A e C. E o coeficiente de difusão vertical de HANNA (1982), equação (7.4), e o coeficiente de difusão lateral de DEGRAZIA et al. (2000), equação (7.12), para a classe E.

As figuras 14, 15 e 16 são referentes as concentrações calculadas pela solução tridimensional. As simulações foram realizadas para uma fonte de $100m$ de altura e mostram as concentrações ao nível do solo em função da distância da fonte para seis diferentes valores da velocidade de deposição seca em condições de estabilidade atmosférica fortemente instável, fracamente instável e estável, respectivamente.

Como esperado, os perfis são semelhantes ao caso bidimensional. Ou seja, observa-se que com o aumento da velocidade de deposição ocorre uma diminuição no valor da concentração máxima e a posição deste valor máximo localiza-se mais próxima da fonte de emissão do poluente nos casos mais convectivos e mais distantes da fonte para uma atmosfera estável.

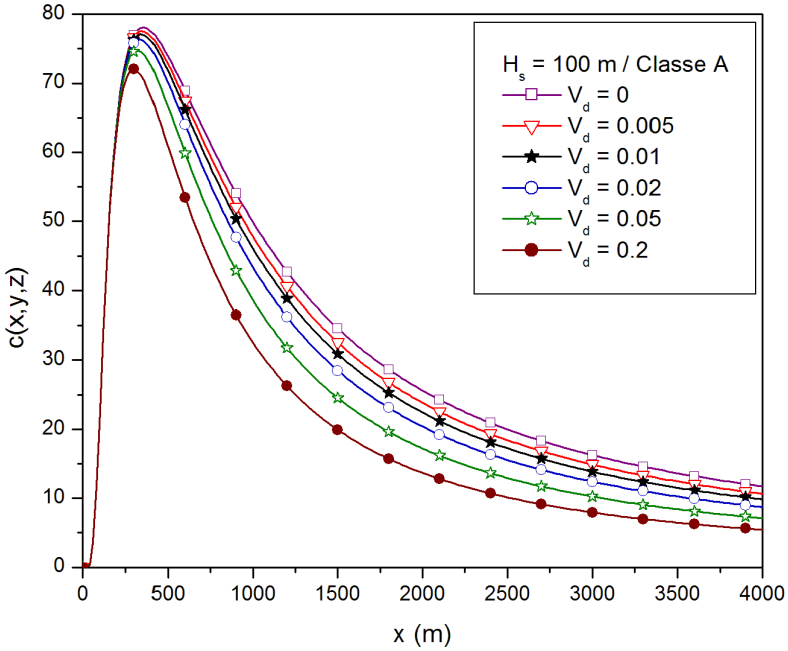


Figura 14: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução tridimensional em uma atmosfera fortemente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

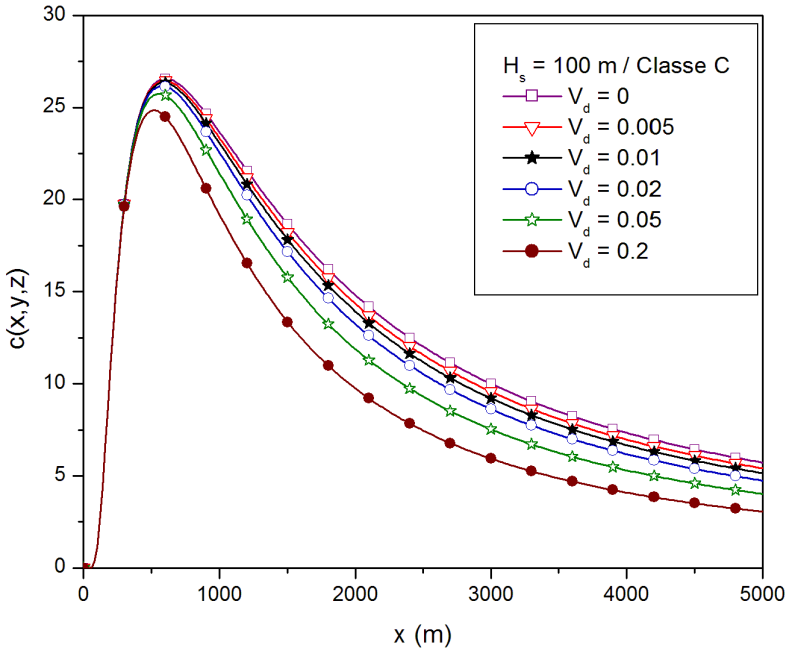


Figura 15: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução tridimensional em uma atmosfera fracamente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

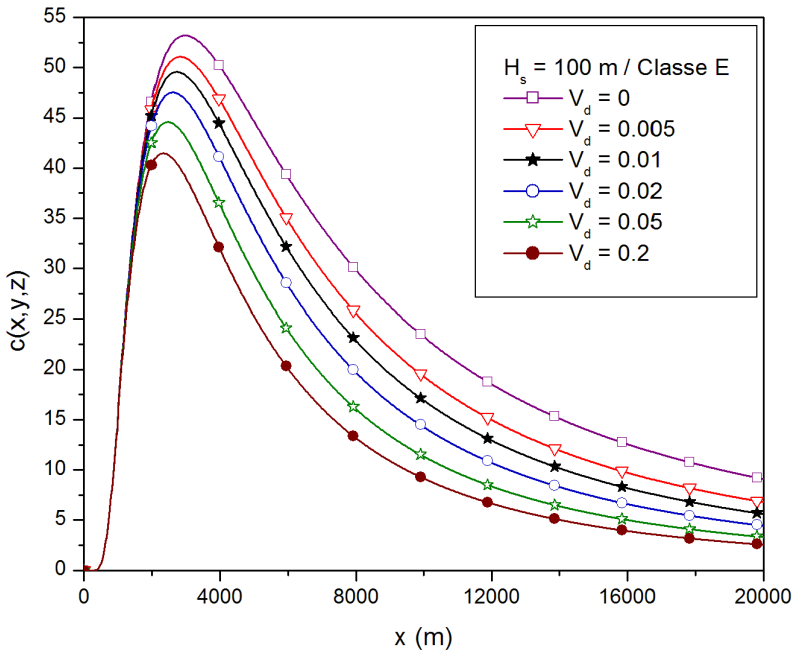


Figura 16: Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte para diferentes valores da deposição seca previstas pela solução tridimensional em uma atmosfera estável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $x(m)$.

As figuras 17, 18 e 19 mostram os perfis verticais de concentrações, preditas pela solução tridimensional, para seis diferentes valores de deposição seca em condições de estabilidade atmosférica fortemente instável, fracamente instável e estável, respectivamente, para uma fonte de $100m$ de altura. A distância longitudinal utilizada foi igual a cem vezes a altura da fonte ($x = 100H_s$) para as classes A e C e na classe E foi usado uma distancia longitudinal $x = 500H_s$ (conforme dito nas discussões dos resultados bidimensionais, foi utilizada uma distância em x maior em uma atmosfera estável, porque nessa condição a pluma de poluentes atinge a concentração máxima a distâncias maiores a partir da fonte), a distância lateral utilizada foi igual para todas as classes (de $y = 20m$).

Observa-se que a variação dos perfis verticais de concentração ocorre do solo até a altura da fonte obtendo perfis semelhantes aos vistos nas simulações bidimensionais. Porém para uma atmosfera estável, diferentemente do caso bidimensional, a variação da velocidade de deposição altera os valores de concentrações também para alturas acima da fonte, até $0.5z_i$ nas simulações tridimensionais. Convém ressaltar que no caso tridimensional a difusão lateral está presente e esse parâmetro turbulento influencia o transporte e a difusão de poluentes, o que justifica os efeitos da deposição também acima da fonte na classe E.

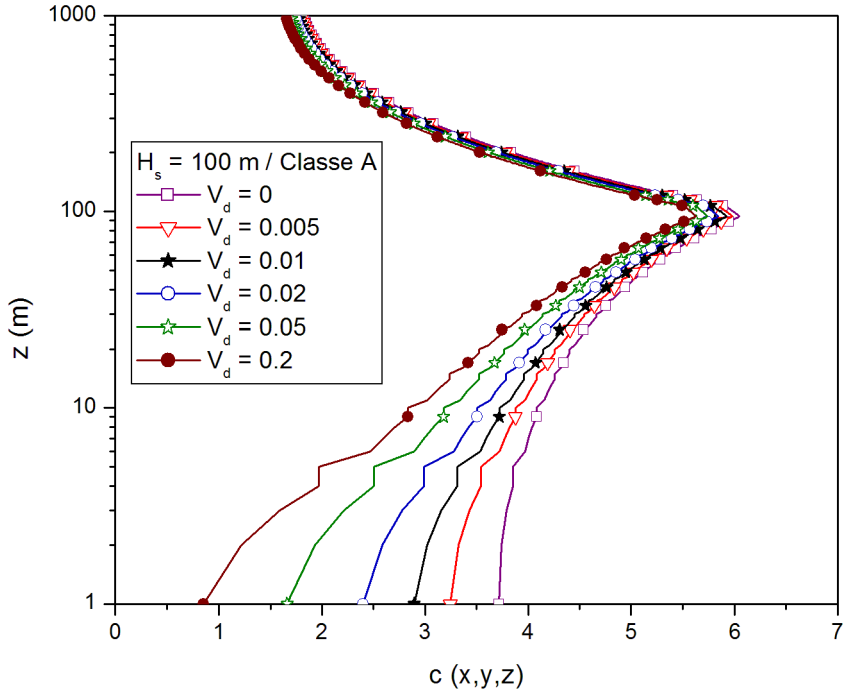


Figura 17: Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fortemente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$.

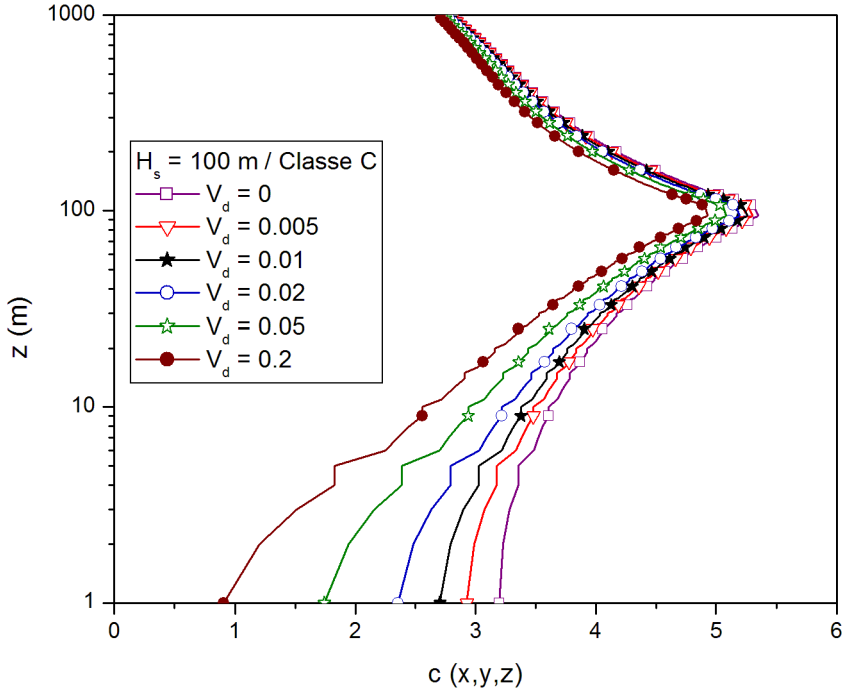


Figura 18: Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera fracamente instável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$.

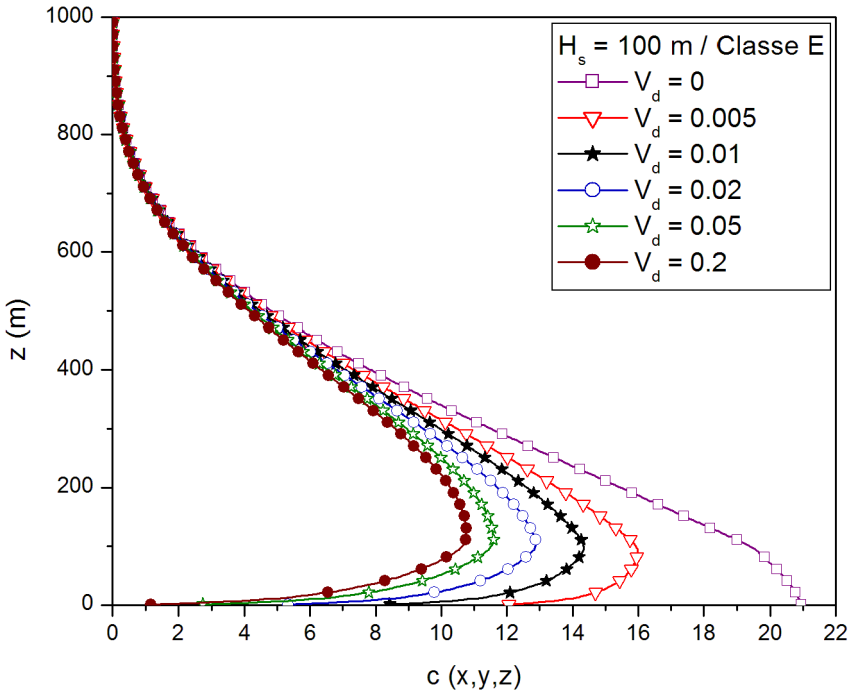
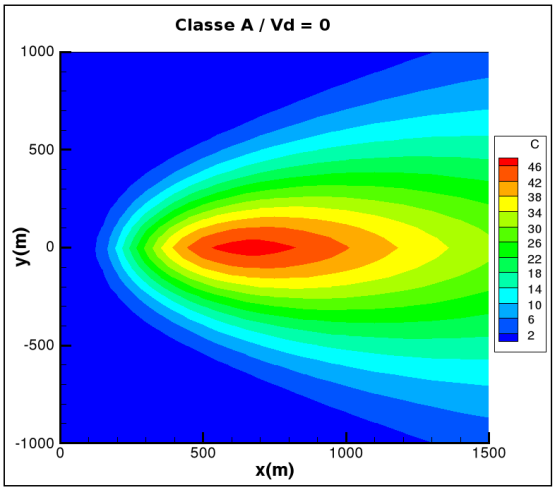


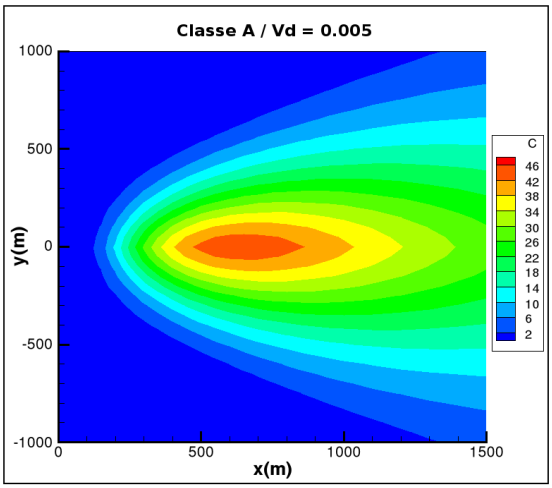
Figura 19: Perfis verticais de concentração para diferentes valores da deposição seca em uma atmosfera estável, com $c(s/m^2)$, $V_d(m/s)$ e $z(m)$.

As figuras 20, 21 e 22 mostram a distribuição da concentração no plano xy horizontal ao nível do solo para condições da atmosfera fortemente instáveis, fracamente instáveis e estáveis, respectivamente, para diferentes valores da velocidade de deposição. Em todas observa-se a influência da velocidade de deposição seca na concentração de poluentes, a qual altera o valor de máxima concentração devido a perda de substâncias. Nota-se que se o poluente possuir maior velocidade de deposição a sua concentração é menor a partir da emissão da fonte e vai diminuindo consideravelmente a concentração à grandes distâncias.

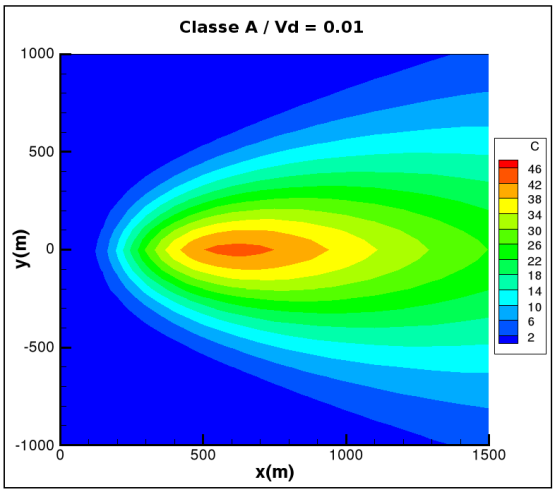
Além disso, observa-se que as concentrações dependem da intensidade da turbulência. Quanto menos instável for a atmosfera o valor de máxima concentração e a posição do máximo de concentração sofrerá uma mudança maior, implicando na redução significativa da concentração perto da fonte com o aumento da velocidade de deposição seca do poluente.



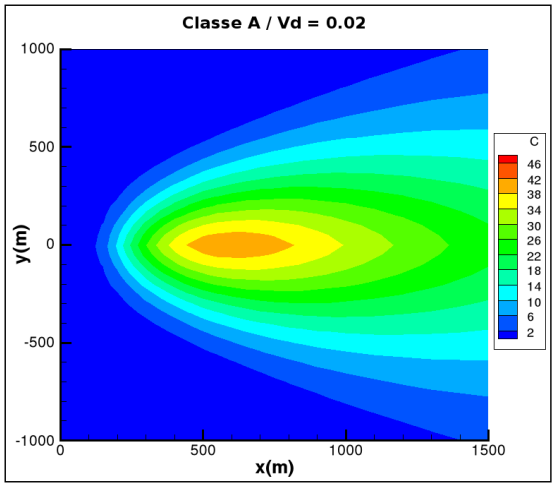
(a) sem deposição



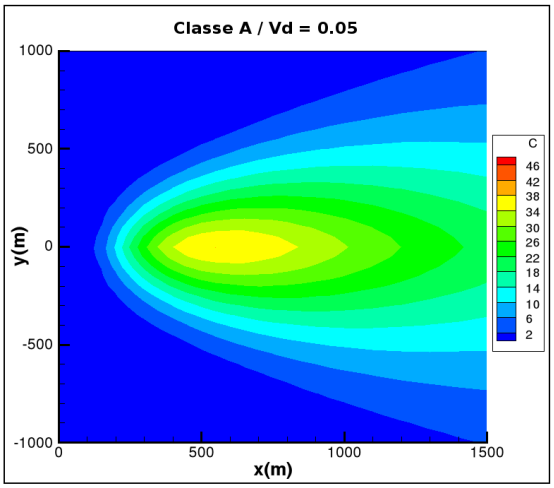
(b) $V_d = 0.005$ (m/s)



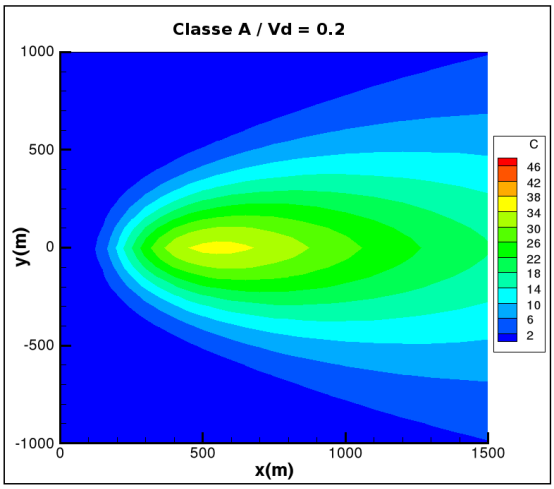
(c) $V_d = 0.01$ (m/s)



(d) $V_d = 0.02$ (m/s)

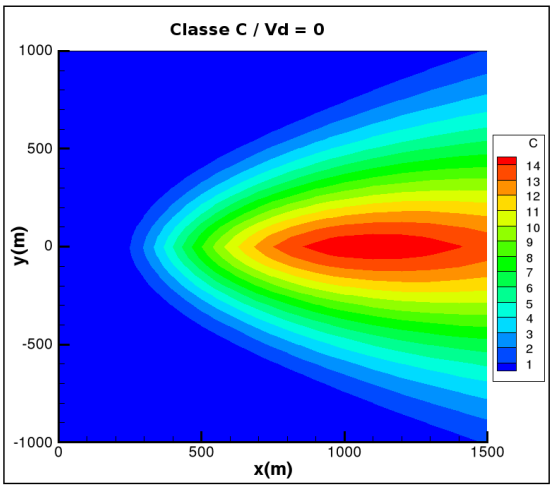


(e) $V_d = 0.05$ (m/s)

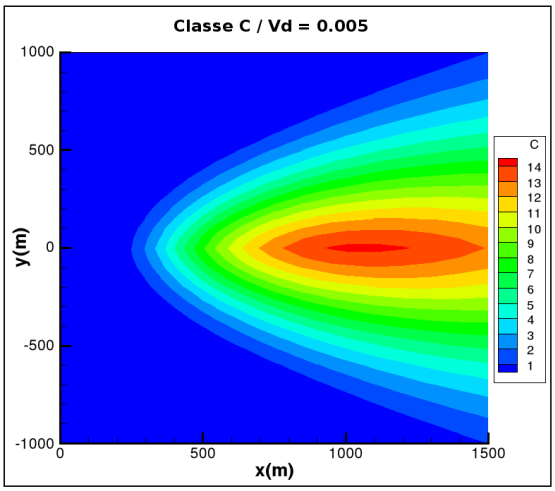


(f) $V_d = 0.2$ (m/s)

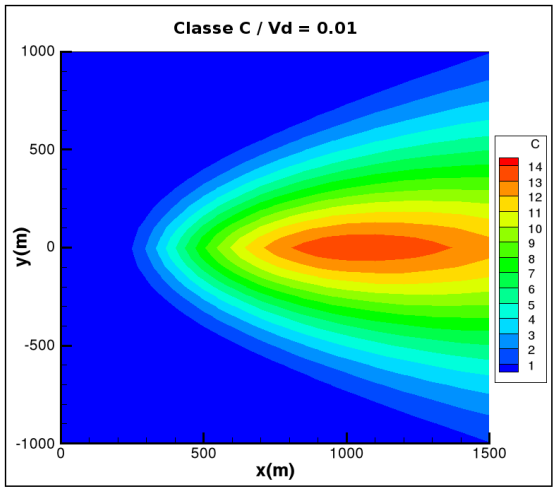
Figura 20: Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo para diferentes valores da deposição seca em condições fortemente instáveis (Classe A).



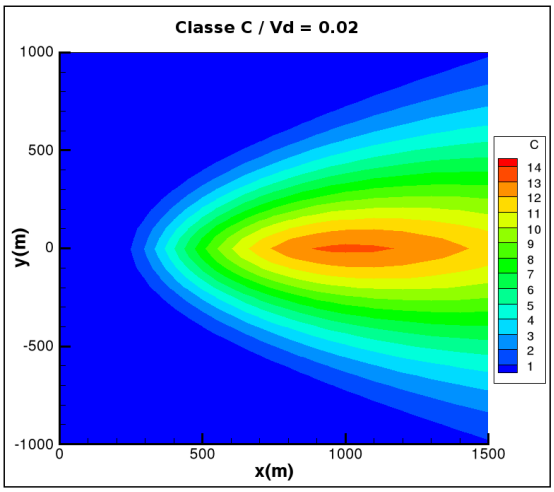
(a) sem deposição



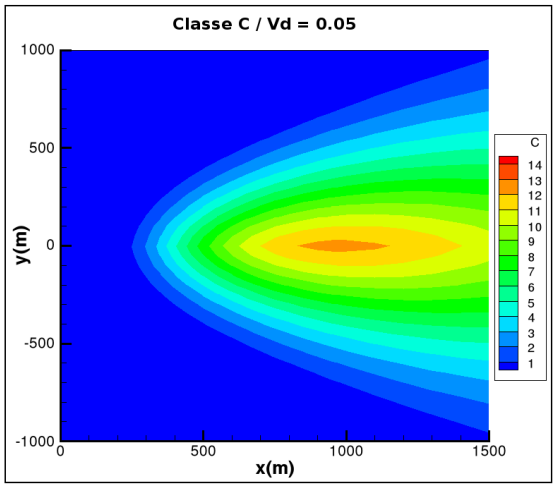
(b) $V_d = 0.005$ (m/s)



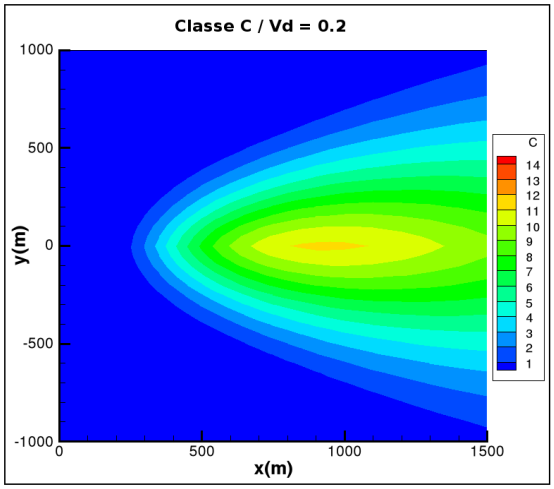
(c) $V_d = 0.01$ (m/s)



(d) $V_d = 0.02$ (m/s)

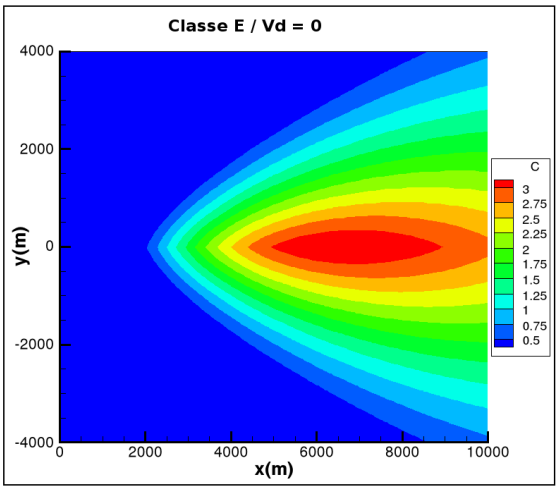


(e) $V_d = 0.05$ (m/s)

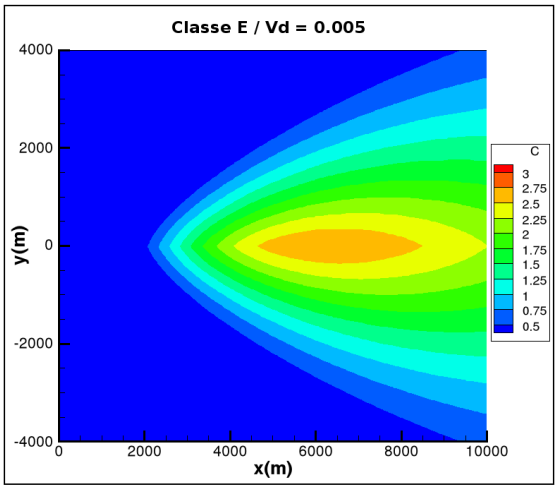


(f) $V_d = 0.2$ (m/s)

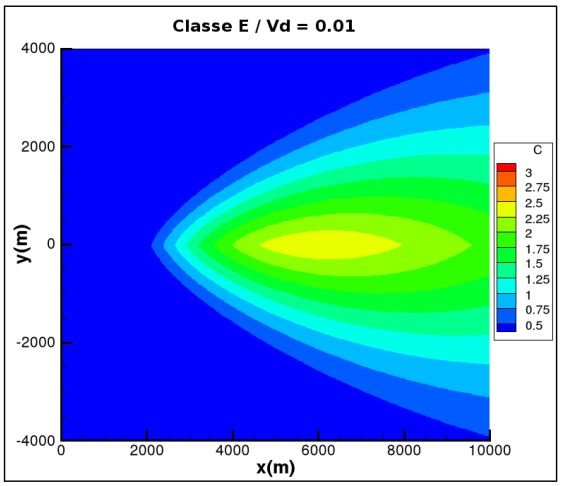
Figura 21: Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo para diferentes valores da deposição seca em condições fracamente instáveis (Classe C).



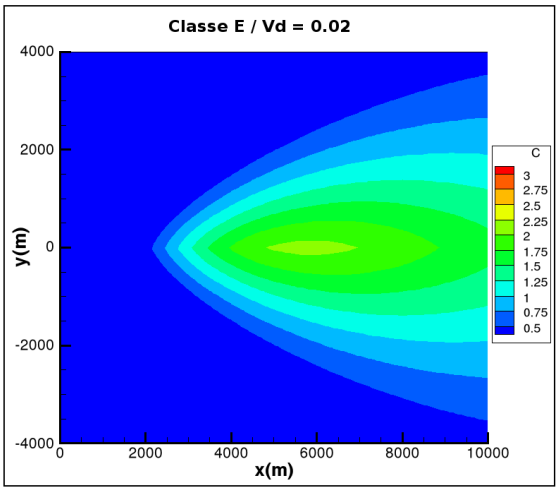
(a) sem deposição



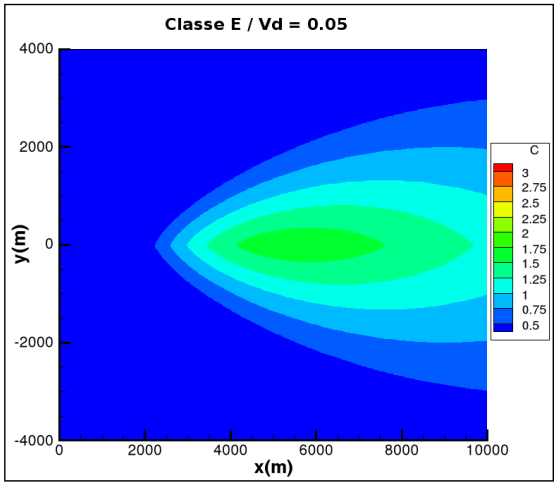
(b) $V_d = 0.005$ (m/s)



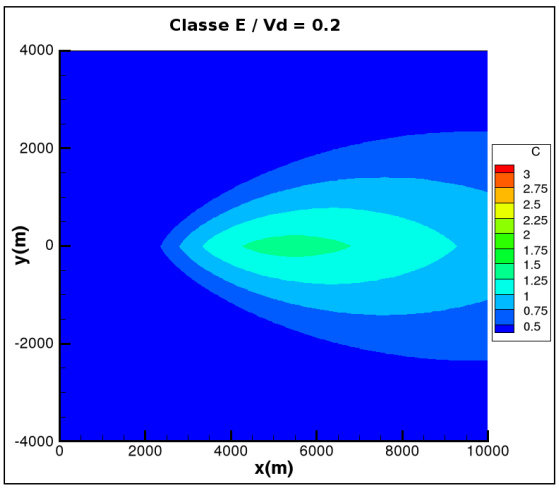
(c) $V_d = 0.01$ (m/s)



(d) $V_d = 0.02$ (m/s)



(e) $V_d = 0.05$ (m/s)



(f) $V_d = 0.2$ (m/s)

Figura 22: Cortes transversais de concentrações-xy a nível do solo para diferentes valores da deposição seca em condições estáveis (Classe E).

9 CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi realizada uma análise do efeito da velocidade de deposição seca no solo na distribuição da concentração de poluição atmosférica, através de simulações multidimensionais da dispersão difusiva e transporte advectivo de poluentes, em diferentes classes de estabilidade considerando a velocidade de deposição de partículas.

As concentrações de poluentes liberadas por fontes contínuas foram obtidas resolvendo a equação de advecção-difusão em estado estacionário considerando a deposição seca do poluente como uma condição de contorno de fluxo não nulo no solo. Primeiramente, foi obtida a solução da equação bidimensional através do ADMM e posteriormente foi obtida a resolução da equação tridimensional pelo GIADMT.

O desempenho da solução bidimensional foi avaliado estatisticamente considerando condições atmosféricas estáveis utilizando uma formulação teórica para a velocidade de deposição no solo. Diferentes parametrizações da turbulência tanto para o coeficiente de difusão lateral quanto para o perfil do vento foram utilizadas. Para esta avaliação foi realizada uma análise estatística entre os dados medidos no Experimento de Hanford (DORAN; HORST, 1985) e os resultados do modelo aqui apresentado.

Observando o comportamento da solução do modelo bidimensional via ADMM (equação (6.46)) e os resultados obtidos comparando com dados experimentais apresentados no decorrer do presente trabalho, pode-se afirmar que o modelo simulou satisfatoriamente as concentrações observadas no experimento de Hanford independente da parametrização utilizada. Ainda, pode-se afirmar que os melhores resultados foram obtidos ao considerar o perfil de vento potência (equação (7.5)) e o coeficiente de difusão vertical de HANNA (1982) (equação (7.4)) conforme tabela 7.

A partir da validação do modelo bidimensional o próximo passo foi investigar a influência da velocidade de deposição seca na concentração de poluentes em diversas classes de estabilidade nos modelos bidimensional e tridimensional. Para este estudo, foram testados seis valores diferentes para a velocidade de deposição seca em três cenários que descrevem a estabilidade atmosférica: fortemente instável, fracamente instável e estável denotados respectivamente por classe A, classe C e classe E (de

acordo com a classificação de Pasquill - tabela 1).

Através de uma análise geral dos resultado das simulações multidimensionais aqui apresentadas pôde-se concluir que a deposição seca é um fenômeno local que influencia fortemente a distribuição das concentrações de poluição do ar e as concentrações máximas próximos do solo.

Ainda, foi possível concluir que quando o valor da velocidade de deposição aumenta o valor da concentração máxima diminui e a posição deste valor máximo localiza-se mais próximo da fonte de emissão do poluente em uma atmosfera instável e mais distante da fonte nos casos menos convectivos. E quanto menor for a instabilidade da atmosfera, relacionada com o fenômeno de deposição, o valor de máxima concentração e a posição do máximo de concentração sofrerá uma mudança maior.

Sendo assim, pode-se afirmar que o objetivo principal desta dissertação foi atingido, uma vez que, através da resolução da equação de advecção-difusão estacionária multidimensional considerando a velocidade de deposição seca no solo foi possível estimar e simular a dispersão de poluentes na atmosfera. Além disso, as simulações aqui apresentadas permitiram realizar o estudo e a análise da influência da deposição de partículas na dispersão de poluentes, tornando possível a investigação do decaimento da concentração nas diferentes classes de estabilidade na Camada Limite Planetária.

Acredita-se que o grande impacto deste trabalho é na contribuição qualitativa e quantitativa para o desenvolvimento da pesquisa na dispersão de poluentes, visto que considerando a velocidade de deposição seca no solo na equação de advecção-difusão possibilita um melhor entendimento dos processos envolvidos na dispersão difusiva e transporte advectivo de poluentes na atmosfera.

Este trabalho contribui do ponto de vista da formulação matemática e computacional na solução e tratamento de problemas da dispersão de poluentes através da abordagem ADMM e GIADMT. Contribui com o avanço científico a partir da aplicação do cálculo da dispersão de poluentes, na busca de analisar o estado da qualidade do ar e avaliar os campos elevados de concentração a partir da determinação da posição e do valor da concentração máxima.

Como trabalhos futuros, sugere-se aprimorar o modelo matemático, incluindo uma variação temporal da concentração, na equação de advecção-difusão bidimensional e tridimensional, a fim de analisar o tempo de decaimento da concentração nas diferentes classes de estabilidade atmosférica. Ainda, devido às incertezas nas medições experimentais da velocidade de deposição, já discutidas nesta dissertação, sugere-se determinar a velocidade de deposição utilizando a técnica de problemas inversos.

Os trabalhos desenvolvidos a partir do estudo e dos resultados desta dissertação foram apresentados e publicados em eventos da área e estão listados a seguir. Destaca-se que o trabalho Comparação de Diferentes Métodos de Inversão Numérica para a Transformada de Laplace na Equação de Advecção-Difusão, apresentado no

XVII ENPOS - Encontro de Pós-Graduação 2015, recebeu destaque com o 1º lugar na área de Ciências Exatas na I Semana de Ensino, Pesquisa e Extensão realizado na UFPel.

- Trabalhos publicados em anais de congressos:
  - RUI, K.; COSTA, C. P.. Análise da Influência da Velocidade de Deposição Seca na Dispersão de Poluentes Atmosféricos em Diversas Classes de Estabilidade. In: XXXVI Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE 2015), 2015, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. Proccedings of CILAMCE 2015.
  - RUI, K.; COSTA, C. P. Solução da equação de advecção-difusão tridimensional pelo método GIADMT para dois termos de contragradiente. In: IX Workshop Brasileiro de Micrometeorologia, Santa Maira, 2015.
  - RUI, K.; COSTA, C. P.. Comparação de Diferentes Métodos de Inversão Numérica para a Transformada de Laplace na Equação de Advecção-Difusão. In: XVII Encontro de Pós-Graduação (ENPOS/UFPel), 2015, Pelotas/RS. Anais do XVII ENPOS 2015.
- Artigo aceito para publicação:
  - RUI, K.; COSTA, C. P.. Solução da equação de advecção-difusão tridimensional pelo método GIADMT para dois termos de contragradiente. Ciência e Natura, 2015.

REFERÊNCIAS

ABATE, J.; VALKÓ, P. P. Multi-precision Laplace transform inversion. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, [S.l.], v.60, n.5, p.979–993, 2004.

ARYA, S. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. New York: Oxford University Press, 1999. 310p.

BUSINGER, J. A. Evaluation of the accuracy with which dry deposition can be measured with current micrometeorological techniques. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, [S.l.], v.25, p.1100–1124, 1986.

CALDER, K. L. Atmospheric Diffusion of Particulate Material, Considered as a Boundary Value Problem. **Journal of Meteorology**, [S.l.], v.18, p.413–415, 1961.

CHAMBERLAIN, A. C. **Aspects of Travel and Deposition of Aerosol and Vapour Clouds**. Harwell, Berkshire, United Kingdom: UKAEA Rep. AERE-HP/R-1261, 1953. 35p.

CHAMBERLAIN, A. C.; CHADWICK, R. C. Deposition of Airborne Radio-Iodine Vapor. **Nucleonics**, [S.l.], v.8, p.22–25, 1953.

CHAMBERLAIN, A. C.; CHADWICK, R. C. Transport of Iodine from Atmosphere to Ground. **Tellus XVIII**, [S.l.], v.2, p.226–237, 1966.

CHANDRA, P.; JAIPAL; K., K. V. Mathematical Model for Dispersion of Air Pollutant Considering Settling of Particles and Dry Deposition. In: **International Journal of Mathematical Sciences and Applications**. [S.l.: s.n.], 2011. v.1, n.3, p.1591–1595.

CHANTARA, S.; CHUNSUK, N. Comparison of wet-only and bulk deposition at Chiang Mai (Thailand) based on rainwater chemical composition. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.42, n.22, p.5511–5518, 2008.

CHRYSIKOPOULOS, C. V.; HILDEMANN, L. M.; ROBERTS, P. V. A three-dimensional steady-state atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source. **Atmospheric Environment. Part A. General Topics**, [S.l.], v.26, n.5, p.747–757, 1992.

COSTA, C. P.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. A Comparison Between an Analytical and Semi-Analytical Solution of the Steady-State Two-Dimensional Advection-Diffusion Equation with Deposition at the Ground. In: XXVII CILAMCE - IBERIAN LATIN-AMERICAN CONGRESS ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING, 2007. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2007.

COSTA, C. P. d. **Simulação da Dispersão de Poluentes Através da Solução da Equação de Difusão-Advecção Tridimensional Transiente pela Técnica GIADMT**. 2007. Tese de Doutorado — Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

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

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

COURANT, R.; HILBERT, D. Methods of Mathematical Physics. **John Wiley & Sons**, [S.l.], 1989.

CRUMP, K. S. Numerical Inversion of Laplace Transforms Using a Fourier Series Approximation. **The Journal of the Association for Computing Machinery**, [S.l.], v.23, p.89–96, 1976.

CSANADY, G. T. Dispersal of Dust Particles from Elevated Sources. **Australian Journal of Physics**, [S.l.], v.8, p.545–550, 1955.

CSANADY, G. T. Dispersal of Dust Particles from Elevated Sources - II. Limitations of the Approximate Theory. **Australian Journal of Physics**, [S.l.], v.10, p.558–564, 1957.

CSANADY, G. T. Deposition of Dust Particles from Industrial Stacks. **Australian Journal of Physics**, [S.l.], v.9, p.1–8, 1958.

DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. F. Turbulence Parameterisation for PBL Dispersion Models in all Stability Conditions. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.34, p.3575–3583, 2000.

DEGRAZIA, G.; RIZZA, U.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T. Validation of a New Turbulent Parameterization for Dispersion Models in Convective Conditions. **Boundary-Layer Meteorology**, [S.l.], v.85, n.2, p.243–254, 1997.

DORAN, J. C.; ABBEY, O. B.; BUCK, J. W.; GLOVER, D. W.; HORST, T. W.; LEE, R. N.; LLOYD, F. D. **Field Validation of Exposure Assessment Models**. United States: Environmental Protection Agency, Environmental Sciences Research Laboratory, 1984.

DORAN, J.; HORST, T. An evaluation of Gaussian plume-depletion models with dual-tracer field measurements. **Atmospheric Environment (1967)**, [S.l.], v.19, n.6, p.939–951, 1985.

ERISMAN, J. A. N. W.; BEIER, C.; DRAAIJERS, G.; LINDBERG, S. Review of deposition monitoring methods. **Tellus B**, [S.l.], v.46, n.2, p.79–93, 1994.

ERMAK, D. L. An analytical model for air pollutant transport and deposition from a point source. **Atmospheric Environment (1967)**, [S.l.], v.11, n.3, p.231–237, 1977.

ESSA, K. S.; ETMAN, S. M.; EMBABY, M. New analytical solution of the dispersion equation. **Atmospheric Research**, [S.l.], v.84, n.4, p.337–344, 2007.

FELICIANO, M. J. S. **Deposição Seca de Poluentes Gasosos em Ecossistemas do Sul da Europa**: Medição e Parametrização. 2001. Tese de Doutorado — Ciências Aplicadas ao Ambiente, Departamento de Ambiente e Ordenamento, Universidade de Aveiro, Aveiro/Portugal.

FOKEN, T.; DLUGI, R.; KRAMM, G. On the determination of dry deposition and emission of gaseous compounds at the biosphere-atmosphere interface. **Meteorologische Zeitschrift**, [S.l.], v.4, p.91–118, 1995.

GALLAGHER, M.; BESWICK, K.; DUYZER, J.; WESTRATE, H.; CHOULARTON, T.; HUMMELSHÃ¸J, P. Measurements of aerosol fluxes to speulder forest using a micrometeorological technique. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.31, n.3, p.359–373, 1997.

GARLAND, J. On the Size Dependence of Particle Deposition. **Water, Air and Soil Pollution: Focus**, [S.l.], v.1, p.323–332, 2001.

HANNA, S. R. Applications in air pollution modeling. In: NIEUWSTADT, F. T. M.; VAN DOP, H. (Ed.). **Atmospheric turbulence and air pollution modelling**. [S.l.]: Dordrecht:Reidel, 1982. p.275–310.

HANNA, S. R. Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.23, n.6, p.1385–1398, 1989.

HEINES, T. S.; PETERS, L. K. The Effect of Ground Level Absorption on the Dispersion of Pollutants in the Atmosphere. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.8, n.11, p.1143–1153, 1974.

HICKS, B. B.; BALDOCCHI, D. D.; MEYERS, T. P.; HOSKER R. P., J.; MATT, D. R. A preliminary multiple resistance routine for deriving dry deposition velocities from measured quantities. **Water, Air, and Soil Pollution**, [S.l.], v.36, p.311–330, 1987.

HORST, T. The modification of plume models to account for dry deposition. **Boundary-Layer Meteorology**, [S.l.], v.30, n.1-4, p.413–430, 1984.

HORST, T. W. A surface depletion model for deposition from a Gaussian plume. **Atmospheric Environment (1967)**, [S.l.], v.11, n.1, p.41–46, 1977.

HORST, T. W. A Review of Gaussian Diffusion-Deposition Models. **Atmospheric Sulfur Deposition**, Ann Arbor Science, Ann Arbor, MI, p.275–283, 1980.

HORST, T. W. A Correction to the Gaussian Source Depletion Model. **Precipitation Scavenging, Dry Deposition and Resuspension**, Elsevier North Holland, Amsterdam, The Netherlands, p.1205–1218, 1983.

HUANG, C. H. On Solutions of the Diffusion-Deposition Equation for Point Sources in Turbulent Shear Flow. **Journal of Applied Meteorology**, [S.l.], v.38, p.250–254, 1999.

IRWIN, J. S. A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.13, n.1, p.191–194, 1979.

KOCH, W. A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption. **Atmospheric Environment (1967)**, [S.l.], v.23, n.8, p.1729–1732, 1989.

KREIDER, D.; R., C.; PERKINS, F. W.; OSTBERG, D. R. **Introdução à Análise Linear**: Equações Diferenciais Lineares. Rio de Janeiro: Ao livro técnico S/A, 1972. v.3.

LIN, J.-S.; HILDEMANN, L. M. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.31, n.1, p.59–71, 1997.

LOVETT, G. M. Atmospheric Deposition of Nutrients and Pollutants in North America: An Ecological Perspective. **Ecological Applications**, [S.l.], v.4, n.4, p.629–650, 1994.

MANGIA, C.; MOREIRA, D.; SCHIPA, I.; DEGRAZIA, G.; TIRABASSI, T.; RIZZA, U. Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent Eulerian spectra

in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.36, n.1, p.67–76, 2002.

MCMAHON, T. A.; DENISON, P. J. Empirical atmospheric deposition parameters - A survey. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.13, n.5, p.571–585, 1979.

MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mizing in the surface layer of the atmosphere. **Tr. Geofis. Inst. Akad. Nauk SSSR**, [S.l.], v.151, p.163–187, 1954.

MONIN, A. S.; YAGLOM, A. M. **Statistical Fluid Mechanics**. Cambridge: Mit Press, 1971.

MORAES, M. R. **Implementação de uma ferramenta para a previsão de vento e dispersão de poluentes na micro-escala atmosférica**. 2004. Tese de Doutorado — Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis/SC.

MORAES, O. L. L. d. **Meteorologia e poluição atmosférica**: teoria, experimentos e simulação. Santa Maira, RS: FACOS-UFSM, 2010.

MOREIRA, D. M.; GOULART, A. G.; MORAES, M. R. d. A model employing integral transform method to simulate pollutant dispersion in atmosphere. **Revista Brasileira de Meteorologia**, [S.l.], v.28, p.373–381, 2013.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BUSKE, D. Comparison Between Analytical Models to Simulate Pollutant Dispersion in the Atmosphere. **International Journal of Environment and Waste Management**, [S.l.], v.6, n.3, p.327–344, 2010a.

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Modelo Matemático de Dispersão de Poluentes na Atmosfera: Um Instrumento Técnico para a Gestão Ambiental. **Ambiente & Sociedade**, [S.l.], v.7, n.2, p.159–172, 2004.

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M.; GOULART, A. A multi-layer model for pollutant dispersion with dry deposition to the ground. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.44, n.15, p.1859–1865, 2010b.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; TIRABASSI, T.; COSTA, C.; BODMANN, B. Simulation of Pollutant Dispersion in the Atmosphere by the Laplace Transform: The ADMM Approach. **Water, Air, & Soil Pollution**, [S.l.], v.177, n.1-4, p.411–439, 2006.

NACHBIN, A.; TABAK, E. **Equações Diferenciais em Modelagem Matemática e Computacional**. Rio de Janeiro, RJ, Brasil: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 1997.

NICHOLSON, K. The dry deposition of small particles: A review of experimental measurements. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.22, n.12, p.2653–2666, 1988.

OVERCAMP, T. J. A general Gaussian diffusion-deposition model for elevated point sources. **Journal of Applied Meteorology**, [S.l.], v.15, p.1167–1171, 1976.

ÖZISIK, M. **Heat Conduction**. 2.ed. New York: John Wiley & Sons, 1974.

PANOFSKY, H. A.; DUTTON, J. A. **Atmospheric turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1984. 396p.

PASQUILL, F. The estimation of the dispersion of windborne material. **Meteorological Magazine**, [S.l.], v.90, p.33–49, 1961.

PASQUILL, F. **Atmospheric Diffusion**. 2.ed. New York: Halsted Press, Wiley, 1974.

PAULSON, C. A. The Mathematical Representation of Wind Speed and Temperature Profiles in the Unstable Atmospheric Surface Layer. **Journal of Applied Meteorology**, [S.l.], v.9, p.857–861, 1970.

POPESCU, F.; IONEL, I. Anthropogenic Air Pollution Sources. In: **Air Quality**. [S.l.]: Sciyo, 2010.

RAO, K. S. **Analytical solutions of a gradient-transfer model for plume deposition and sedimentation**. Air Resources Laboratories: NOAA Tech. Memo. ERL ARL-109, 1981. 75p.

RUI, K.; COSTA, C. P. d. Comparação de Diferentes Métodos de Inversão Numérica para a Transformada de Laplace na Equação de Advecção-Difusão. In: XVII ENCONTRO DE PÓS GRADUAÇÃO - ENPOS, UFPEL, 2015. **Anais...** [S.l.: s.n.], 2015.

RUIJGROK, W.; TIEBEN, H.; EISINGA, P. The dry deposition of particles to a forest canopy: A comparison of model and experimental results. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.31, n.3, p.399–415, 1997.

SEHMEL, G. A. Particle and gas dry deposition: A review. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.14, n.9, p.983–1011, 1980.

SEHMEL, G. A. Deposition and Resuspension. In: **Atmospheric Science and Power Production**. U. S.: Departament of energy, Technical Information Center, Oak Ridge, TN, 1984. p.533–583.

SEINFELD, J. H. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**. New York: John Willey & Sons, 1986.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric chemistry and physics**: from air pollution to climate change. New York: [s.n.], 1997. 1326ppp.

SILVA, A. A.; SOUZA ECHER, M. P. Ground-based measurements of local cloud cover. **Meteorology and Atmospheric Physics**, [S.l.], v.120, n.201-212, 2013.

SMITH, F. B. The Problem of Deposition in Atmospheric Diffusion of Particulate Matter. **J. Atmos. Sci.**, [S.l.], v.19, p.429–434, 1962.

SMITH, R. Advection, Diffusion, and Deposition From Distributed Sources. **Boundary–Layer Meteorology**, [S.l.], v.107, n.2, p.273–287, 2003.

SOUZA ECHER, M. P.; MARTINS, F. R.; PEREIRA, E. B. A Importância dos Dados de Coberturas de Nuvens e de sua Variabilidade - Metodologias para Aquisição de Dados. **Revista de Ensino de Física**, [S.l.], v.28, p.341–352, 2006.

STROUD, A. H.; SECREST, D. **Gaussian Quadrature Formulas**. [S.l.]: Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1966.

STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht, Holanda: Kluwer Academic Publishers, 1988.

SUTTON, O. G. The Theoretical Distribution of Airborne Pollutants from Factory Chimney Stacks. **Quart. J. Roy. Meteorology Soc.**, [S.l.], v.73, p.426–436, 1947.

TALBOT, A. The accurate numerical inversion of Laplace transforms. **Journal of the Institute of Mathematics and Its Applications**, [S.l.], v.23, n.97-120, 1979.

TENNEKES, H. **First course in turbulence**. Massaschussets, USA: Cambridge: Massaschussets Institute Technology Press, 1972.

TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. A two–dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, [S.l.], v.47, n.8, p.2096–2104, 2008.

ULKE, A. G. New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.34, p.1029–1042, 2000.

WALCEK, C. A theoretical estimate of O_3 and H_2O_2 dry deposition over the northeast United States. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.21, n.12, p.2649–2659, 1987.

WESELY, M. L.; HICKS, B. B. Some factors that affect the deposition rates of sulfur dioxide and similar gases on vegetation. **J. Air. Poll. Control Assoc.**, [S.l.], v.27, p.1110–1116, 1977.

WESELY, M. L.; HICKS, B. B. A review of the current status of knowledge on dry deposition. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.34, p.2261–2282, 2000.

ZANNETTI, P. **Air Pollution Modelling**. Southampton: Computational Mechanics Publications, 1990. 444p.

ZHANG, L.; BROOK, J. R.; VET, R. On ozone dry deposition - with emphasis on non-stomatal uptake and wet canopies. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.36, n.30, p.4787–4799, 2002.

ZHANG, L.; BROOK, J. R.; VET, R. A revised parameterization for gaseous dry deposition in air-quality models. **Atmospheric Chemistry and Physics**, [S.l.], v.3, n.6, p.2067–2082, 2003a.

ZHANG, L.; BROOK, J. R.; VET, R. Evaluation of a non-stomatal resistance parameterization for SO_2 dry deposition. **Atmospheric Environment**, [S.l.], v.37, n.21, p.2941–2947, 2003b.