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

Dissertação

Modelagem da Dispersão de Poluentes Utilizando o Modelo 3D-GILTT

Marcos Antonio Carraro

Pelotas, 2015

Marcos Antonio Carraro

Modelagem da Dispersão de Poluentes Utilizando o Modelo 3D-GILTT

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.

Orientador: Profª. Drª. Daniela Buske
Coorientador: Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho

Pelotas, 2015

C313m Carraro, Marcos Antonio

Modelagem da Dispersão de Poluentes Utilizando o Modelo 3D-GILTT / Marcos Antonio Carraro. – 72f. : il. – Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática.Universidade Federal de Pelotas. Instituto de Física e Matemática, 2015. – Orientadora Daniela Buske ; coorientador Jonas da Costa Carvalho.

1.Poluição do ar. 2.Solução analítica. 3.Modelagem da dispersão de poluentes. I.Buske, Daniela. II.Carvalho, Jonas da Costa. III.Título.

CDD: 571.956

Banca examinadora:

Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Prof. Dr. Bardo Bodmann

Prof. Dr. Marcelo Félix Alonso

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros

RESUMO

CARRARO, Marcos Antonio. **Modelagem da Dispersão de Poluentes Utilizando o Modelo 3D-GILTT**. 2015. 71 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2015.

Na presente dissertação é apresentada uma solução analítica para a equação de advecção-difusão tridimensional transiente para a simulação da dispersão de poluentes na atmosfera. Para tanto, a equação de advecção-difusão é resolvida pela combinação da transformada de Laplace e da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*), com fechamento fickiano da turbulência. Para validação do modelo, os resultados numéricos e estatísticos obtidos são comparados com resultados experimentais da literatura (Copenhagen e Kinkaid). Na simulação de uma camada limite turbulenta mais realística, será considerada uma situação de liberação de poluentes onde as variáveis micrometeorológicas do evento são calculadas utilizando o WRF. Sendo assim, é analisado um caso crítico de poluição produzido por emissões provenientes de queimadas. Devido à complexidade desse tipo de evento, algumas modificações são realizadas no modelo.

Palavras-chave: Poluição do Ar, Solução Analítica, Modelagem da Dispersão de Poluentes.

ABSTRACT

CARRARO, Marcos Antonio. **Modeling Pollutant Dispersion Using a Model 3D-GILTT**. 2015. 71 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2015.

This dissertation presents an analytical solution for the transient three-dimensional advection-diffusion equation in order to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. Therefore, the advection-diffusion equation is solved by combination of Laplace's transform and GILTT technique (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) with Fickian closure of turbulence. For model validation, numerical and statistical results are compared with experimental results from literature (Copenhagen and Kinkaid). In the simulation of a more realistic turbulent boundary layer, will be considered one situation of pollutant release where micrometeorological components are calculated using WRF *(Weather Research and Forecast)*. Therefore is considered a critical event of pollution resultant of emissions from burnings. Due to the complexity of this type of event, some modifications are made in the model.

Keywords: Analytical Solution, Air Poluttion, Dispersion Modeling Pollutant.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Experimento de Copenhagen. 36
Figura 2 Concentração ao nível do solo pela solução tridimensional para diferentes alturas de fontes em condição convectiva $(1/L = -0.01)$. . 39
Figura 3 Concentração adimensional $(C = cuz_i^2/Q)$ em função da distância adimensional $(X = xu_*/uz_i)$ a partir de uma fonte $(H_s = 0.1z_i)$ para 5 diferentes condições meteorológicas. 40
Figura 4 Concentração $(C^* = cuz_i^2/Q)$ em relação a altura $(Z^* = z/z_i)$ em condições convectivas $(1/L = -0.01)$ para três diferentes distâncias da fonte $(X^* = xw_*/uz_i)$ e duas alturas de fontes $(H_s = 0.05z_i$ e $0.1z_i)$. 41
Figura 5 Concentração $(C^* = cuz_i^2/Q)$ em relação a altura $(Z^* = z/z_i)$ em condições convectivas $(1/L = -0.01)$ para três diferentes distâncias da fonte $(X^* = xw_*/uz_i)$ e duas alturas de fontes $(H_s = 0.25z_i$ e $0.5z_i)$. 42
Figura 6 Diagrama de espalhamento das concentrações observadas e preditas ao nível do solo utilizando o método 3D-GILTT para o experimento de Copenhagen. 43
Figura 7 Diagrama de espalhamento das concentrações observadas e preditas ao nível do solo utilizando o método 3D-GILTT para o experimento de Kinkaid. 44
Figura 8 Regressão linear para a GILTTG (círculos) e 3D-GILTT (estrela) utilizando os dados de Copenhagen. A reta bissetriz foi inserida como uma guia visual. 46
Figura 9 Regressão linear para a GILTTG (círculos) e 3D-GILTT (estrela) utilizando os dados de Kinkaid. A reta bissetriz foi inserida como uma guia visual. 46

Figura 10 Principais mecanismos físicos de redistribuição de emissões de queimadas na atmosfera. Fonte: (FREITAS et al., 2005) 49
Figura 11 Acumulado de focos de queima durante o mês de agosto de 2010. Fonte: CPTEC/INPE 50
Figura 12 Representação esquemática do sistema de modelagem do WRF. Fonte: (IRIART; CARVALHO; PAREIRA NETO, 2011) 51
Figura 13 Magnitude (m/s) e campo do vento médio do dia 20 a 22 de agosto de 2010 simulados pelo WRF. 54
Figura 14 Magnitude (m/s) e campo do vento médio do dia 20 a 22 de agosto de 2010 simulados pelo WRF. 55

Figura 15 Isolinhas de concentração tridimensional preditas pelo modelo ($C^* = \bar{c}uz_i/Q$, $X^* = xw_*/uz_i$, $Z^* = z/z_i$) para o dia 21.08.10 às 24h. 58
Figura 16 Gráfico do fluxo de poluentes em relação a variação Δ_h da camada limite. 59
Figura 17 Gráfico da concentração em relação a altura $z_i + \Delta_h$ da camada limite. 59

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen (GRYNING et al., 1987). 36
Tabela 2 Parâmetros meteorológicos para o experimento de Kinkaid (HANNA; PAINE, 1989). T_a é a temperatura ambiente, T_i é a temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma na saída da chaminé. 38
Tabela 3 Expoente do perfil de vento potência (α) e a inversão do valor do comprimento de Obukhov $(1/L)$ para diferentes condições meteorológicas. 40
Tabela 4 Comparação estatística entre os modelos usando os dados de Copenhagen. 44
Tabela 5 Comparação estatística entre os modelos usando os dados de Kinkaid. 44
Tabela 6 Comparação da regressão linear da GILTTG e 3D-GILTT para o experimento de Copenhagen. 45
Tabela 7 Comparação da regressão linear da GILTTG e 3D-GILTT para o experimento de Kinkaid. 45
Tabela 8 Parâmetros meteorológicos gerados pela simulação do WRF para o dia 20 de agosto de 2010. 52

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

A, B	matriz de coeficientes do problema transformado
A_k	pesos da quadratura Gaussiana
$\tilde{c}_n, \tilde{c}_i$	coeficientes da expansão por série na GILTT
$\bar{c}$	concentração média do contaminante passivo (g/m^3)
C_o	concentrações observadas experimentalmente
C_p	concentrações preditas pelo modelo
CLA	camada limite atmosférica
CLP	camada limite planetária
CLE	camada limite estável
CLC	camada limite convectiva
COR	coeficiente de correlação
D	matriz diagonal dos autovalores da matriz F de coeficientes do problema transformado
E, F	matriz de coeficientes do problema transformado
FB	fração de inclinação
FS	desvio fracional padrão
$G(x, s)$	matriz da transformada inversa de $(rI + D)^{-1}$
H_s	altura da fonte
I	matriz identidade
k	constante de Von-Kármán
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)
K_α	coeficiente de difusão onde α indica as direções x, y e z (m^2/s)
L	comprimento de Obukhov (m)
L_x	distância da condição de contorno para a direção x

L_y	distância da condição de contorno para a direção y
M	ordem da quadratura Gaussiana
N	número de autovalores
$NMSE$	erro quadrático médio normalizado
P_k	raízes da quadratura Gaussiana
Q	intensidade da fonte (g/s)
r	variável transformada $(x \to r)$
S	termo fonte
s	variável transformada $(t \to s)$
t	tempo (s)
u_*	velocidade de fricção (m/s)
$\overline{u}$	velocidade média do vento orientado na direção x (m/s)
$\overline{u_1}$	velocidade média do vento analisada na altura z_1
$\overline{v}$	velocidade média do vento orientado na direção y (m/s)
$\overline{w}$	velocidade média do vento orientado na direção z (m/s)
V_g	velocidade de deposição (m/s)
$V_{g_{top}}$	velocidade do poluente que passa da CLA (m/s)
w_*	escala de velocidade convectiva (m/s)
x	distância longitudinal da fonte (m)
X	matriz dos autovetores da matriz F de coeficientes do problema transformado
X^{-1}	matriz inversa de X
y	distância latitudinal da fonte (m)
$Y(x,s)$	vetor de incógnitas do problema transformado
$\overline{Y}(r,s)$	transformada de Laplace aplicada em $Y(x,s)$
z	altura acima da superfície (m)
z_0	comprimento de rugosidade aerodinâmico (m)
z_i	altura da camada limite convectiva (m)
$\delta_{n,m}, \beta_{n,m}$	matriz auxiliar
Δ_h	incremento da altura da CLA (m)
ΔH	efeito de ascensão da pluma
δ	funcional delta de Dirac
η	variável auxiliar
λ_n, μ_i	autovalores dos problemas de Sturm-Liouville
ξ_i, ζ_n	autofunções dos problemas de Sturm-Liouville

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 12

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 14

3 MODELO MATEMÁTICO 19
3.1 Dedução da Equação de Advecção-Difusão 19
3.2 Solução via GILTT 22

4 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA 31
4.1 Coeficiente de Difusão 31
4.2 Ascensão da Pluma 33
4.3 Perfil do Vento 34

5 VALIDAÇÃO DO MODELO COM DADOS EXPERIMENTAIS 35
5.1 Dados Experimentais 35
5.1.1 Experimento de Copenhagen (Dinamarca) 35
5.1.2 Experimento de Kinkaid (Illinois, USA) 36
5.2 Índices Estatísticos 37
5.3 Resultados 39

6 SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM CASO DE QUEIMADAS 47
6.1 Queimadas 47
6.2 WRF 50
6.3 Campo de Vento 53
6.4 Coeficiente de Difusão 53
6.5 Modificações a Serem Feitas no Modelo e Resultados Preliminares . 57
6.5.1 Modificação da Condição de Contorno 57
6.5.2 Modificação da Altura da CLA 58

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS 60

REFERÊNCIAS 62

1 INTRODUÇÃO

Neste trabalho será apresentado um modelo analítico que obtém uma solução para a equação de advecção-difusão tridimensional transiente, para a simulação da dispersão de poluentes na atmosfera. Para tanto, a equação de advecção-difusão será resolvida pela combinação da transformada de Laplace e da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*), com fechamento fickiano da turbulência.

Estudos sobre a qualidade do ar com abordagens formais, qualitativas, são recentes na literatura e vem ganhando força nas últimas décadas, devido ao aumento de emissões de poluentes na atmosfera, provocados pelo crescimento industrial e desenvolvimento tecnológico. São muitos os problemas que a poluição, produzida por atividades antropogênicas, ocasiona para o equilíbrio ecológico: nas proximidades das fontes, gases e partículas abandonados na atmosfera diminuem a qualidade do ar em regiões urbanas, agrícolas e industriais; a média ou longa distância há o transporte transfronteiriço e a formação da chuva ácida e; em escala global, a formação do buraco na camada de ozônio. Devido a todos esses problemas ocasionados pela poluição do ar, torna-se necessário estudar e entender o processo de dispersão de poluentes, produzindo ferramentas capazes de auxiliar no entendimento dos diversos casos que envolvem essa área de pesquisa.

O transporte dos materiais emitidos para a atmosfera acontece principalmente dentro da camada limite atmosférica (CLA) ou camada limite planetária (CLP). O aquecimento e/ou resfriamento da terra provoca variação da temperatura e do vento na camada limite; esta variação faz com que a substância que é emitida na atmosfera se disperse através da difusão turbulenta; sendo assim, o transporte das partículas é dominado na horizontal pelo vento médio (advecção) e na vertical pela turbulência; e como consequência, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera é, geralmente, descrito pela equação de advecção-difusão.

Existem duas abordagens para representar o fluxo e a difusão em um fluido: a Euleriana e a Lagrangiana. A principal diferença entre os dois modelos é o sistema referencial, ou seja, o sistema de referência Euleriano é fixo em relação à Terra, enquanto o Lagrangiano segue a velocidade instantânea do fluido (ANFOSSI, 2005). Os mode-

los eulerianos são de caráter determinísticos, isto é, predizem a concentração de um poluente em um volume, enquanto que os modelos lagrangianos são probabilísticos, isto é, predizem a probabilidade que uma dada partícula seja encontrada em uma dada posição. A abordagem Euleriana é a utilizada nos estudos desta dissertação.

Devido ao caráter turbulento do campo de vento na CLA, torna-se extremamente difícil o estudo da dispersão e do transporte de contaminantes na atmosfera. Ainda, devido à complexidade da turbulência, o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera emprega modernas metodologias disponíveis na comunidade científica. Neste aspecto, ferramentas teóricas e dados observacionais são combinados com simulações numéricas, com o objetivo de compreender e descrever, de uma maneira mais adequada, o fenômeno de transporte turbulento. As ferramentas teóricas são ainda hoje um desafio, uma vez que a dispersão de poluentes ocorre em um campo turbulento que possui um número infinito de graus de liberdade. Simplificações nas equações são obtidas e validadas por experimentos de campo que auxiliam na compreensão do processo de difusão. Neste contexto, os modelos matemáticos trabalhados tornam-se instrumentos úteis no entendimento dos fenômenos que controlam o transporte e a dispersão dos poluentes na atmosfera.

Nesta dissertação utiliza-se o método matemático GILTT. Este é tipicamente empregado para modelar eventos de dispersão de poluentes que ocorrem dentro da CLA, ou seja, aplicado para sistemas dimensionais de microescala. Durante os estudos, este modelo foi aplicado em uma situação onde a fonte emissora está associada a queimadas. Deve-se levar em consideração que neste tipo de emissão o produto gerado, além de ter efeitos em microescala, tem grande parte de seu transporte em sistemas de mesoescala. Este é um dos fatos para a ocorrência dos erros nos resultados durante a metodologia elaborada, onde emprega-se um modelo de microescala para modelar um sistema de mesoescala.

O presente trabalho está estruturado da seguinte forma: no capítulo 2 é feita uma breve revisão bibliográfica sobre os principais estudos na área de dispersão de poluentes. No capítulo 3 é estudado o modelo matemático utilizado para a obtenção da solução do problema proposto. O capítulo 4 apresenta as parametrizações da turbulência utilizadas no modelo. Os dados experimentais, para obtenção dos resultados numéricos e validação do modelo, são apresentados no capítulo 5. No capítulo 6 é realizada uma análise preliminar em relação a dispersão de poluentes produzidos por focos de queimadas; é apresentada uma breve descrição do WRF, utilizado para calcular as variáveis micrometeorológicas utilizadas no modelo; em seguida, o campo de vento e o coeficiente de difusão, além de alterações no modelo que devem ser consideradas a fim de tornar os resultados coerentes com a física do problema, obtendo assim resultados preliminares que são apresentados no final do capítulo. Conclusões e perpectivas para continuação deste trabalho são discutidas no capítulo 7.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na Literatura é encontrada uma grande variedade de soluções numéricas da equação de advecção-difusão (NIEUWSTADT; VAN ULDEN, 1978) (LAMB, 1978) (CARVALHO, 1996). Embora existam análises avançadas em soluções numéricas, o estudo de soluções analíticas para resolver e sistematizar problemas de dispersão é uma das principais linhas de pesquisa nesta área, pois durante a solução, todos os parâmetros aparecem explícitos, facilitando a investigação de suas influências e obtenção do comportamento assintótico da solução, que, as vezes, é difícil gerar via cálculos numéricos.

A primeira solução da equação de advecção-difusão foi a solução Gaussiana, devido a Fick, na segunda metade do século XIX. Modelos baseados nesse tipo de solução, chamados de modelos Gaussianos, usam parâmetros de dispersão empíricos, de modo a forçar a solução Gaussiana a representar o campo de concentração. Assim, nesse tipo solução, o coeficiente de difusão na direção z e a velocidade do vento são constantes com a altura, e são consideradas as condições de contorno de fluxo nulo de poluentes na parte inferior e superior da camada limite planetária (CLP):

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0 \;\; e \;\; z \to \infty \tag{1}$$

Uma solução bidimensional para fontes ao nível do solo foi apresentada por (ROBERTS, 1923), onde a velocidade do vento e o coeficiente de difusão $K_z(m^2/s)$ seguem leis de potência como uma função da altura, ou seja:

$$u = u_1(\frac{z}{z_1})^m \quad ; \quad K_z = K_1(\frac{z}{z_1})^n \tag{2}$$

sendo z_1 a altura na qual u_1 e K_1 são analisados, os expoentes m e n estão relacionados, respectivamente, com a instabilidade atmosférica e a rugosidade da superfície (IRWIN, 1979).

(ROUNDS, 1955) obteve uma solução bidimensional para fontes elevadas, com o mesmo perfil de vento porém, somente para perfis lineares de K_z. Em 1957, Smith

resolveu a equação de transporte e difusão bidimensional (SMITH, 1957a), sendo u e K_z funções de potência da altura, com expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt $(\alpha = 1 - \beta)$. (SMITH, 1957b) apresenta uma outra solução com u constante, contudo o K_z usado foi:

$$K_z = K_0 z^{\alpha}(z_i - z)^{\beta} \tag{3}$$

onde K_0 é uma constante, α e β valem 0 ou 1 de acordo com a altura da camada limite z_i.

Para o transporte de longa escala de poluentes, (SCRIVEN; FISHER, 1975) apresentam uma solução, que é amplamente usada no Reino Unido, onde considera-se u constante e K_z como

$$K_z \equiv z \quad para \quad 0 \leq z \leq z_t \quad e \quad K_z = K_z(z_t) \quad para \quad z_t \leq z \leq z_i \tag{4}$$

na qual $z_t(m)$ é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada superficial). Assumindo um fluxo líquido de material para o solo, a solução de Scriven e Fisher tem como condição de contorno:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = V_g C \tag{5}$$

Em 1975, nas publicações de (YEH; HUANG, 1975) e (BERLYAND, 1975), foram apresentadas soluções, em termos de funções de Green, para um problema bidimensional de fontes elevadas com u e K_z dados por perfil de potência, mas para uma atmosfera sem contorno superior $(K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \ em \ z \to \infty)$. Em 1978,(DEMUTH, 1978) apresentou uma solução, dada em termos de funções de Bessel, considerando uma camada verticalmente limitada $(K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \ em \ z = z_i)$. Na Itália quatro modelos baseados nas soluções de Yeh e Hung, Berlyand e Demuth, têm sido utilizados: KAPPAG (TIRABASSI; TAGLIAZUCCA; ZANNETTI, 1986), KAPPAG-LT (TIRABASSI; TAGLIAZUCCA; PAGGI, 1989), CISP (TIRABASSI; RIZZA, 1992) e MAOC (TIRABASSI; RIZZA, 1993).

(VAN ULDEN, 1978), a partir da aplicação da teoria da similaridade de *Monin-Obukhov* à difusão, derivou uma solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, supondo perfis de similaridade para u e K_z. Com isso, Van Ulden obteve resultados similares aos de Roberts (ROBERTS, 1923) porém, ele formulou um modelo para fontes não superficiais, mas aplicável à fontes dentro da camada limite superficial. Essa solução é utilizada no modelo SPM (TIRABASSI; RIZZA, 1995).

Em 1980, Nieuwstadt (NIEUWSTADT, 1980) obteve uma solução unidimensional dependente do tempo, sendo essa um caso particular da solução de (SMITH, 1957b). Para tanto, utilizou os polinômios de Legendre e o coeficiente de difusão dado por:

$$K_z = G_c u_* z(1 - \frac{z}{z_i}) \tag{6}$$

onde G_c é uma constante e u_* é a velocidade de fricção. No ano seguinte (NIEUWSTADT; HAAN, 1981) estenderam essa solução para o caso de crescimento da altura da camada limite, utilizando os polinômios de Jacobi. Uma extensão da solução para o caso de perfis de vento vertical não-zero foi apresentada em (CATALANO, 1982).

(KOCH, 1989) apresentou uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, onde o vento e as difusividades seguem os perfis de potência, incluindo os efeitos de remoção de contaminantes pelo solo.

No transporte de emissões sem empuxo, em uma fonte aérea contínua ao nível do solo, foi desenvolvida uma solução tridimensional por (CHRYSIKOPOULOS; HILDEMANN; ROBERTS, 1992), onde u e K_z seguem os perfis dados em (2), com inclusão do termo de deposição seca.

A equação de advecção-difusão pode ser resolvida por métodos analíticos, onde não há nenhuma aproximação ao longo da derivação da solução e, por métodos semi-analíticos, que resolvem parte do problema analiticamente e parte numericamente. Neste trabalho tem-se interesse particular em soluções analíticas obtidas através da aplicação da técnica da transformada de Laplace e da técnica da transformada generalizada. A existência e unicidade de uma solução analítica para a equação de advecção-difusão é garantida pelo teorema de Cauchy-Kowalewsky (COURANT; HILBERT, 1989). Estas soluções analíticas podem ser expressas na forma integral, como é o caso ao se aplicar a transformada de Laplace, ou com uma formulação em série, como na técnica da transformada integral generalizada. Estas soluções são matematicamente equivalentes (MOREIRA et al., 2008) e assim, a seguir, será dado enfoque aos modelos que utilizam essas técnicas para obter a solução analítica da equação de advecção-difusão.

Os métodos aplicados à problemas de poluição atmosférica, e que obtém a solução analítica pela aplicação da transformada de Laplace e/ou da técnica da transformada generalizada, são: ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Model*, Modelo Multicamadas Advectivo Difusivo); GITT (*Generalized Integral Transform Technique,* Técnica da Transformada Integral Generalizada); GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*, que é uma combinação dos métodos ADMM e GITT); e o GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*, combinação do método GITT com a Transformada de Laplace).

O método ADMM é baseado na discretização da camada limite planetária (CLP) em N subcamadas, sendo que em cada uma delas, a equação de advecção-difusão é resolvida aplicando-se a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica, e considerando-se valores médios para o coeficiente de difusão e perfil de vento.

Com isso, têm-se a substituição de um problema com coeficiente variável por um conjunto de problemas com coeficientes constantes (coeficientes médios), acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminante nas interfaces. A solução obtida pela aplicação do ADMM é semi-analítica, dada em forma integral. Foram vários os trabalhos publicados utilizando essa técnica: (MOURA; VILHENA; DEGRAZIA, 1995), (VILHENA et al., 1998), (FERREIRA NETO, 2003), (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2004), (MOREIRA et al., 2004),(MOREIRA; CARVALHO; TIRABASSI, 2005),(MOREIRA; FERREIRA NETO; CARVALHO, 2005),(MOREIRA et al., 2005), (MOREIRA et al., 2006), (BULIGON; MOREIRA; VILHENA, 2006). Uma revisão completa do método ADMM pode ser encontrada em (MOREIRA et al., 2006).

O método GITT é um método híbrido (analítico-numérico) (COTTA, 1993), (COTTA; MIKHAYLOV, 1997) derivado da transformação integral clássica (MIKHAYLOV; ÖZISIK, 1984), que combina uma expansão em série com uma integração, para problemas lineares de difusão. Na expansão, é utilizada uma base de autofunções determinadas por um problema auxiliar contendo o operador diferencial principal do problema original. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. Como resultado deste procedimento, obtêm-se um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), também chamado de problema transformado que, uma vez solucionado por subrotinas numéricas, é invertido para a obtenção do resultado da equação original. Soluções de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e advecção-difusão são obtidos utilizando-se a GITT, como em: (CHEROTO et al., 1999), (LIU et al., 2000), (RIBEIRO et al., 2000), (RIBEIRO et al., 2002), (MAGNO; MACÊDO; QUARESMA, 2002), (PEREIRA et al., 2002), (ALVES; COTTA; PONTES, 2002), (VELLOSO et al., 2003), (STORCH; PIMENTEL, 2003),(VELLOSO et al., 2004), (STORCH; PIMENTEL, 2005), (COTTA; BARROS, 2007) e (GUERRERO et al., 2012).

Em 2006, para resolver a equação de advecção-difusão tridimensional, (COSTA et al., 2006) utilizou a técnica GITT juntamente com o método ADMM. A técnica recebeu o nome de GIADMT e consiste em transformar o problema tridimensional em um problema bidimensional pela aplicação da GITT na variável y, e o problema bidimensional resultante é resolvido pelo método ADMM, discretizando-se a CLP. A aplicação do método GIADMT pode ser encontrada nos trabalhos (COSTA et al., 2006), (MOREIRA et al., 2008), (COSTA; TIRABASSI; VILHENA, 2010) e (COSTA et al., 2012).

Em (WORTMANN et al., 2005), apresentou-se uma nova solução analítica para a equação de advecção-difusão bidimensional com coeficiente de difusão variável com a altura. Neste trabalho, o sistema de EDO's resultante da aplicação da GITT (problema transformado) foi resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização. Este novo método recebeu o nome de GILTT.

Muitos estudos são apresentados na literatura a respeito da dispersão de poluentes

utilizando o método GILTT na equação de advecção-difusão bidimensional, sendo que os trabalhos de maior relevância são os seguintes: (WORTMANN et al., 2005), (MOREIRA et al., 2006), (BUSKE et al., 2007a), (BUSKE et al., 2007b), (TIRABASSI et al., 2008), (TIRABASSI et al., 2009), (MOREIRA et al., 2009), (MOREIRA; VILHENA; BUSKE, 2009) e (SCHUCH et al., 2011). De acordo com os trabalhos analisados, a obtenção da solução do problema via GILTT pode ser resumida da seguinte forma: seguindo o mesmo procedimento inicial da GITT, realiza-se a transformação integral até a obtenção do sistema EDO. Aplica-se a transformada de Laplace nesse sistema, o que resulta em um sistema algébrico. A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após a diagonalização, esta matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico. Esta inversão, por utilizar uma matriz diagonalizada e a transformada de Laplace, é analítica e sem custo computacional. Assim, a solução analítica do problema transformado é finalmente encontrada. O método GILTT é analítico no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, exceto pelo erro de truncamento da solução em série para fins de cálculos numéricos.

Para se obter uma solução tridimensional, inicialmente a técnica GILTT utilizava uma aproximação na variável y assumindo que a pluma de poluente possui uma distribuição gaussiana, e esta solução recebeu o nome de GILTTG (MOREIRA et al., 2009). Em 2009 surgiu o novo método 3D-GILTT (*Three-dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique*) (BUSKE; VILHENA; MOREIRA, 2009), (BUSKE et al., 2009), (BUSKE et al., 2011a), (BUSKE et al., 2011b), (BUSKE et al., 2012a), (BUSKE et al., 2012b), (VILHENA et al., 2012) que resolveu a equação tridimensional de advecção-difusão de forma analítica utilizando a transformada integral na variável y do problema, e o problema bidimensional resultante foi resolvido pelo método GILTT conforme descrito acima.

3 MODELO MATEMÁTICO

Para representar um fenômeno de interesse é necessário uma formulação matemática que o represente, só assim é possível realizar uma simulação de seu comportamento. Um modelo de dispersão de poluentes é uma formalização matemática capaz de simular o comportamento de um determinado poluente na atmosfera. A seguir, apresenta-se a formulação matemática capaz de simular analiticamente a dispersão tridimensional de poluentes na atmosfera.

3.1 Dedução da Equação de Advecção-Difusão

A equação que modela a advecção e difusão atmosférica de um contaminante no ar é obtida a partir da aplicação da equação de conservação de massa (equação da continuidade). Considerando uma espécie genérica C que se conserva na atmosfera (BLACKADAR, 1997) temos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U\frac{\partial C}{\partial x} + V\frac{\partial C}{\partial y} + W\frac{\partial C}{\partial z} + S = 0 \tag{7}$$

onde U, V e W são as componentes das velocidades instantâneas do vento (m/s) nas direções x, y e z (m) respectivamente; e S é o termo fonte.

Considerando os efeitos da turbulência nessa equação, é utilizado a decomposição de Reynolds (STULL, 1988), que considera cada variável como a soma de sua parte média (denotado com a barra superior) e flutuação (denotado pelo apóstrofo)(ARYA, 1995):

$$\begin{aligned} U &= \bar{u} + u' \\ V &= \bar{v} + v' \\ W &= \bar{w} + w' \\ C &= \bar{c} + c' \end{aligned} \tag{8}$$

Substituindo (8) em (7):

$$\frac{\partial(\overline{c}+c')}{\partial t}+(\overline{u}+u')\frac{\partial(\overline{c}+c')}{\partial x}+(\overline{v}+v')\frac{\partial(\overline{c}+c')}{\partial y}+(\overline{w}+w')\frac{\partial(\overline{c}+c')}{\partial z}+S=0 \tag{9}$$

Aplicando as propriedades de derivação:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\overline{c}}{\partial t}+\frac{\partial c'}{\partial t}+\overline{u}\frac{\partial\overline{c}}{\partial x}+\overline{u}\frac{\partial c'}{\partial x}+u'\frac{\partial\overline{c}}{\partial x}+u'\frac{\partial c'}{\partial x}+\overline{v}\frac{\partial\overline{c}}{\partial y}+\overline{v}\frac{\partial c'}{\partial y}+\\ +v'\frac{\partial\overline{c}}{\partial y}+v'\frac{\partial c'}{\partial y}+\overline{w}\frac{\partial\overline{c}}{\partial z}+\overline{w}\frac{\partial c'}{\partial z}+w'\frac{\partial\overline{c}}{\partial z}+w'\frac{\partial c'}{\partial z}+S=0\end{aligned} \tag{10}$$

Antes de prosseguir com a dedução, vamos sumarizar algumas regras que governam as médias temporais para um sistema euleriano de representação:

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\phi}}&=\bar{\phi}\\ \overline{\phi+\varphi}&=\bar{\phi}+\bar{\varphi}\\ \overline{\bar{\phi}*\varphi}&=\bar{\phi}*\bar{\varphi}\\ \overline{\frac{\partial\phi}{\partial t}}&=\frac{\partial\bar{\phi}}{\partial t}\\ \overline{cte}&=cte\end{aligned} \tag{11}$$

$$\bar{\phi}'=0 \quad pois \quad \bar{\phi}=\overline{(\bar{\phi}+\phi')}\rightarrow\bar{\phi}=\bar{\phi}+\bar{\phi}' \quad sendo\ \ assim \quad \bar{\phi}'=0$$

Realizando a média nos termos da Eq.(10):

$$\begin{aligned}\overline{\frac{\partial\overline{c}}{\partial t}}+\overline{\frac{\partial c'}{\partial t}}+\overline{\overline{u}\frac{\partial\overline{c}}{\partial x}}+\overline{\overline{u}\frac{\partial c'}{\partial x}}+\overline{u'\frac{\partial\overline{c}}{\partial x}}+\overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}}+\overline{\overline{v}\frac{\partial\overline{c}}{\partial y}}+\overline{\overline{v}\frac{\partial c'}{\partial y}}+\\ +\overline{v'\frac{\partial\overline{c}}{\partial y}}+\overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}}+\overline{\overline{w}\frac{\partial\overline{c}}{\partial z}}+\overline{\overline{w}\frac{\partial c'}{\partial z}}+\overline{w'\frac{\partial\overline{c}}{\partial z}}+\overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}}+S=0\end{aligned} \tag{12}$$

A Eq.(12) é simplificada utilizando as afirmações (11), restando:

$$\frac{\partial\overline{c}}{\partial t}+\overline{u}\frac{\partial\overline{c}}{\partial x}+\overline{v}\frac{\partial\overline{c}}{\partial y}+\overline{w}\frac{\partial\overline{c}}{\partial z}+\overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}}+\overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}}+\overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}}+S=0 \tag{13}$$

Antes de prosseguir, vamos provar a seguinte igualdade:

$$\overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}}+\overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}}+\overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}}=\frac{\partial\overline{u'c'}}{\partial x}+\frac{\partial\overline{v'c'}}{\partial y}+\frac{\partial\overline{w'c'}}{\partial z} \tag{14}$$

Para chegar na relação acima, partiremos das seguintes afirmações:

$$\frac{\partial u'c'}{\partial x}=u'\frac{\partial c'}{\partial x}+c'\frac{\partial u'}{\partial x}$$

$$\frac{\partial v'c'}{\partial y} = v'\frac{\partial c'}{\partial y} + c'\frac{\partial v'}{\partial y}$$
$$\frac{\partial w'c'}{\partial z} = w'\frac{\partial c'}{\partial z} + c'\frac{\partial w'}{\partial z}$$

$$\frac{\partial(u'c')}{\partial x} + \frac{\partial(v'c')}{\partial y} + \frac{\partial(w'c')}{\partial z} = u'\frac{\partial c'}{\partial x} + v'\frac{\partial c'}{\partial y} + w'\frac{\partial c'}{\partial z} + c'(\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z}) \tag{15}$$

A equação da continuidade aplicada à um fluido incompressível e com densidade constante é representada por:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \tag{16}$$

Realizando a decomposição de Reynolds:

$$\frac{\partial(\bar{u} + u')}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v} + v')}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{w} + w')}{\partial z} = 0$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0 \tag{17}$$

Aplicando a média nos termos da equação, e sabendo que a média de uma flutuação é igual a zero, por (11), temos portanto:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = 0 \tag{18}$$

Substituindo a equação (18) em (17), obtemos que:

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0 \tag{19}$$

Com isso, a afirmação inicial (15) é reduzida para:

$$\frac{\partial(u'c')}{\partial x} + \frac{\partial(v'c')}{\partial y} + \frac{\partial(w'c')}{\partial z} = u'\frac{\partial c'}{\partial x} + v'\frac{\partial c'}{\partial y} + w'\frac{\partial c'}{\partial z} \tag{20}$$

Aplicando a média de Reynolds nos termos da Eq.(20), provamos a afirmação proposta em (14):

$$\overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}} = \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \tag{21}$$

Sendo assim, utilizando o que foi visto anteriormente, a Eq.(13) torna-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S = 0 \tag{22}$$

onde os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam , respectivamente, o fluxo turbulento do contaminante (g/sm^2)nas direções longitudinal, lateral e vertical. O termo de difusão molecular é desconsiderado, pois a turbulência domina os processos de transporte e dispersão.

A Eq.(22) contém quatro variáveis desconhecidas (os fluxos turbulentos e a concentração $\bar{c}$) criando um problema de fechamento da turbulência. Uma das maneiras mais utilizadas para solucionar o problema de fechamento da equação de advecção-difusão tridimensional (22) é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou Teoria K), onde os fluxos de massa turbulentos podem ser expressos em termos do gradiente da concentração média (SEINFELD; PANDIS, 1997), dado por:

$$\begin{aligned} \overline{u'c'} &= -K_x\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \\ \overline{v'c'} &= -K_y\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \\ \overline{w'c'} &= -K_z\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \end{aligned} \tag{23}$$

Por (23), o modelo torna-se puramente determinístico. Substituindo (23) na Eq.(22) e reorganizando seus termos, obtemos a equação de advecção-difusão tridimensional:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial \bar{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\right) + S \tag{24}$$

A Eq.(24) representa a Equação de Advecção-Difusão, com fechamento Fickiano da turbulência, para um sistema de coordenadas cartesianas. O primeiro elemento é o termo transiente; os três seguintes são os termos advectivos, onde $\bar{u}$, $\bar{v}$ e $\bar{w}$ são as componentes médias do vento; após a igualdade temos os termos difusivos, onde K_x, K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulentos, os quais, a princípio, contém toda a informação da complexidade da turbulência, sendo geralmente parametrizados; e S é o termo fonte.

3.2 Solução via GILTT

Antes de prosseguir com a solução da Eq.(24) pelo método GILTT, assumimos que a advecção é dominante no eixo-x $(\bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \gg \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}\right))$, portanto o termo difusivo na mesma variável é negligenciado. Dessa forma temos:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\right) \tag{25}$$

A Eq.(25) está sujeita as seguintes condições de contorno, inicial e de fonte, respectivamente:

$$K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0 \quad em \quad y = 0 \;\; e \;\; y = L_y \tag{26}$$

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em \quad z = 0 \;\; e \;\; z = z_i \tag{27}$$

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = 0 \tag{28}$$

$$u(z)\bar{c}(0, y, z, t) = Q\delta(y - y_0)\delta(z - H_s) \tag{29}$$

em que Q é a intensidade da fonte (g/s), z_i é a altura da CLP (m), H_s é a altura da fonte (m), L_y é o limite para longe da fonte no eixo y em (m) e δ é o funcional delta de Dirac. Vale ressaltar que a condição de fonte é válida em todo o domínio, exceto no ponto de liberação $(0, y_0, H_s)$.

Aplica-se a Transformada de Laplace no tempo na Eq.(25):

$$s\tilde{c}(x, y, z, s) - \bar{c}(x, y, z, 0) + \overline{u}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + \overline{v}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} + \overline{w}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z}\right) = 0 \tag{30}$$

onde

$$\tilde{c}(x, y, z, s) = \mathfrak{L}\{\bar{c}(x, y, z, t); t \to s\}, \tag{31}$$

e como a condição inicial é $\bar{c}(x, y, z, 0) = 0$, a Eq.(30) torna-se:

$$s\tilde{c} + \overline{u}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + \overline{v}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial y} + \overline{w}\frac{\partial \tilde{c}}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \tilde{c}}{\partial z}\right) = 0 \tag{32}$$

De acordo com o método GILTT, usa-se a base de autofunções do problema de Sturm-Liouville para expandir a variável $\tilde{c}(x, y, z, s)$. Assim,

$$\tilde{c}(x, y, z, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{c}_n(x, z, s)\zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} \tag{33}$$

onde

$$N_n = \int_0^{L_y} \zeta_n^2(y)\,\mathrm{d}y \tag{34}$$

e $\zeta_n(y)$ é a solução do problema auxiliar de Sturm-Liouville e a variável $\tilde{c}_n(x, z, s)$ da

Eq.(33) precisa ser encontrada.

O problema de Sturm-Liouville é dado por:

$$\begin{aligned} \zeta_n''(y) + \lambda_n^2 \zeta_n(y) = 0 \quad em \quad 0 < y < L_y \\ \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} = 0 \quad em \;\; y = 0 \\ \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} = 0 \quad em \;\; y = L_y \end{aligned} \tag{35}$$

A solução do problema (35) é analítica e encontrada tabulada em (ÖZISIK, 1974), tendo a forma:

$$\zeta_n(y) = \cos(\lambda_n y) \quad com \quad \lambda_n = \frac{n\pi}{L_y} \;\; (n = 0, 1, 2, ...) \tag{36}$$

Com isso, ao substituir (33) na Eq. (32), tem-se:

$$\begin{aligned} & s \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{c}_n(x,z,s)\zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\overline{u}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\overline{v}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \tilde{c}_n(x,z,s) \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} + \\ & + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\overline{w}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial z} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{c}_n(x,z,s)}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \right) + \\ & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \tilde{c}_n}{\partial z} \right) \zeta_n(y) = 0 \end{aligned} \tag{37}$$

Neste momento, aplica-se o operador integral $\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} (.) \zeta_m(y) \, \mathrm{d}y$ na Eq.(37), o que resulta em:

$$\begin{aligned} & s \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{c}_n(x,z,s) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y + \overline{u} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y + \\ & + \overline{v} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{c}_n(x,z,s) \int_0^{L_y} \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) \, \mathrm{d}y + \\ & + \overline{w} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y + \\ & - \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{c}_n(x,z,s) \int_0^{L_y} \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \right) \zeta_m \, \mathrm{d}y + \\ & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial z} \right) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y = 0 \end{aligned} \tag{38}$$

Lembrando que:

$$\zeta_n''(y) + \lambda_n^2 \zeta_n(y) = 0 \quad \Rightarrow \quad \zeta_n''(y) = -\lambda_n^2 \zeta_n(y) \tag{39}$$

pode-se reescrever a Eq. (38) da forma:

$$\begin{aligned} & s \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{c}_n(x,z,s) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y + \overline{u} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial x} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y + \\ & + \overline{v} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{c}_n(x,z,s) \int_0^{L_y} \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) \, \mathrm{d}y + \\ & + \overline{w} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial z} \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y + \\ & + \lambda_n^2 K_y \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{c}_n(x,z,s) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y + \\ & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial z} \right) \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y = 0 \end{aligned} \tag{40}$$

onde, utilizando a ortonormalidade, escrevemos:

$$\delta_{n,m} = \int_0^{L_y} \frac{\zeta_n(y)\zeta_m(y)}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \, \mathrm{d}y = \begin{cases} 0 & \text{se } m \neq n; \\ 1 & \text{se } m = n. \end{cases}$$

$$\beta_{n,m} = \int_0^{L_y} \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) \, \mathrm{d}y = \begin{cases} \frac{2n^2}{L_y(m^2-n^2)} [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1] & \text{se } m \neq n; \\ 0 & \text{se } m = n. \end{cases}$$

Com isso, a Eq. (40) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & s\delta_{n,m}\tilde{c}_n(x,z,s) + \overline{u}\delta_{n,m} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial x} + \overline{v}\beta_{n,m}\tilde{c}_n(x,z,s) + \overline{w}\delta_{n,m} \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial z} + \\ & + \lambda_n^2 K_y \delta_{n,m} \tilde{c}_n(x,z,s) - \delta_{n,m} \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \tilde{c}_n(x,z,s)}{\partial z} \right) = 0 \end{aligned} \tag{41}$$

Após encontrar a Eq. (41) o próximo passo é aplicar a GILTT em z, de tal forma que:

$$\tilde{c}_n(x,z,s) = \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s)\xi_i(z) \tag{42}$$

$\xi_i(z)$ é a solução do problema auxiliar de Sturm-Liouville e a variável $\tilde{c}_i(x,s)$ da Eq. (42) precisa ser encontrada.

O problema de Sturm-Liouville é dado por:

$$\begin{aligned} \xi_i''(z) + \mu_i^2 \xi_i(z) = 0 \quad em \quad 0 < z < z_i \\ \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} = 0 \quad em \;\; z = 0 \\ \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} = 0 \quad em \;\; z = z_i \end{aligned} \tag{43}$$

em que a solução é analítica (ÖZISIK, 1974), tendo a forma:

$$\xi_i(z) = \cos(\mu_i z) \quad com \quad \mu_i = \frac{i\pi}{z_i} \;\; (i = 0, 1, 2, ...) \tag{44}$$

Sendo assim, ao substituir (42) na Eq. (41), esta torna-se:

$$\begin{aligned} s\delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s)\xi_i(z) + \overline{u}\delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial \tilde{c}_i(x,s)}{\partial x}\xi_i(z) + \\ \overline{v}\beta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s)\xi_i(z) + \overline{w}\delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s)\frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} + \\ \lambda_n^2 K_y \delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s)\xi_i(z) - \delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s)\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z}\right) = 0 \end{aligned} \tag{45}$$

Em seguida, aplica-se o operador integral $\int_0^{z_i}(.)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z$ na Eq.(45). Logo,

$$\begin{aligned} s\delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s) \int_0^{z_i} \xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial \tilde{c}_i(x,s)}{\partial x} \int_0^{z_i} \overline{u}(z)\xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \\ +\overline{v}\beta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s) \int_0^{z_i} \xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \overline{w}\delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s) \int_0^{z_i} \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z}\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \\ +\lambda_n^2 K_y \delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s) \int_0^{z_i} \xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \\ -\delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s) \int_0^{z_i} K_z' \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z}\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \\ +\delta_{n,m} \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s) \int_0^{z_i} K_z \frac{\partial^2 \xi_i(z)}{\partial z^2}\xi_j(z)\,\mathrm{d}z = 0 \end{aligned} \tag{46}$$

Lembrando que:

$$\xi_i''(z) + \mu_i^2 \xi_i(z) = 0 \quad \Rightarrow \quad \xi_i''(z) = -\mu_i^2 \xi_i(z) \tag{47}$$

Então, pode-se reescrever a Eq. (46), tal como:

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial \tilde{c}_i(x,s)}{\partial x} \delta_{n,m} \int_0^{z_i} \overline{u}(z)\xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x,s) \left\{ \delta_{n,m} \int_0^{z_i} s\xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \right.$$
$$+\beta_{n,m} \int_0^{z_i} \overline{v}\xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \delta_{n,m} \int_0^{z_i} \lambda_n^2 K_y \xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \tag{48}$$
$$+\delta_{n,m} \int_0^{z_i} \overline{w} \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} \xi_j(z)\,\mathrm{d}z - \delta_{n,m} \int_0^{z_i} K_z' \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} \xi_j(z)\,\mathrm{d}z +$$
$$\left. +\delta_{n,m} \int_0^{z_i} \mu_i^2 K_z \xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z \right\} = 0$$

Pode-se utilizar a forma matricial para representar a Eq. (48):

$$AY'(x,s) + BY(x,s) = 0 \tag{49}$$

onde

$$A = \delta_{n,m} \int_0^{z_i} \overline{u}(z)\xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z \tag{50}$$

e

$$\begin{aligned} B = \quad & \delta_{n,m} \int_0^{z_i} s\xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \beta_{n,m} \int_0^{z_i} \overline{v}\xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \\ & +\delta_{n,m} \int_0^{z_i} \lambda_n^2 K_y \xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \delta_{n,m} \int_0^{z_i} \overline{w} \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} \xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \\ & -\delta_{n,m} \int_0^{z_i} K_z' \frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} \xi_j(z)\,\mathrm{d}z + \delta_{n,m} \int_0^{z_i} \mu_i^2 K_z \xi_i(z)\xi_j(z)\,\mathrm{d}z \end{aligned} \tag{51}$$

Assumindo que a matriz A é não-singular, multiplica-se a equação (49) pela matriz inversa de A e obtêm-se:

$$Y'(x,s) + EY(x,s) = 0 \tag{52}$$

sendo $E = A^{-1}B$. Notemos que a Eq. (52) é uma EDO homogênea.

A EDO (52) é resolvida analiticamente pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização (WORTMANN, 2003), (MOREIRA et al., 2006) e (MOREIRA et al., 2009). Sendo assim, inicialmente aplica-se a transformada de Laplace na variável x:

$$r\bar{Y}(r,s) - Y(0,s) + E\bar{Y}(r,s) = 0 \tag{53}$$

onde $\bar{Y}(r,s) = \mathfrak{L}\{Y(x,s); x \to r\}$.

Por diagonalização, é possível decompor a matriz E, tal que:

$$E = XDX^{-1} \tag{54}$$

onde D é a matriz diagonal de autovalores da matriz E; X é a matriz dos autovetores e X^{-1} é a matriz inversa de X. Assim, a Eq. (53) pode ser reescrita na forma:

$$(rI + XDX^{-1})\bar{Y}(r,s) = Y(0,s) \tag{55}$$

na qual $I = XX^{-1}$ é a matriz identidade. Após algumas manipulações algébricas obtém-se:

$$\bar{Y}(r,s) = X(rI + D)^{-1}\eta \tag{56}$$

onde $\eta = X^{-1}Y(0,s)$.

Para encontrar $Y(0,s)$ precisa-se encontrar $\tilde{c}(0,y,z,s)$. Assim, usando a expansão da GILTT em y na condição de fonte:

$$u(z)\overline{c}(0,y,z,t) = Q\delta(y-y_0)\delta(z-H_s) \tag{57}$$

onde

$$\overline{c}(0,y,z,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{c}_n(0,z,t)\zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} \tag{58}$$

ou seja,

$$u(z)\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{c}_n(0,z,t)\zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} = Q\delta(y-y_0)\delta(z-H_s) \tag{59}$$

Aplicando o operador integral $\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}(\cdot)\zeta_m(y)dy$ na Eq.(59):

$$u(z)\sum_{n=0}^{\infty} \tilde{c}_n(0,z,t)\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}\zeta_n(y)\zeta_m(y)dy = Q\delta(z-H_s)\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}\delta(y-y_0)\zeta_m(y)dy \tag{60}$$

Pela propriedade do funcional delta de Dirac, tem-se:

$$\int_0^{Ly}\delta(y-y_0)\zeta_m(y)dy = \zeta_m(y_0) \tag{61}$$

Assim

$$u(z)\tilde{c}_n(0,z,t)\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}\zeta_n(y)\zeta_m(y)dy = \frac{Q\zeta_m(y_0)}{N_m^{\frac{1}{2}}}\delta(z-H_s) \tag{62}$$

Agora aplicando a expansão da GILTT em z, de tal forma que:

$$\tilde{c}_n(0,z,t) = \sum_{n=0}^{\infty}\tilde{c}_i(0,t)\xi_i(z) \tag{63}$$

e substituindo na Eq. (62), obtém-se:

$$u(z)\sum_{n=0}^{\infty}\tilde{c}_i(0,t)\xi_i(z)\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}\zeta_n(y)\zeta_m(y)dy = \frac{Q\zeta_m(y_0)}{N_m^{\frac{1}{2}}}\delta(z-H_s) \tag{64}$$

Aplicando o operador integral $\int_0^{z_i}(\cdot)\xi_j(z)dz$, tem-se:

$$\sum_{i=0}^{\infty}\tilde{c}_i(0,t)\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}\zeta_n(y)\zeta_m(y)dy\int_0^{z_i}u(z)\xi_i(z)\xi_j(z)dz=\frac{Q\zeta_m(y_0)}{N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{z_i}\xi_i(z)\delta(z-H_s)dz \tag{65}$$

Pela propriedade do funcional delta de Dirac:

$$\int_0^{z_i}\delta(z-H_s)\xi_j(z)dz=\xi_j(H_s) \tag{66}$$

Logo

$$\tilde{c}_i(0,t)\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}\zeta_n(y)\zeta_m(y)dy\int_0^{z_i}u(z)\xi_i(z)\xi_j(z)dz=\frac{Q\zeta_m(y_0)\xi_j(H_s)}{N_m^{\frac{1}{2}}} \tag{67}$$

$$\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}N_m^{\frac{1}{2}}}\int_0^{Ly}\zeta_n(y)\zeta_m(y)dy=I \tag{68}$$

$$\int_0^{z_i}u(z)\xi_i(z)\xi_j(z)dz=A \tag{69}$$

e com isso obtém-se que:

$$Y(0,t)=\tilde{c}_i(0,t)=\frac{Q\zeta_m(y_0)\xi_j(H_s)}{N_m^{\frac{1}{2}}}A^{-1} \tag{70}$$

$$Y(0,s)=\tilde{c}_i(0,s)=\frac{Q\zeta_m(y_0)\xi_j(H_s)A^{-1}}{sN_m^{\frac{1}{2}}} \tag{71}$$

Assim, η é encontrado resolvendo o sistema linear $X\eta=Y(0,s)$ via decomposição LU.

Aplicando a transformada inversa de Laplace na Eq. (56):

$$Y(x,s)=X\mathfrak{L}^{-1}\{(rI+D)^{-1};r\to x\}\eta \tag{72}$$

é observado que a matriz $(rI+D)$ é escrita como:

$$(rI+D)=\begin{bmatrix} r+d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r+d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & r+d_N \end{bmatrix} \tag{73}$$

onde d_N são os autovalores da matriz E, ou ainda, os elementos da matriz diagonal D. Prosseguindo, obtém-se a inversa da matriz diagonal $(rI+D)$ por propriedades da

álgebra matricial, sendo escrita como:

$$(rI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{r+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{r+d_N} \end{bmatrix} \tag{74}$$

Assim, realizando a inversão da transformada de Laplace de (74) e utilizando os resultados padrão da teoria da transformada de Laplace, obtém-se que:

$$\mathfrak{L}^{-1}\{(rI + D)^{-1}\} = G(x, r) = \begin{bmatrix} e^{-d_1\, x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2\, x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_N\, x} \end{bmatrix} \tag{75}$$

Com esse resultado, temos que, a variável $\tilde{c}_i(x, s)$ é encontrada e

$$\tilde{c}_n(x, z, s) = \sum_{i=0}^{\infty} \tilde{c}_i(x, s)\xi_i(z) \tag{76}$$

é bem determinada. Com isso, determina-se, também:

$$\tilde{c}(x, y, z, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tilde{c}_n(x, z, s)\zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} \tag{77}$$

Agora, é necessário aplicar a transformada inversa de Laplace em s para determinar $\bar{c}(x, y, z, t)$, ou seja

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \mathfrak{L}^{-1}\{\tilde{c}(x, y, z, s); t \to s\}, \tag{78}$$

Esta inversão, por sua vez, é obtida numericamente através da quadratura de Gauss-Legendre (STROUD; SECREST, 1966), de tal forma que a solução da Eq.(25) é dada por:

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \sum_{k=1}^{M} \frac{P_k}{t} A_k \sum_{n=0}^{N} \frac{\tilde{c}_n(x, z, \frac{P_k}{t})\zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} \tag{79}$$

onde N é o número de termos do somatório da fórmula inversa da GILTT; A_k, P_k e M são, respectivamente, os pesos, as raízes e a ordem da quadratura considerada, e estão tabulados em (STROUD; SECREST, 1966).

4 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA

Para gerarmos as simulações da dispersão do poluente, será usada a solução analítica para a equação de advecção-difusão tridimensional deduzida no capítulo anterior e parametrizações para o perfil do vento, coeficientes de difusão e efeito de ascensão da pluma. Estas parametrizações modelam o processo conforme a estabilidade na CLA e levam em conta as principais variáveis micrometeorológicas como o comprimento de Obukhov e a velocidade de fricção.

4.1 Coeficiente de Difusão

Em problemas de difusão atmosférica, a escolha de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para modelar a dispersão de poluentes. A partir de um ponto de vista físico, uma parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza, no sentido que os modelos matemáticos recebem uma relação aproximada que substitui um termo desconhecido. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros são calculados e relacionados ao entendimento da CLP (MANGIA et al., 2002).

Na literatura encontram-se diversas formulações para o coeficiente de difusão turbulento vertical (ULKE, 2000). Os coeficientes de difusão dependentes somente da turbulência, utilizados neste trabalho, são apresentados a seguir, sendo válidos a partir da rugosidade (z_0) até o topo da camada limite (z_i).

- **Fórmulas de Degrazia:** utilizadas em toda CLP.
  - Condições instáveis ($L \leq 0$) (MANGIA et al., 2002):

$$K_z = 0,22 w_* z_i \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{\frac{-4z}{z_i}} - 0,0003 e^{\frac{8z}{z_i}}\right] \tag{80}$$

em que z_i é a altura da CLC.

– Condições estáveis ($L \geq 0$) (DEGRAZIA et al., 2000):

$$K_z = \frac{0,3(1 - z/z_i)u_* z}{1 + 3,7(z/\Lambda)}, \tag{81}$$

no qual z_i é a altura da CLE e $\Lambda = L(1 - z/z_i)^{\frac{5}{4}}$.

Para representar a difusão em regiões próximas à fonte, os coeficientes de difusão devem ser considerados como função não somente da turbulência, mas também da distância da fonte. É importante salientar que uma parametrização que é dependente da distância da fonte representa, de um modo mais correto, a difusão em ventos fracos (ARYA, 1995). Seguindo-se essa ideia, (DEGRAZIA; MORAES, 1992) e (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001) propuseram uma formulação integral e (DEGRAZIA; VILHENA; MORAES, 1996) e (DEGRAZIA et al., 2002) propuseram uma formulação algébrica para os coeficientes de difusão na camada instável:

- Condições instáveis (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001), (DEGRAZIA et al., 2002):

$$K_\alpha = \frac{0,09 w_* z_i c_i^{1/2} \psi^{1/3} (z/z_i)^{4/3}}{(f_m^*)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{sin(\frac{7,84 c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)_i^{4/3} X^* n'}{(z/z_i)^{2/3}})}{(1+n')^{5/3}} \frac{dn'}{n'} \tag{82}$$

$$K_\alpha = \frac{0,583 w_* z_i c_i \psi^{2/3} (z/z_i)^{4/3} X^* [0,55 (z/z_i)^{2/3} + 1,03 c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)_i^{2/3} X^*]}{[0,55 (z/z_i)^{2/3} (f_m^*)_i^{1/3} + 2,06 c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)_i X^*]^2} \tag{83}$$

em que $X^* = x w_* / \overline{u} z_i$ é a distância adimensional, n' é a frequência adimensional, z_i é a altura da CLC, $c_{v,w} = 0,36$, $c_u = 0,3$, $(f_m^*)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral independente da estratificação na qual:

$$(f_m^*)_w = \frac{z}{(\lambda_m)_w} = 0,55 \left(\frac{z}{z_i}\right) \left[1 - exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]^{-1} \tag{84}$$

para a componente vertical, em que

$$(\lambda_m)_w = 1,8 z_i \left[1 - exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]$$

é o valor do pico espectral do comprimento de onda vertical. A componente longitudinal obtida de (OLESEN; LARSEN; HOJSTRUP, 1984) é $(f_m^*)_u = 0,67$. A função dissipação usada aqui é o valor médio $\psi = 0,4$ (CAUGHEY, 1982).

4.2 Ascensão da Pluma

Para muitas aplicações, como em emissões industriais, é necessário levar em conta o efeito do empuxo sobre a pluma de poluente. Quando a pluma de poluentes é mais quente que o ambiente (menos densa) ela tende a se elevar até uma camada onde se encontre em equilíbrio termodinâmico, a altura efetiva da fonte (H_e) será a soma da altura real da fonte (H_s) e o efeito de ascensão da pluma (ΔH). Nas análises deste (ΔH) desconsidera-se os efeitos térmicos gerados próximo a fonte. Dessa forma assumimos que, a certa distância da fonte, a pluma de material liberado em H_s se comporta como uma pluma de mesma densidade que o ambiente, abandonada sem empuxo a uma altura H_e (ARYA, 1999).

Em casos de convecção forte $(z_i/|L| > 10)$, a pluma terá uma ascensão final dada por

$$\Delta H = 4.3 \left(\frac{F}{\bar{u} w_*} \right)^{\frac{3}{5}} z_i^{\frac{2}{5}} \tag{85}$$

sendo F um parâmetro de flutuabilidade definido como

$$F = g V_i r_i^2 \frac{(T_i - T_a)}{T_i} \tag{86}$$

onde g é a aceleração da gravidade, T_i, V_i, r_i e T_a são, respectivamente, a temperatura da fonte, a velocidade vertical de saída, o raio da fonte e a temperatura ambiente (BRIGGS, 1975).

Para condições moderadamente convectivas a ascensão da pluma é parametrizada como

$$\Delta H = \left(\frac{F}{\bar{u} w_d^2} \right)^{\frac{3}{5}} \left(1 + \frac{2H_s}{\Delta H} \right)^2 \tag{87}$$

que pode ser resolvida interativamente, onde $w_d = 0.4 w_*$ é a velocidade média dos *downdrafts* (correntes de ar descendentes).

Para condições de estabilidade neutra a seguinte expressão para ΔH:

$$\Delta H = 1.3 \frac{F}{\bar{u} u_*^2} \left(1 + \frac{H_s}{\Delta H} \right)^{\frac{2}{3}} \tag{88}$$

(WEIL, 1979) sugere que uma pluma tem a seguinte restrição para sua ascensão:

$$\Delta H = 0.62 (z_i - H_s). \tag{89}$$

Considerado o que foi exposto anteriormente, (BRIGGS, 1975) sugere que o valor final de ΔH deve ser o valor mínimo obtido com as equações (85), (87), (88) e (89).

4.3 Perfil do Vento

As equações usadas pelo modelo para calcular o vento médio são as de similaridade (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

$$\overline{u} = \frac{u_*}{k}\left[ln\left(\frac{z-d}{z_0}\right) - \psi_m\left(\frac{z-d}{L}\right)\right] \quad se \quad z \leq z_b \tag{90}$$

$$\overline{u} = \overline{u}(z_b) \quad se \quad z > z_b \tag{91}$$

em que $z_b = min[\mid L \mid, 0,1\,h]$, k é a constante de von-Kármán ($k \cong 0,4$), z_0 é a rugosidade do terreno. O deslocamento do plano zero (d) (m) é uma altura acima da superfície em que a velocidade do vento é nula e é consequência do escoamento sobre obstáculos tais como árvores ou construções, sendo desconsiderado neste trabalho (d = 0). A função estabilidade ψ_m é expressa em termos das relações de Businger:

$$\psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = -4,7\frac{z}{L} \qquad para \qquad 1/L \geq 0,$$

$$\psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = ln\left(\frac{1+\gamma^2}{2}\right) + ln\left(\frac{1+\gamma}{2}\right)^2 - 2arctan\gamma + \frac{\pi}{2} \qquad para \qquad 1/L < 0$$

com $\gamma = \left(1 - 15\frac{z}{L}\right)^{\frac{1}{4}}$.

Alternativamente, a velocidade do perfil de vento pode ser descrita por uma lei de potência como (PANOFSKY; DUTTON, 1984)

$$\frac{\overline{u}}{\overline{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^{\alpha}, \tag{92}$$

na qual $\overline{u}$ e $\overline{u}_1$ são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas z e z_1 e α é um expoente que está relacionado com a intensidade da turbulência (IRWIN, 1979).

5 VALIDAÇÃO DO MODELO COM DADOS EXPERIMENTAIS

Neste capítulo apresentam-se os dados experimentais, índices estatísticos e os resultados numéricos obtidos com a solução do modelo utilizados neste trabalho.

5.1 Dados Experimentais

Qualquer estudo de modelagem é incompleto se não é adequadamente validado com observações relevantes. A seguir são apresentados os experimentos difusivos utilizados neste trabalho para validar o presente modelo.

5.1.1 Experimento de Copenhagen (Dinamarca)

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning (GRYNING et al., 1987) e Gryning e Lyck (GRYNING; LYCK, 1984), consistiram na liberação do traçador SF_6 (hexafluoreto de enxofre) ao norte de Copenhagen. É um experimento de fonte alta e fortemente convectivo.

O traçador foi abandonado sem empuxo a partir de uma torre com altura de 115 m, sendo coletado ao nível do solo $(z = 0)$, em unidades de amostragem localizadas em três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância entre 2 a 6 km, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente, como mostra a Figura (1).

As liberações de SF_6 começaram uma hora antes do início da amostragem. O tempo médio das medidas foi de 1 h e suas imprecisões são de 10 $\%$. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de z_0 = 0,6 m (altura em que o vento é zero).

A Tabela (1) mostra os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão na CLC de Copenhagen a serem utilizados no modelo onde, $\overline{u}$ é a velocidade do vento médio (m/s), u_* representa a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s), H_s é a altura da fonte (m) e z_i é a altura (m) da CLC. Estes dados meteorológicos são médias horárias.

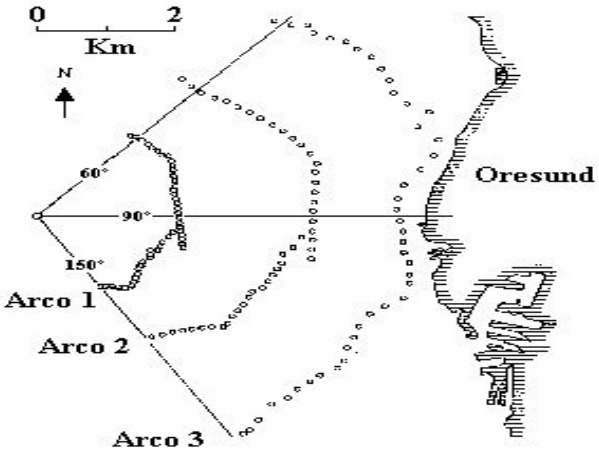

Figura 1: Experimento de Copenhagen.

Tabela 1: Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen (GRYNING et al., 1987).

Expt	$\overline{u}$ (115 m) (ms^{-1})	$\overline{u}$ (10 m) (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	w_* (ms^{-1})	z_i (m)
1	3,4	2,1	0,36	-37	1,8	1980
2	10,6	4,9	0,73	-292	1,8	1920
3	5,0	2,4	0,38	-71	1,3	1120
4	4,6	2,5	0,38	-133	0,7	390
5	6,7	3,1	0,45	-444	0,7	820
6	13,2	7,2	1,05	-432	2,0	1300
7	7,6	4,1	0,64	-104	2,2	1850
8	9,4	4,2	0,69	-56	2,2	810
9	10,5	5,1	0,75	-289	1,9	2090

5.1.2 Experimento de Kinkaid (Illinois, USA)

Levando-se em consideração o empuxo, também utilizamos o experimento de Kinkaid (realizado em Illinois - USA), relativo somente a condições convectivas (para $-z_i/L > 10$) e descrito no trabalho de (HANNA; PAINE, 1989). Este experimento consistiu de uma liberação elevada em um terreno plano com alguns lagos. Durante o experimento, o SF_6 foi liberado de uma altura de fonte de 187 m e medido em uma rede que consistiu de aproximadamente 200 amostradores posicionados em arcos de 0,5 a 50 km da fonte. O conjunto de dados inclui os parâmetros meteorológicos como velocidade de fricção, comprimento de Obukhov e altura da camada limite e são apresentados na Tabela (2). O comprimento de rugosidade foi de aproximadamente 10 cm. As concentrações máximas foram observadas ao nível do solo. O nível de concentração medida é frequentemente irregular com altos e baixos níveis de concentração ocorrendo intermitentemente ao longo do mesmo arco, além disso há freqüentes lacunas nos arcos de monitoramento. Por estas razões uma variável é escolhida como um fator de qualidade de modo a indicar o grau de legibilidade dos dados. O indicador de

qualidade (de 0 a 3) é normalmente utilizado (OLESEN; LARSEN; HOJSTRUP, 1984). Aqui, somente os dados com fator de qualidade 3 foram considerados.

5.2 Índices Estatísticos

Para a comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados nos experimentos trabalhados, foram utilizados índices estatísticos da literatura. Para a elaboração desta análise estatística, emprega-se aqui um programa desenvolvido por Hanna em 1989 (HANNA, 1989). Estes índices estatísticos são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental Americana (USEPA), pela Força Aérea Americana (*US Air Force*), pelo Instituto Americano do Petróleo (API), bem como pela comunidade científica da área de dipersão de poluentes na atmosfera após o *Workshop* "*Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assesments in Europa*", realizado na Bélgica em 1994 (OLESEN, 1995).

As notações utilizadas para os índices o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas e preditas, C é a concentração de poluentes, e σ é o desvio padrão e N o número de observações.

Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

1. Erro quadrático médio normalizado: informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. É uma estatística adimensional, e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o}\,\overline{C_p}} \tag{93}$$

2. Coeficiente de correlação: descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para um boa performance, o seu valor deve ser o mais próximo a 1.

$$COR = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p} \tag{94}$$

3. Fração de Inclinação: informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} \tag{95}$$

4. *Fractional Standard Deviations*: O valor ótimo é zero.

$$FS = \frac{\sigma_0 - \sigma_p}{0,5(\sigma_0 + \sigma_p)} \tag{96}$$

Tabela 2: Parâmetros meteorológicos para o experimento de Kinkaid (HANNA; PAINE, 1989). T_a é a temperatura ambiente, T_i é a temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma na saída da chaminé.

Expt	L (m)	z_i (m)	u_* (ms^{-1})	w_* (ms^{-1})	T_a (K)	T_i (K)	V_i (ms^{-1})	Q (gs^{-1})
1	-8,6	2076	0,30	2,65	298,4	416	14,6	10,2
2	-11,2	2092	0,31	2,53	298,4	416	14,6	8,2
3	-3,9	893	0,22	1,95	284,2	432	29,6	11,2
4	-4,8	1032	0,22	1,95	285,2	432	29,2	11,2
5	-10,4	1175	0,28	2,05	286,2	432	29,6	11,3
6	-6,3	1355	0,25	2,19	286,6	432	29,9	11,1
7	-23,5	1300	0,37	2,17	290,8	441	27,9	11,5
8	-40,3	1743	0,34	1,68	291,3	442	27,1	11,8
9	-63,5	1840	0,29	1,24	291,6	445	27,3	12,2
10	-8,6	850	0,30	1,52	296,6	453	28,5	11,2
11	-6,6	1447	0,28	2,31	297,6	456	31,8	11,2
12	-35,4	1223	0,50	2,33	299,9	440	18,0	11,0
13	-58,5	2069	0,57	2,66	300,4	441	18,0	11,0
14	-24,4	950	0,40	1,79	285,0	436	16,6	16,2
15	-33,3	1253	0,46	1,99	286,1	438	16,9	12,0
16	-27,0	1548	0,44	2,12	287,5	434	17,9	11,1
17	-28,6	2250	0,46	2,30	288,5	433	18,7	10,8
18	-41,3	2450	0,52	2,35	289,5	431	17,6	10,8
19	-51,4	2506	0,53	2,29	289,8	431	15,7	10,8
20	-67,8	2528	0,52	2,08	290,1	436	14,2	11,6
21	-14,3	1700	0,37	2,43	290,9	420	17,3	12,1
22	-6,0	1750	0,29	2,56	290,4	423	18,9	12,0
23	-46,1	1776	0,56	2,60	290,9	426	18,3	11,5
24	-29,6	1800	0,47	2,60	292,6	426	18,8	11,1
25	-20,6	1950	0,39	2,46	291,4	395	21,7	10,6
26	-18,7	1131	0,41	2,69	298,0	421	21,1	12,9
27	-42,1	2252	0,47	2,53	299,9	435	29,8	13,1
28	-67,6	2676	0,51	2,37	300,0	436	31,8	13,2
29	-5,2	1725	0,30	3,09	299,6	434	37,3	13,5
30	-4,3	1750	0,26	2,91	299,8	434	39,3	13,7
31	-5,4	1750	0,25	2,61	299,9	434	38,2	13,9
32	-8,0	1450	0,32	2,61	302,2	435	19,8	19,8
33	-11,2	1450	0,33	2,46	302,4	435	20,0	20,0
34	-18,3	1483	0,34	2,21	302,3	436	19,5	19,5
35	-18,5	1505	0,26	1,68	301,5	436	18,6	18,6
36	-45,1	1014	0,52	2,11	292,3	397	16,7	16,7
37	-35,8	1462	0,54	2,98	293,0	397	16,4	16,4
38	-42,3	2274	0,55	2,95	293,5	390	16,2	16,2
39	-86,1	1376	0,63	2,45	297,4	390	18,5	18,5
40	-108,0	1455	0,62	2,25	297,2	395	18,6	18,6
41	-131,0	1539	0,66	2,30	297,1	398	19,1	19,1
42	-191,0	1594	0,61	1,91	296,9	398	18,5	18,5
43	-6,4	1124	0,28	2,51	296,8	427	13,0	13,0
44	-8,3	1250	0,31	2,62	297,7	428	13,2	13,2
45	-10,6	1353	0,32	2,55	298,5	428	12,7	12,7
46	-9,2	1635	0,30	2,54	299,0	428	12,1	12,1
47	-11,6	1721	0,29	2,40	299,4	428	12,2	12,2
48	-21,2	1794	0,32	2,14	299,4	428	12,5	12,5
49	-67,5	1851	0,34	1,55	299,3	427	12,7	12,7
50	-81,2	952	0,67	2,47	299,7	431	12,6	12,6
51	-85,6	1222	0,68	2,59	300,3	431	12,7	12,7
52	-59,2	1300	0,60	2,69	301,1	432	12,9	12,9
53	-113,0	1360	0,68	2,55	301,1	432	12,5	12,5

5.3 Resultados

Dada a complexidade da solução, é importante mostrar o seu comportamento em diferentes condições. Nos estudos de dispersão, é essencial ter conhecimento da distância da fonte em que ocorre a concentração máxima de poluentes. Sendo assim, é possível ver na Figura (2) uma representação gráfica das concentrações ao nível do solo, previstas pela solução tridimensional, para diferentes alturas de fonte em condição convectiva. Para uma fonte na altura $H_s = 0.025z_i$, localizada próxima ao solo, é verificado um pico acentuado de concentração na área próxima à fonte. Com o crescimento da altura da fonte, observa-se um decaimento dos picos e uma diferente localização dos mesmos.

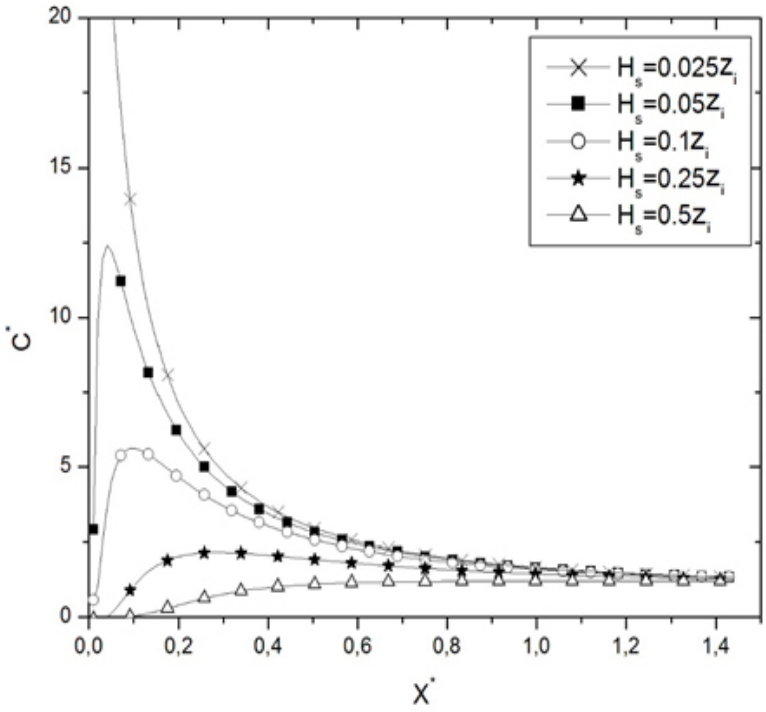

Figura 2: Concentração ao nível do solo pela solução tridimensional para diferentes alturas de fontes em condição convectiva $(1/L = -0.01)$.

Também para mostrar a influência da turbulência atmosférica, é apresentado na Figura (3) a concentração em função da distância da fonte $(H_s = 0.1z_i)$, ambas adimensionais, para cinco condições meteorológicas diferentes. Na Tabela (3) é apresentado o expoente do perfil de vento potência (α) e a inversão do valor do comprimento de Obukhov $(1/L)$ para diferentes condições meteorológicas utilizados para as soluções da Figura (3). Assim, para variáveis adimensionais, pode-se observar nesta figura que, em condições meteorológicas instáveis, durante o dia, o pico de concentração

encontra-se próximo à fonte, isto deve-se ao fato que é neste período onde há maior influência da turbulência da CLP sobre o poluente, fazendo com que este se disperse imediatamente após a emissão. Este efeito tende a diminuir, havendo um deslocamento do pico de concentração, conforme as condições meteorológicas tornam-se mais estáveis.

Tabela 3: Expoente do perfil de vento potência (α) e a inversão do valor do comprimento de Obukhov $(1/L)$ para diferentes condições meteorológicas.

Condição	alpha (α)	$1/L$
instável	0.07	-0.10
instável	0.1	-0.02
neutro	0.15	0
estável	0.35	0.01
estável	0.55	0.03

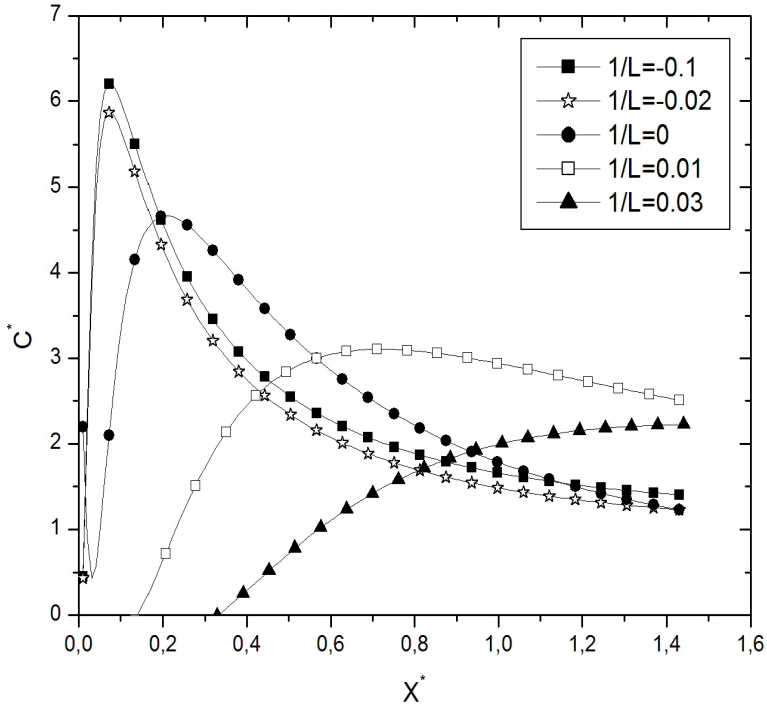

Figura 3: Concentração adimensional $(C = cuz_i^2/Q)$ em função da distância adimensional $(X = xu_*/uz_i)$ a partir de uma fonte $(H_s = 0.1z_i)$ para 5 diferentes condições meteorológicas.

Nas Figuras (4) e (5), é mostrada a influência da altura da fonte. Assim, as concentrações verticais adimensionais em três distâncias, a partir de quatro diferentes alturas de fontes, são apresentadas em condição convectiva. Estes gráficos apresentam valores maiores de concentração para distâncias menores, e menores com o cres-

cimento da distância. Além disso, com o crescimento da distância, há uma tendência à obtenção de um perfil homogêneo de concentração, isso porque o poluente sofreu os processos difusivos e advectivos da CLP, encontrando-se, depois de determinada distância, espalhado uniformemente em toda a atmosfera analisada.

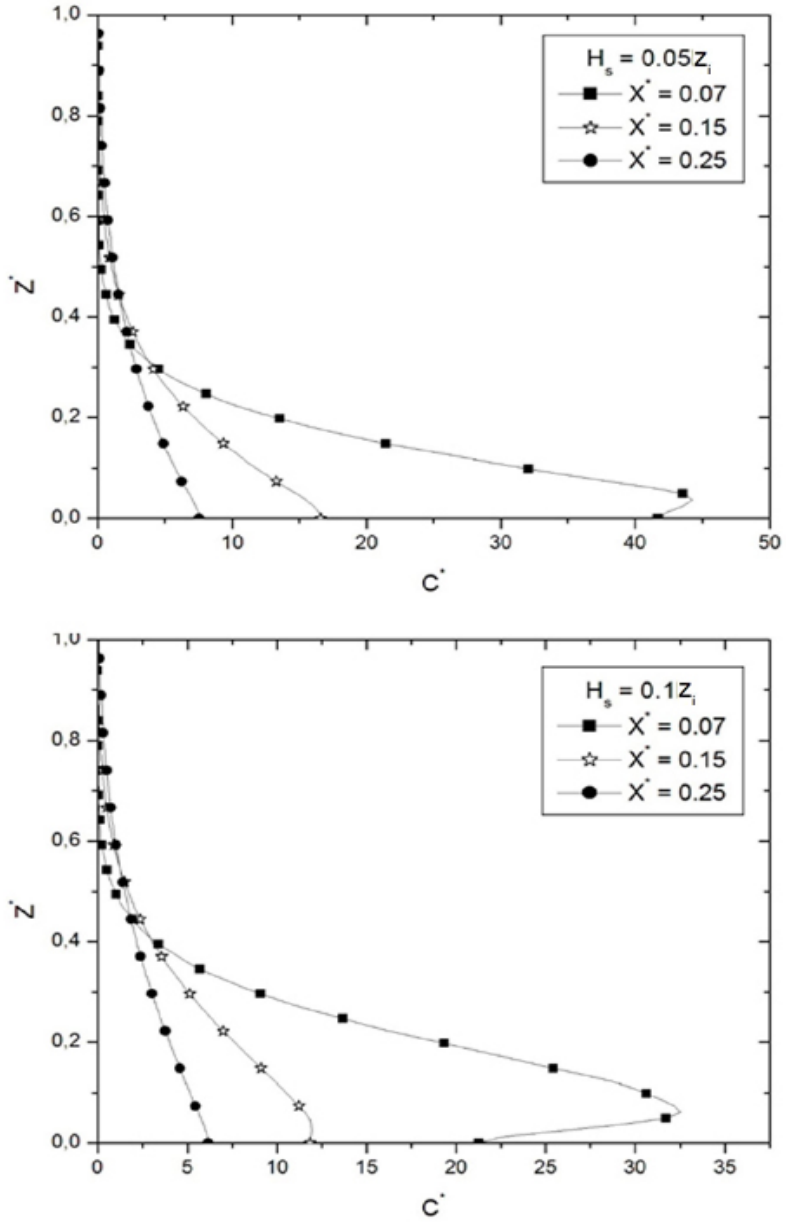

Figura 4: Concentração $(C^* = cuz_i^2/Q)$ em relação a altura $(Z^* = z/z_i)$ em condições convectivas $(1/L = -0.01)$ para três diferentes distâncias da fonte $(X^* = xw_*/uz_i)$ e duas alturas de fontes $(H_s = 0.05z_i$ e $0.1z_i)$.

A fim de mostrar o desempenho da solução da equação de advecção difusão desenvolvida e das parametrizações propostas, o modelo será aplicado usando os con-

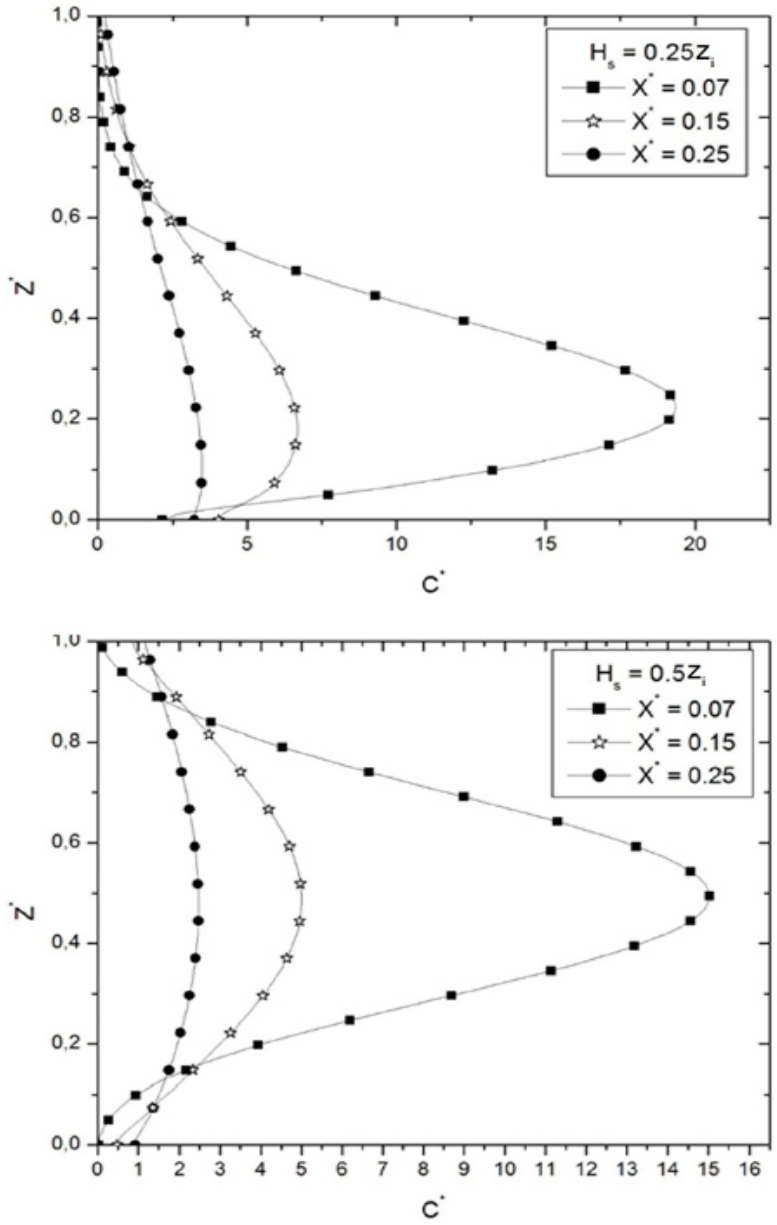

Figura 5: Concentração $(C^* = cuz_i^2/Q)$ em relação a altura $(Z^* = z/z_i)$ em condições convectivas $(1/L = -0.01)$ para três diferentes distâncias da fonte $(X^* = xw_*/uz_i)$ e duas alturas de fontes $(H_s = 0.25z_i$ e $0.5z_i)$.

juntos de dados experimentais de Copenhagen e Kinkaid.

As Figuras (6) e (7) mostram a comparação da concentração prevista pelo método 3D-GILLT em relação aos dados observados nos experimentos de Copenhagen e Kinkaid. Na análise de gráficos de espalhamento, quanto mais próximos estiverem os resultados da reta central, melhores os resultados. Pode-se observar que as concentrações obtidas reproduziram aceitavelmente os dados observados.

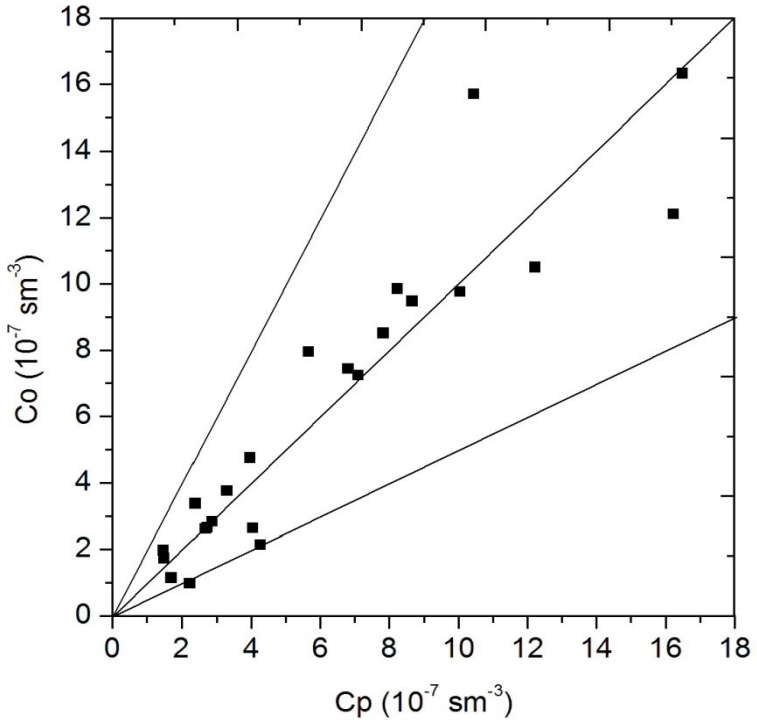

Figura 6: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas e preditas ao nível do solo utilizando o método 3D-GILTT para o experimento de Copenhagen.

A fim de comparar a qualidade da nova abordagem em relação a outros modelos, usam-se os índices estatísticos padrão. Enquanto o presente método (3D-GILTT) baseia-se numa verdadeira descrição tridimensional, uma abordagem analítica anterior chamada GILTTG utiliza um pressuposto Gaussiano para a direção transversal horizontal (MOREIRA et al., 2009). No GILTTG, a concentração integrada do vento lateral $c^y(x, z, t)$ é obtido analiticamente utilizando o método GILTT. Para calcular a concentração tridimensional $\bar{c}(x, y, z, t)$, a difusão lateral (σ_y) deve ser incluída, isto é, presume-se que a pluma tem uma distribuição Gaussiana da concentração na lateral.

Ainda, para o conjunto de dados de Copenhagen, os resultados obtidos são também comparados com resultados do método GIADMT (COSTA et al., 2006).

As Tabelas (4) e (5) apresentam algumas avaliações do desempenho dos resultados do modelo, utilizando o procedimento de avaliação estatística descrito por (HANNA, 1989).

Os índices estatísticos apontam uma boa concordância entre os dados experimentais e os obtidos pelo modelo 3D-GILTT para ambos os casos estudados. A figura (6) mostra um desempenho mais homogêneo do modelo em relação à figura (7), levando em consideração algum erro de super ou subestimação. Reflexo disso, observa-se um

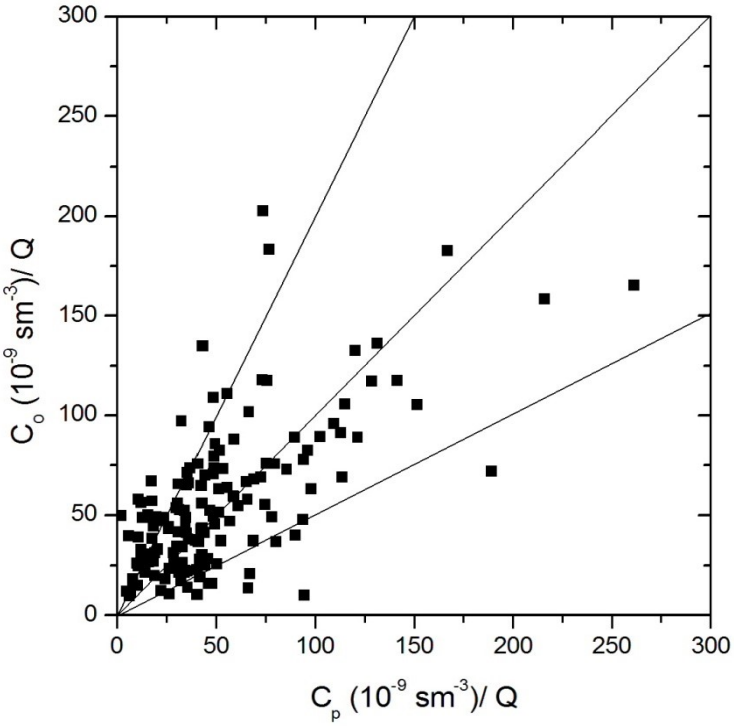

Figura 7: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas e preditas ao nível do solo utilizando o método 3D-GILTT para o experimento de Kinkaid.

Tabela 4: Comparação estatística entre os modelos usando os dados de Copenhagen.

Modelo	NMSE	COR	FB	FS
GILTTG	0.33	0.80	0.28	0.09
GIADMT	0.15	0.87	0.01	-0.09
3D-GILTT	0.07	0.93	0.02	0.03

Tabela 5: Comparação estatística entre os modelos usando os dados de Kinkaid.

Modelo	NMSE	COR	FB	FS
GILTTG	0.37	0.68	0.08	-0.15
3D-GILTT	0.37	0.67	0.09	-0.09

baixo valor de NMSE e índice FB para esta simulação em relação às demais análises.

A fim de verificar a diferença dos resultados obtidos entre os modelos GILTTG e 3D-GILTT ajustou-se os valores previstos em relação aos observados através de uma regressão linear (ver figuras (8) e (9)) para ambos os experimentos, onde quanto mais próximo a sua interseção com a origem e quanto mais próxima é a inclinação com a unidade, melhor será a aproximação. Para realizar a validação do modelo, foi utilizado um parâmetro $k = \sqrt{(a-1)^2 + (b/\bar{C}_o)^2}$ onde $\bar{C}_o = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} C_{oi}$ (MELLO, 2010), sendo assim, um resultado idêntico a zero indica uma combinação perfeita entre o

modelo e os resultados experimentais. Aqui a é o declividade, b a intersecção, C_{oi} é a concentração dos dados experimentais e $\bar{C}_o$ sua média aritmética. Uma vez que a experiência é de caráter estocástico, enquanto que as propriedades estocásticas estão ocultas nos parâmetros do modelo, as flutuações observadas estão presentes. No entanto, em comparação, observa-se nas Tabela (6) e (7) que a presente abordagem produz uma melhor descrição dos dados para o experimento de Copenhagen. Analisando as figuras (8) e (9), os gráficos mostram claramente que está faltando algo a ser contemplado pelo modelo, o que interfere na obtenção de melhores resultados. Pode-se observar, principalmente na figura (9), que se houvesse a presença de algum parâmetro durante a solução, os resultados se ajustariam a reta central, sendo o ideal nessa análise. Para determinar tal carência, terá que ser feito um estudo mais aprofundado, que não é o objetivo dessa dissertação.

Tabela 6: Comparação da regressão linear da GILTTG e 3D-GILTT para o experimento de Copenhagen.

Modelo	Regressão	R^2	k
GILTTG	$\bar{C}_p = 0.77\bar{C}_o + 0.004$	0.8	0.23
3D-GILTT	$\bar{C}_p = 0.91\bar{C}_o + 0.34$	0.93	0.1

Tabela 7: Comparação da regressão linear da GILTTG e 3D-GILTT para o experimento de Kinkaid.

Modelo	Regressão	R^2	k
GILTTG	$\bar{C}_p = 0.79\bar{C}_o + 7.32$	0.68	0.25
3D-GILTT	$\bar{C}_p = 0.73\bar{C}_o + 10.09$	0.67	0.32

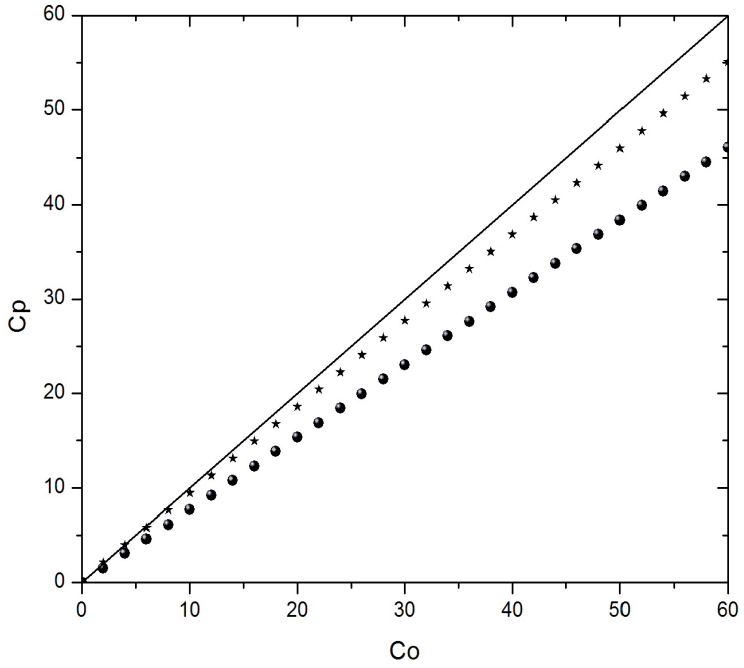

Figura 8: Regressão linear para a GILTTG (círculos) e 3D-GILTT (estrela) utilizando os dados de Copenhagen. A reta bissetriz foi inserida como uma guia visual.

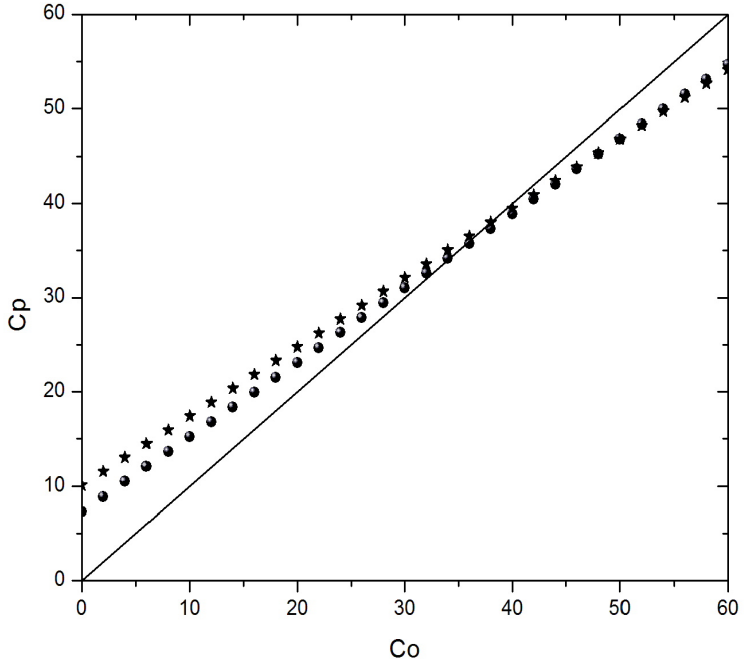

Figura 9: Regressão linear para a GILTTG (círculos) e 3D-GILTT (estrela) utilizando os dados de Kinkaid. A reta bissetriz foi inserida como uma guia visual.

6 SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM CASO DE QUEIMADAS

O uso apropriado dos modelos de transporte e difusão na atmosfera deve ser baseado no estudo das suas capacidades de representarem corretamente situações reais. Quando possível, é recomendada a avaliação para testar a sua capacidade quando usado com os dados e cenários topográficos e meteorológicos típicos da área a ser analisada (MOREIRA; VILHENA; CARVALHO, 2007).

Neste capítulo será abordada uma aplicação ao modelo descrito anteriormente. Será realizada uma análise em relação a dispersão de poluentes produzidos por focos de queimadas, sendo considerado um evento crítico de poluição produzido por essas emissões. Neste caso, as componentes micrometeorológicas utilizadas serão calculadas pelo WRF e inseridas no modelo matemático 3D-GILTT. Algumas alterações e suposições no modelo devem ser consideradas a fim de tornar os resultados coerentes com a física do problema.

6.1 Queimadas

Queimadas são processos que ocorrem devido a queima da biomassa de determinado ecossistema. Esse processo pode ocorrer de forma natural ou por iniciativa humana. Atenção maior às queimadas foi dirigida em 2007, onde incêndios florestais na Grécia e nos Estados Unidos da América geraram grandes problemas ambientais, sociais e econômicos. No Brasil, no período compreendido entre os meses de julho a outubro, conhecido por apresentar estações secas nas regiões Amazônica e do Brasil Central, ocorrem grandes quantidades de queimadas antropogênicas em áreas de cerrado e de floresta tropical (COUTINHO; KLEIN, 2002).

O principal uso de queimadas é no manejo e preparação do solo para as atividades agropecuárias, com o uso do fogo de forma controlada, isto é, o uso do fogo prescrito de maneira criteriosa e técnica (SOARES, 1995) tornando-se uma valiosa ferramenta no manejo florestal.

Os efeitos das queimadas sobre o ecossistema estão diretamente relacionados

com a intensidade das mesmas (SOARES, 1995). Queimadas de alta intensidade destroem a fauna e flora local, danificam e poluem o solo e o ar, podendo até destruir propriedades e matar pessoas, envolvidas ou não com o combate.

As emissões de gases e material particulado, geradas durante as queimadas possuem vários efeitos importantes no equilíbrio climático e biogeoquímico do planeta (FREITAS et al., 2005). Partículas de aerossóis liberadas nas queimadas alteram o balanço de energia da Terra, pois refletem e espalham a radiação solar de volta ao espaço, como também, retém a radiação refletida pela superfície terrestre causando o aquecimento da atmosfera. Alterações no ciclo hidrológico também são observadas em escala regional, devido a alterações na dinâmica de formação das nuvens por meio da quantidade de núcleos de condensação de nuvem presentes. Na presença de radiação solar e altas concentrações de óxidos de nitrogênio (NOx), a oxidação de monóxido de carbono (CO) e hidrocarbonetos é acompanhada de formação de ozônio (O_3), outro gás de efeito estufa. Além disso, o transporte destas emissões de queimadas para regiões distantes das fontes emissoras e a deposição seca e úmida durante esse transporte podem, ao longo do tempo, produzir alterações nos ciclos biogeoquímicos naturais e na dinâmica de nutrientes tanto das regiões emissoras quanto das regiões receptoras.

(FREITAS et al., 2005) identifica alguns estágios da evolução de uma queimada: ignição, chamas, brasas e extinção. A ignição da biomassa pode ser natural ou antropológica, além disso, o tipo e umidade da vegetação, condições do ambiente, como umidade relativa, temperatura e vento também são fatores importantes para que ela aconteça. Na fase de chamas temos a formação das labaredas devido a liberação da energia pela quebra das moléculas da biomassa, neste estágio há grande quantidade de material sendo liberado para a atmosfera. Na fase de brasas, a temperatura cai, mas continua havendo um processo de queima. Neste período, há a formação de grande quantidade de diferentes tipos de compostos, pois a queima se dá de forma incompleta. Muitos são os fatores que levam à extinção da queimada além da redução da biomassa disponível, como por exemplo, o resfriamento convectivo devido ao entranhamento de ar mais frio, resfriamento radiativo e o baixo suprimento de oxigênio em relação à densidade e tamanho da biomassa.

Os produtos emitidos pelas queimadas sofrem alguns processos de transporte durante seu ciclo na atmosfera (Figura 10). As queimadas liberam gases e partículas a uma temperatura maior que a da atmosfera, sendo assim o transporte vertical deve-se à uma flutuação positiva desses produtos, devido a diferença de temperatura da emissão do contaminante e da temperatura do ar. A ascensão dos contaminantes se dará até atingirem a estabilidade termodinâmica, além disso, turbilhões gerados pela interação da atmosfera com a fumaça também afetarão a elevação da pluma.

Em (MIRANDA; BUSTAMANTE; MIRANDA, 2002) é analisado o comportamento

de queimadas baseado na dinâmica do comburente. Nestes estudos mostra-se que a queimada no cerrado, contendo principalmente vegetação rasteira, é rápida, atinge grande extensões e consome entre 50% e 100% do material combustível (CASTRO-NEVES, 2007). A fumaça produzida é injetada principalmente dentro da camada limite planetária (CLP), sendo transportada horizontalmente pela advecção dos sistemas que se encontram dentro desta. Em compensação, a queima de uma grande quantidade de biomassa, como de uma floresta, também impulsionará os produtos gerados para a média e alta troposfera, neste caso os sistemas de mesoescala compreendidos nestas faixas transportarão os poluentes para regiões distantes de onde estão sendo produzidos.

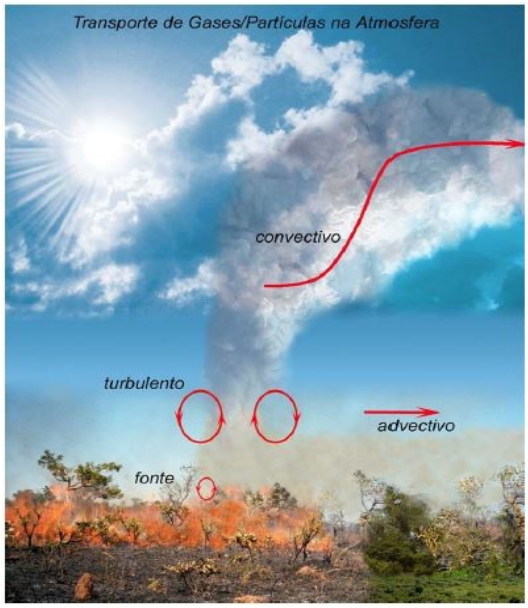

Figura 10: Principais mecanismos físicos de redistribuição de emissões de queimadas na atmosfera. Fonte: (FREITAS et al., 2005)

O Inpe (Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais) realiza detecções periódicas de focos de queimadas na América do Sul. Para isso, são utilizados os dados obtidos das imagens do radiômetro VAS (*Visible Infrared Spin Scan Radiometer Atmospheric Sounder*) a bordo do satélite geoestacionário GOES (*Geostationary Operational Environmental Satellite*) e do sensor MODIS (*MODerate - Resolution Imaging Spectroradiometer*) a bordo dos satélites TERRA e AQUA. Todas as informações são integradas num sistema de informações geográficas e disponibilizadas na rede Internet em tempo quase real (FREITAS et al., 2005). Todo material é disponibilizado para consulta em (*http://www.inpe.br/queimadas/*). Como exemplo destes resultados temos a Figura (11), que mostra os focos de queimadas que aconteceram durante o mês de agosto de 2010.

Pode-se observar na Figura (11), que neste período há uma grande quantidade

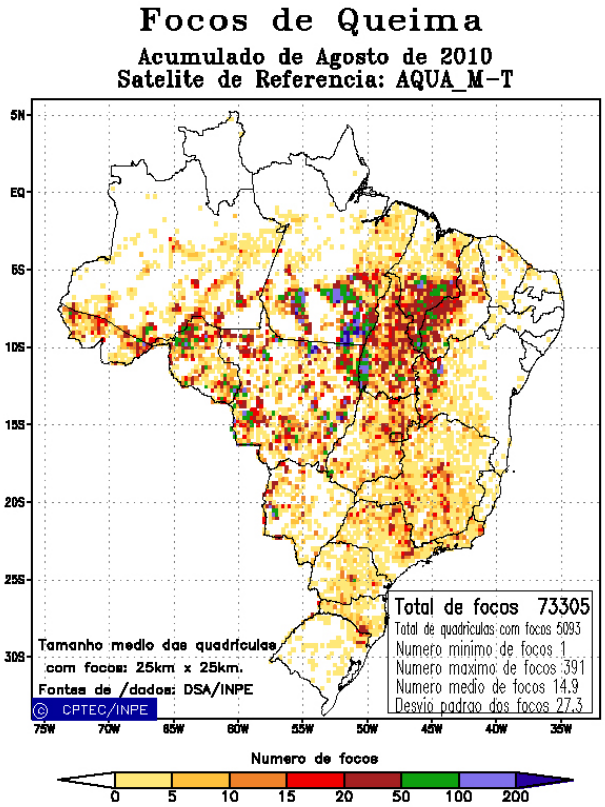

Figura 11: Acumulado de focos de queima durante o mês de agosto de 2010. Fonte: CPTEC/INPE

de focos de queimadas, ocorrendo principalmente na região do cerrado brasileiro. A partir disso, será investigado um problema de emissões de poluentes resultantes de queimadas e o transporte transfronteiriço destes poluentes. Especificamente, investigaremos um evento ocorrido no mês de agosto de 2010, conhecido como "chuva laranja", onde a pluma de poluentes advinda das queimadas ocorridas no cerrado brasileiro foi transportada até o Rio Grande do Sul no dia 22.08.2010.

6.2 WRF

O WRF (*Weather Research and Forecast*) é um modelo de previsão de meso-escala que apresenta um sistema de simulação atmosférica de última geração. É considerado o "*state-of-the-art*" entre os sistemas de modelagem atmosférica. Tem uma ampla gama de aplicações pois, sendo um modelo de previsão do tempo, tem grande aceitação em centros meteorológicos e grupos de pesquisas atmosféricas, contribuindo para estudos de modelagem da qualidade do ar, modelagens climáticas, previsão do tempo, entre outros.

Ele foi desenvolvido pelo trabalho conjunto de diversos órgãos, laboratórios de pesquisa e agências governamentais, como a *National Centers for Environment Pre-*

diction (NCEP), *National Oceanic and Atmospheric Administration* (NOAA) e o *National Center for Atmospheric Research* (NCAR). O modelo foi projetado para ser portátil, eficiente, flexível, extensível, fácil de manter e, compreensível. O sistema WRF está disponível ao público gratuitamente na página oficial do modelo *(www.mmm.ucar.edu/wrf/users/)*, podendo ser instalando em diversas plataformas computacionais.

O sistema de modelagem do WRF compreende diversos componentes (Figura 12). Os principais são: no pré processamento do WRF *Preprocessing System* (WPS); inicialização do WRF (*real*); execução do WRF; e pós-processamento (ARWpost). Em (IRIART; CARVALHO; PAREIRA NETO, 2011) é dada uma explicação clara sobre o modo geral de funcionamento do WRF. O WPS é um conjunto de três subsistemas (*geogrid, ungrib e metgrib*). Cada um desses sistemas prepara os dados que serão utilizados durante a simulação. O *geogrid* tem por função definir o domínio do modelo e interpolar os dados terrestres para as grades. A extração dos dados meteorológicos do formato GRIB (V1 e V2), é realizada pelo *ungrib*. O *metgrid* interpola horizontalmente os campos meteorológicos extraídos pelo ungrib para as grades do modelo definidas pelo geogrid. O programa *real* interpola verticalmente os campos do WRF. A execução, propriamente dita, do modelo é feita pelo WRF. Por último, a conversão das saídas para um formato que possa ser visualizado por aplicativos gráficos, por exemplo o GRADS, é efetuada pelo *ARWpost*.

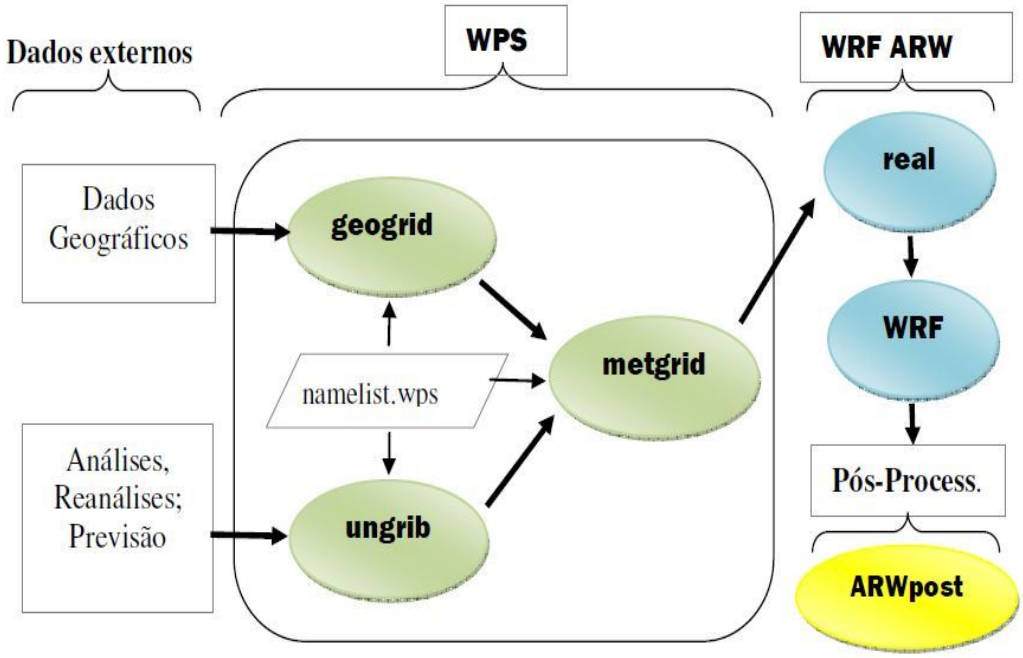

Figura 12: Representação esquemática do sistema de modelagem do WRF. Fonte: (IRIART; CARVALHO; PAREIRA NETO, 2011)

Durante o segundo ano de trabalhos e pesquisas para a dissertação foram de-

dicadas duas disciplinas (Tópicos Especiais em Fenômenos do Transporte: Modelo Numérico de Previsão do Tempo; e Tópicos Especiais em Fenômenos do Transporte: Inicialização de Modelos de Dispersão de Poluentes Atmosféricos) para a inicialização dos estudos ao sistema WRF. Neste período foi realizada a instalação, trabalhado casos testes e aplicações, além de várias discussões a partir de erros cometidos durante da modelagem do WRF para a simulação do evento proposto.

Sendo assim, neste trabalho, utilizou-se dados atmosféricos de Reanálise produzidos pelo NCEP (*http://rda.ucar.edu/*) com formato GRIB2, com 1° de resolução horizontal para a entrada do modelo WRF. Estas informações serviram como condições iniciais e de fronteira, que eram atualizadas a cada 6h. As simulações são realizadas em quatro dimensões (x, y, z, t), pois a cada passo de tempo, a malha horizontal repete-se em todos os níveis verticais avaliados.

Para o estudo de um caso de queimada no Brasil, havendo transporte transfronteiriço da pluma produzida, foi utilizada uma grade quadrada de 400 por 400 pontos nas direções horizontais, com um distanciamento de 10 quilômetros entre si, representando assim todo o território brasileiro. A grade utiliza os 28 níveis verticais padrão do WRF. Nesta análise, devido a dimensão da área a ser estudada, considerou-se a queimada como uma fonte pontual. O ponto de liberação escolhido para retirar os dados micrometeorológicos foi baseado na localização dos principais focos de queimadas da região norte no mês de agosto de 2010 da Figura (11).

Como exemplo dos resultados obtidos, é apresentada a Tabela 8 contendo os parâmetros meteorológicos extraídos da simulação WRF para o dia 20 de agosto de 2010, com um intervalo de três em três horas entre cada coleta de dados, onde z_i é a altura da camada limite, u_* é a velocidade de fricção, u_{10} e v_{10} são as componentes do vento na altura $10m$, L comprimento de Obukhov e T_a a temperatura ambiente.

Tabela 8: Parâmetros meteorológicos gerados pela simulação do WRF para o dia 20 de agosto de 2010.

Horário (h)	z_i (m)	u_* (ms^{-1})	u_{10} (ms^{-1})	v_{10} (ms^{-1})	L (m)	T_a (K)
00	28.835	0.123	-1.283	1.499	8.240	293.136
03	28.326	0.100	-0.224	0.708	6.854	287.858
06	28.094	0.100	0.948	0.319	7.048	285.585
09	187.168	0.261	-0.281	0.346	-14.994	292.050
12	1708.266	0.654	-2.848	0.543	-96.294	300.711
15	1902.611	0.553	-2.283	0.221	-87.644	302.852
18	460.328	0.100	-1.189	0.430	8.161	302.164
21	29.270	0.141	-1.284	1.851	11.023	296.914

6.3 Campo de Vento

Para o perfil de vento foram utilizados os dados obtidos pelo modelo WRF. Nas figuras (13) e (14) pode-se ver os dados da magnitude do vento (u_{10}, v_{10}). Estes dados foram gerados para o período de 9 a 26 de agosto de 2010 com um intervalo de três em três horas, totalizando 137 gráficos. O foco principal será dado aos dias que antecedem o evento da "chuva laranja" no Rio Grande do Sul, sendo assim, a análise começa às 0 horas do dia 20 até às 0 horas do dia 22. Sendo alguns destes resultados mostrados nas figuras (13) e (14).

6.4 Coeficiente de Difusão

Para o problema abordado neste capítulo da dissertação utiliza-se o coeficiente de difusão válido para todas as condições de estabilidade, ou seja, 24 horas (RIZZA et al., 2011).

Com base na teoria de Taylor (TAYLOR, 1921), Batchelor (BATCHELOR, 1950) propôs que, sob a hipótese de turbulência homogênea, o coeficiente de difusão pode ser expresso como:

$$K_\alpha = \frac{d}{dt}\left(\frac{\sigma_\alpha^2}{2}\right) = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin(2\pi n t \beta_i^{-1})}{n} dn, \tag{97}$$

onde $\alpha = (x, y, z)$ e $i = u, v, w$, $F_i^E(n)$ é o valor do espectro de energia Euleriano normalizado pela variância da velocidade Euleriana, e σ_i^2 corresponde à variância Euleriana do campo de vento turbulento. Seguindo (WANDEL; KOFOED-HANSEN, 1962), $\beta_i = \left(\frac{\pi U^2}{16\sigma_i^2}\right)^{\frac{1}{2}}$. Para grandes tempos de viagem de difusão ($t \to \infty$), a função de filtro na integral da equação (97) seleciona $F_i^E(n)$ na origem do espaço de frequência, tal como a taxa de dispersão torna-se independente do tempo de viagem da fonte, e pode ser expressa como uma função de propriedades locais de turbulência:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(0)}{4} \tag{98}$$

na qual $F_i^E(0)$ é o valor do espectro de energia Euleriano normalizado em $n = 0$. Deste modo, o coeficiente de difusão está diretamente associado à energia contida nos turbilhões que são as principais contribuições para o transporte turbulento. A fim de utilizar a equação (98), é preciso encontrar uma forma analítica para o espectro Euleriano adimensional. Suponha-se, aqui, que a distribuição espectral de energia cinética turbulenta é uma superposição de componentes de flutuação e de cisalhamento. Tal modelo de energia cinética turbulenta pode ser avaliado como uma boa aproximação para a CLP real, em que a produção de turbulência é devido a ambos

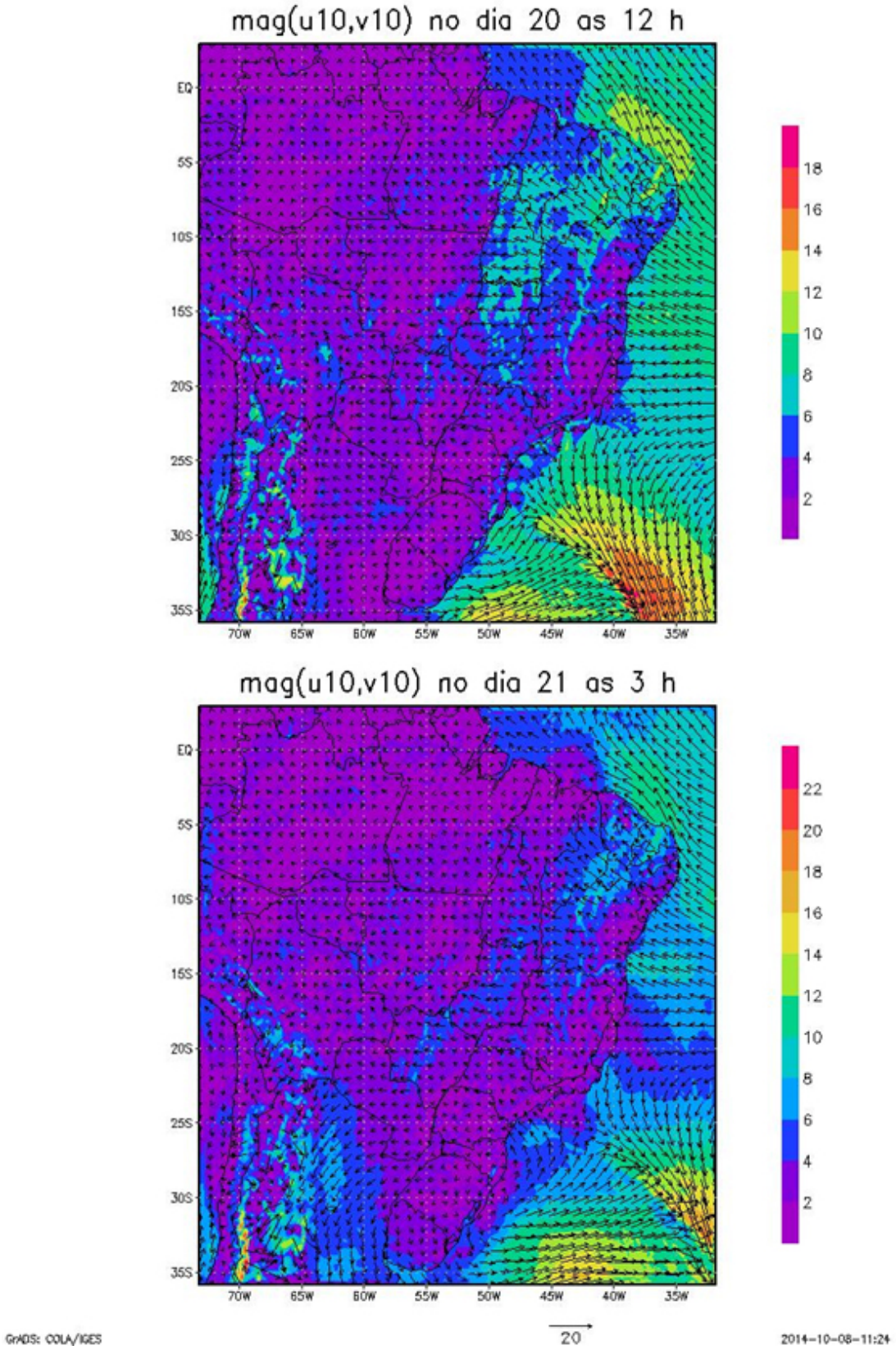

Figura 13: Magnitude (m/s) e campo do vento médio do dia 20 a 22 de agosto de 2010 simulados pelo WRF.

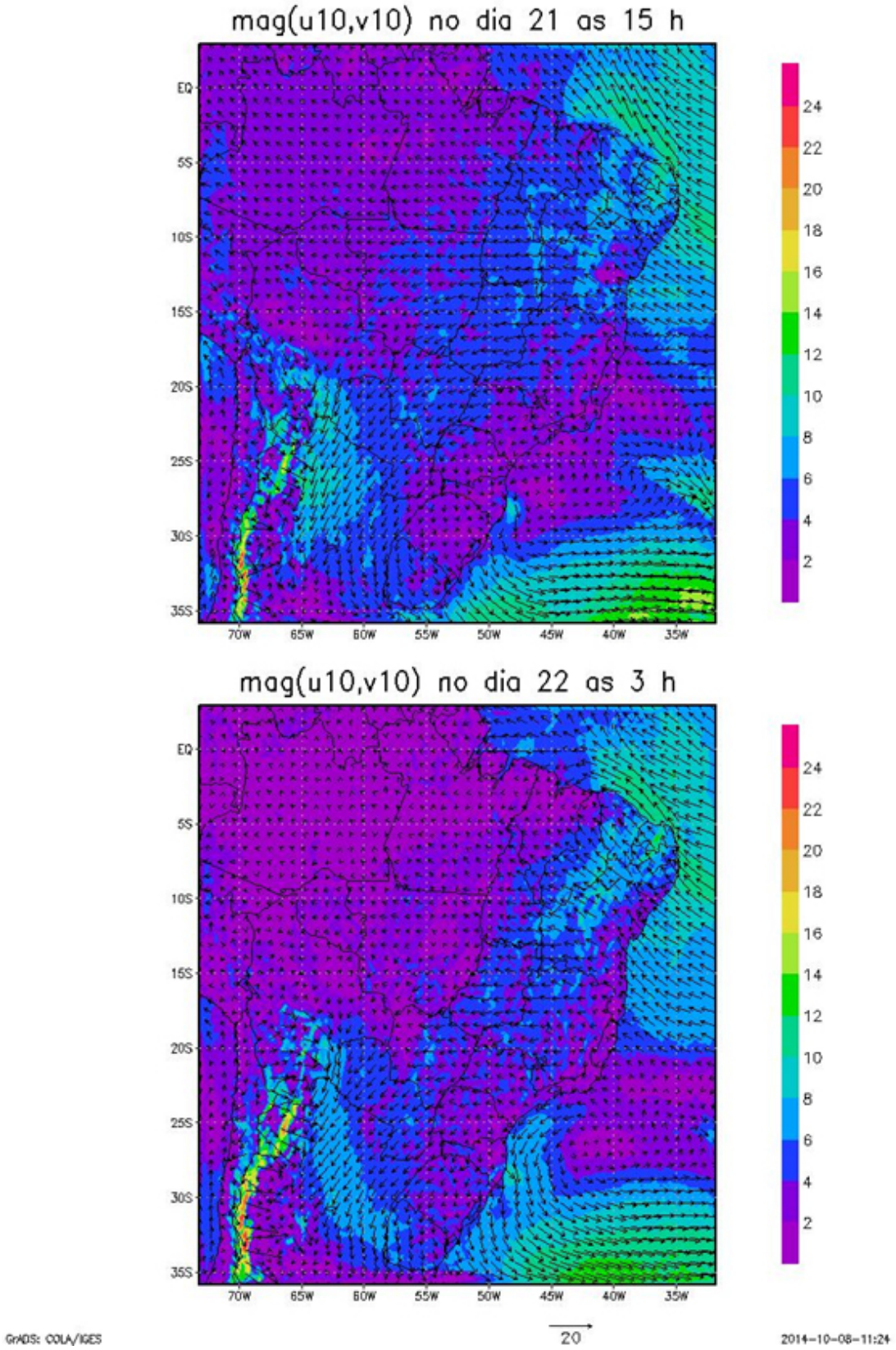

Figura 14: Magnitude (m/s) e campo do vento médio do dia 20 a 22 de agosto de 2010 simulados pelo WRF.

os mecanismos (HOJSTRUP, 1982) (MOENG; SULLIVAN, 1994). Nestas condições, pode-se escrever o espectro Euleriano dimensional como $S_i^E(n) = S_{ib}^E(n) + S_{is}^E(n)$, em que os subscritos b e s representam flutuação e cisalhamento respectivamente.

Uma forma analítica para o espectro dimensional em turbulência convectiva tem sido relatada em (DEGRAZIA; VELHO; CARVALHO, 1997)

$$S_{ib}^E(n) = \frac{0.98c_i\left(\frac{nz}{\bar{u}}\right)}{n\left(f_{mi}^*\right)^{\frac{5}{3}}\left(1+1.5\frac{\frac{nz}{\bar{u}}}{f_{mi}^*}\right)}\Psi_{\epsilon b}^{\frac{2}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} w_*^2 \ , \tag{99}$$

enquanto que para a turbulência mecânica (DEGRAZIA; MORAES, 1992)

$$S_{is}^E(n) = \frac{1.5c_i\left(\frac{nz}{\bar{u}}\right)}{n\left(f_{mi}\right)^{\frac{5}{3}}\left(1+1.5\frac{\frac{nz}{\bar{u}}}{f_{mi}}\right)}\Phi_{\epsilon s}^{\frac{2}{3}}u_*^2 \tag{100}$$

onde $\Psi_{\epsilon b} = \frac{\epsilon_b h}{w_*^3}$ e $\Phi_{\epsilon s} = \frac{\epsilon \kappa z}{u_*^3}$ são as funções de taxas de dissipações dimensionais, ϵ_b e ϵ_s são as taxas de dissipação convectiva e mecânica da energia cinética turbulenta, f_{mi}^* é a frequência normalizada dos picos espectrais, independentemente da estratificação, e f_{mi} é a frequência reduzida com a velocidade média do vento $\bar{u}$ na camada de mistura.

O espectro adimensional $F_i^E(n)$ na equação (98) é obtido através da normalização do espectro dimensional com a variância total, $\sigma_i^2 = \int_0^\infty S_i^E(n)dn$, isto é:

$$F_i^E(n) = \frac{S_i^E}{\sigma_i^2} = \frac{S_{ib}^E(n) + S_{is}^E(n)}{\sigma_i^2} \ . \tag{101}$$

A variância total da velocidade do vento é obtida pela soma das variâncias mecânica e convectiva:

$$\sigma_i^2 = \int_0^\infty \left(S_{ib}^E(n) + S_{is}^E(n)\right) dn = \sigma_{ib}^2 + \sigma_{is}^2 \tag{102}$$

Fazendo uso das equações (97), (99), (100) e (101), acaba-se com:

$$K_\alpha = \frac{\beta_i}{4}\left(S_{ib}^E(0) + S_{is}^E(0)\right) \tag{103}$$

que para a componente w, torna-se:

$$K_z = \frac{\beta_i}{4}\left(\frac{0.98c_w\left(\frac{z}{\bar{u}}\right)}{n(f_{mw}^*)^{\frac{5}{3}}}\Psi_{\epsilon b}^{\frac{2}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} w_*^2 + \frac{1.5c_w\left(\frac{z}{\bar{u}}\right)}{n(f_{mw})^{\frac{5}{3}}}\Phi_{\epsilon s}^{\frac{2}{3}}u_*^2\right) \tag{104}$$

Com base nos dados meteorológicos de mesoescala, pode-se determinar os coeficientes de difusividade turbulenta para cada hora específica.

6.5 Modificações a Serem Feitas no Modelo e Resultados Preliminares

Ao realizar simulações com informações relativas a uma queimada como fonte emissora, pode-se observar que o modelo não representou satisfatoriamente o problema em questão. Algumas suposições sobre estas limitações podem ser feitas, dentre elas: tratar uma queimada, tipicamente uma fonte área, como uma fonte pontual e, também, sobre as condições de contorno estarem restringindo a pluma dentro da camada limite, quando, na verdade, ela eleva para além dos limites da CLA. Sendo assim, algumas propostas foram pensadas para contornar os problemas observados e servir como passo inicial para pesquisas futuras nesta área. A modificação do tipo de fonte não foi trabalhada nesta dissertação mas, a seguir, apresentam-se duas modificações do modelo, permitindo uma melhor representação destes poluentes na CLA, e seus respectivos resultados preliminares. A primeira é uma alteração da condição de contorno na variável z, e a segunda uma ampliação da altura da CLA.

6.5.1 Modificação da Condição de Contorno

Para a primeira análise será modificada a condição de contorno (27), referente ao topo da camada limite (z_i), para uma de terceira espécie, admitindo assim, que o poluente saia da camada limite e não retorne, ou seja:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = V_{g_{top}} \bar{c} \quad em \;\; z = z_i \tag{105}$$

onde $V_{g_{top}}$ é a velocidade do poluente que passa da CLA.

Assim o novo problema de Sturm-Liouville que substitui a Eq.(43) terá condição nula no solo e uma condição de permeabilidade no topo da CLA:

$$\xi_i''(z) + \mu_i^2 \xi_i(z) = 0 \quad em \quad 0 < z < z_i \tag{106}$$

$$\frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} = 0 \quad em \;\; z = 0 \tag{107}$$

$$\frac{\partial \xi_i(z)}{\partial z} = H_z \xi_i(z) \quad em \;\; z = z_i \tag{108}$$

em que $H_z = \frac{V_{g_{top}}}{K_z}$. A solução do problema acima é encontrada tabelada em (ÖZISIK, 1974), tendo a forma:

$$\xi_i(z) = \cos(\mu_i z) \quad com \quad \mu_i \tan(\mu_i z_i) = H_z \tag{109}$$

onde os autovalores μ_i são representados por uma equação transcendental, sendo resolvidos numericamente pelo método de Newton-Raphson.

Para as simulações no modelo o valor da velocidade vertical $V_{g_{top}}$ utilizado foi de

aproximadamente $10m/s$ (FREITAS et al., 2007). O valor do coeficiente de difusão K_z no topo da CLA, calculado para o período de estudo foi de $1,99m^2/s$. Sendo assim o valor da variável H_z utilizado na rotina do programa foi de aproximadamente 5. Abaixo temos a representação das isolinhas de concentração adimensional após 24 horas da liberação.

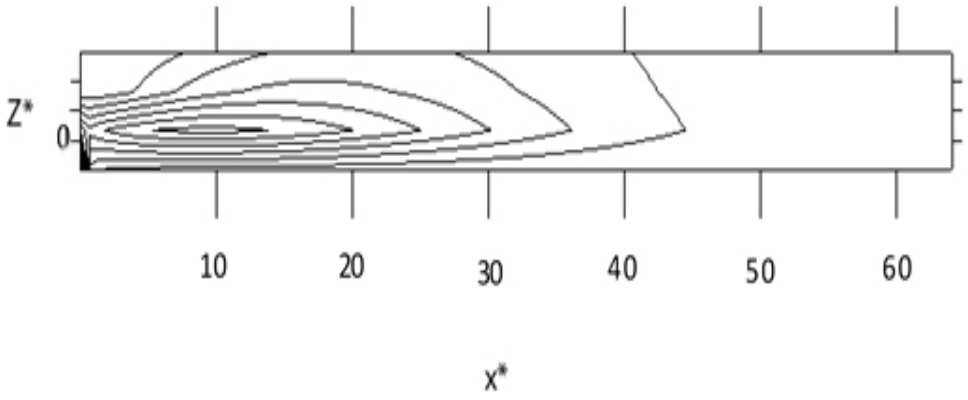

Figura 15: Isolinhas de concentração tridimensional preditas pelo modelo ($C^* = \bar{c}uz_i/Q$, $X^* = xw_*/uz_i$, $Z^* = z/z_i$) para o dia 21.08.10 às 24h.

Na figura (15) temos uma representação das isolinhas de concentração adimensionais. Pode-se perceber que ocorre a saída do poluente para além da camada limite, devido a alteração da condição de contorno do problema, representando de uma forma mais realística o transporte do poluente.

6.5.2 Modificação da Altura da CLA

Uma segunda hipótese para melhorar as soluções, mantendo-se as condições originais do problema inicial, é assumir que a camada limite (z_i) é representada por um $(z_i + \Delta_h)$, onde Δ_h é um valor de prolongamento para a CLA.

A mudança da altura da CLA, será efetuada na condição de contorno (27), assim:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em \;\; z = z_i + \Delta_h \tag{110}$$

A seguir, na figura (16), apresenta-se o gráfico da variação do fluxo do poluente em relação ao crescimento do valor de Δ_h da altura da CLA. Nele, observa-se que o fluxo tende a 0 quanto maior o valor de Δ_h estipulado, neste caso 3000 m. Comportamento similar é visualizado na figura (17), ocorrendo a diminuição da concentração de poluente conforme o aumento da altura da CLA.

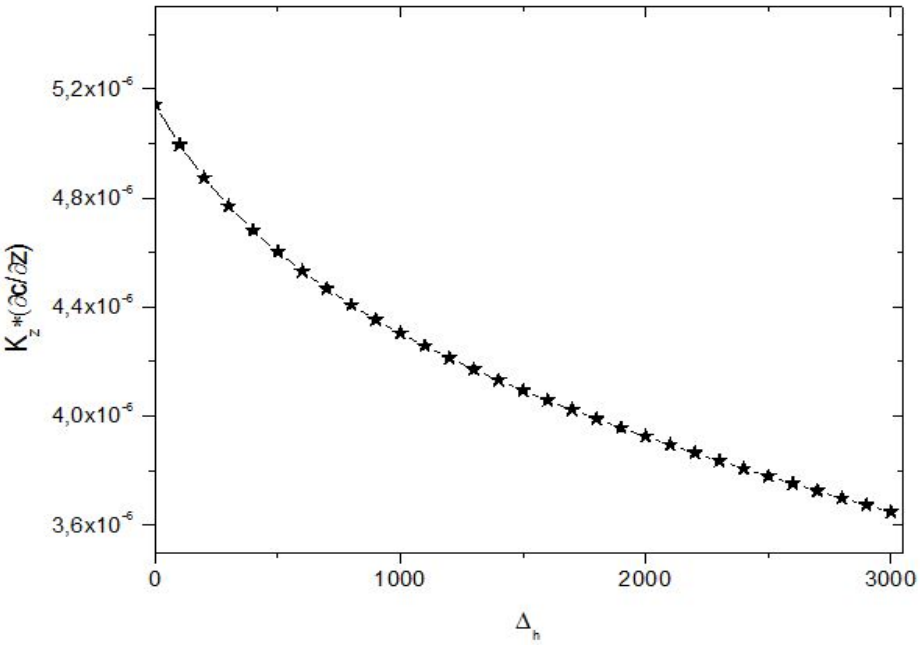

Figura 16: Gráfico do fluxo de poluentes em relação a variação Δ_h da camada limite.

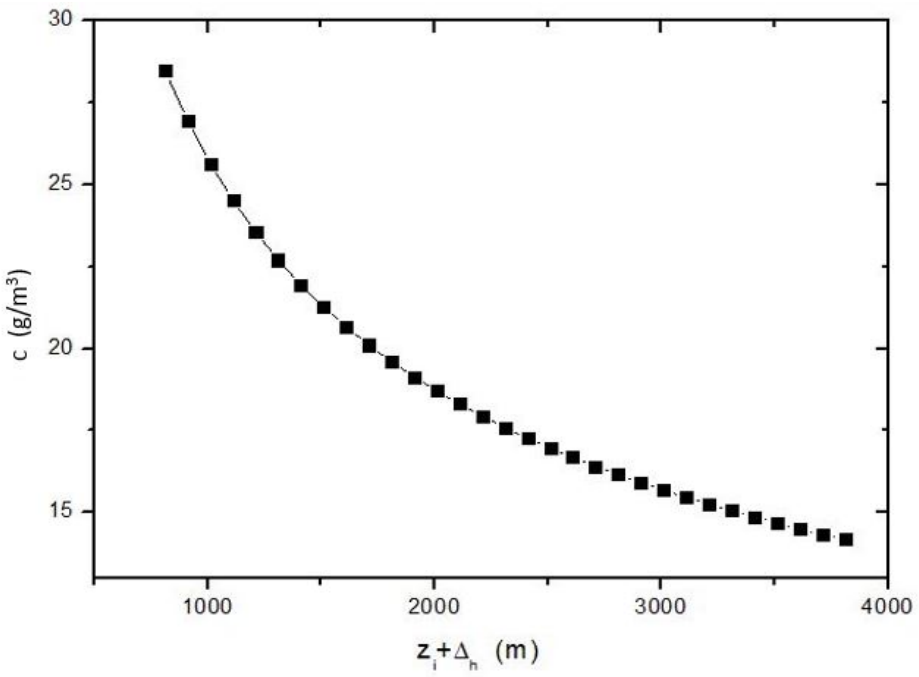

Figura 17: Gráfico da concentração em relação a altura $z_i + \Delta_h$ da camada limite.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

O modelo proposto apresentou resultados positivos no primeiro teste, com boa concordância para os dados experimentais de Copenhagen e Kinkaid. Em comparação, a presente abordagem obteve soluções aceitáveis para a equação de advecção-difusão tridimensional e, além disso, as concentrações de traçador preditas estão mais próximas dos valores observados, quando comparadas com outras abordagens da literatura. Embora o Teoria K seja conhecida por ter as suas limitações, as análises realizadas mostraram-se em um nível satisfatório e, portanto, apoia-se o uso de tal abordagem para os fenômenos de dispersão de microescala.

Uma vez que o modelo foi testado e validado utilizando dados de experimentos da literatura, pode-se pensar em uma simulação mais realística, visando testar o modelo apresentado. Nesta dissertação foi escolhido o caso do transporte e difusão da pluma de poluentes emitidos a partir de queimadas, principalmente para grandes distâncias das fontes. As queimadas incluem a queima de florestas, savanas e terras agrícolas. Estas ações emitem à atmosfera grande quantidade de gases e partículas que, a curto ou longo prazo, afetam tanto o clima regional como o global devido as suas interações com a radiação solar e processos químicos e físicos na atmosfera. Vale ressaltar que em tal situação o modelo de dispersão deverá estar preparado e modificado para receber informações dos campos meteorológicos variáveis no tempo e no espaço.

Nesse sentido, simulações com o modelo de mesoescala WRF foram realizadas para extrair informações do campo de vento e parâmetros de camada limite planetária. Estas simulações foram geradas durante o segundo ano de trabalhos e pesquisas para a dissertação, onde foram dedicadas duas disciplinas para a inicialização dos estudos ao sistema WRF. Neste período foi realizada a instalação, trabalhado casos testes e aplicações, além de várias discussões a partir de erros cometidos durante a modelagem do WRF para a simulação do evento proposto. Os dados produzidos são utilizados no modelo de dispersão para representar de forma mais real o comportamento micrometeorológico do local estudado. Devido a algumas limitações do modelo (considerar uma queimada, tipicamente uma fonte área, como uma fonte pontual e, condições de contorno restringindo a pluma dentro da camada limite), sugerem-se

certas modificações, a fim de contornar os problemas observados, e fornecer uma ideia inicial para pesquisas futuras nessa área. Nesta dissertação, duas hipóteses foram trabalhas: a alteração da condição de contorno na variável z e; uma ampliação da altura da CLA. Os resultados preliminares obtidos com a aplicação dessas metodologias representaram de forma mais precisa o transporte do poluente. Também deve-se levar em consideração que o método matemático GILTT, tem sua aplicação na modelagem de eventos de microescala, sendo assim, os erros nos resultados também são provenientes desta metodologia, uma vez que as queimadas emitem gases e partículas para sistemas de larga escala. Mas deve-se enfatizar que, as análises geradas contribuirão para problemas futuros, onde, por exemplo, resultados obtidos na microescala serão acoplados em simulações para a mesoescala.

Contudo, é importante considerar o caráter aproximado do modelo 3D-GILTT adaptado à dispersão de queimadas. Com isso, propõe-se, como trabalho futuro, novas alterações e análises tais como a modificação do tipo de fonte, tratada nesta dissertação como pontual e contínua para uma fonte área, bem como aprofundar o estudo sobre o assunto. Pretendendo-se assim, mostrar a aptidão do método analítico proposto para resolver problemas físicos realísticos da dispersão de poluentes na CLP.

REFERÊNCIAS

ALVES, L. S.; COTTA, R. M.; PONTES, J. Stability analysis of natural convection in porous cavities through integral transforms. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.45, p.1185–1195, 2002.

ANFOSSI, D. **Dispersão lagrangeana na camada limite planetária**. Editora da UFRGS, Porto Alegre: Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária, Organizadores: D.M. Moreira, J.C. Carvalho e M.T. Vilhena, 2005.

ARYA, P. Modeling and parameterization of near-source difussion in weak winds. **Journal of Applied Meteorology**, v.34, p.1112–1122, 1995.

ARYA, S. P. **Air pollution meteorology and dispersion**. [S.l.]: Oxford University Press, New York, 1999.

BATCHELOR, G. K. **The application of the similarity theory of turbulence to atmospheric diffusion**. [S.l.]: Quart. J. Royal Meteor. Soc., 1950. v.76, p.133–146.

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

BLACKADAR, A. K. **Turbulence and diffusion in the atmosphere**: lectures in Environmental Sciences. [S.l.]: Springer-Verlag, 1997.

PREDICTIONS, P. rise (Ed.). **Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses**. Boston, MA: D. A. Haugen, American Meteorological Society, 1975. p.59–111.

BULIGON, L.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Uma solução semi-analítica da disperso de poluentes com a equao do telgrafo e fluxo contra-gradiente. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.21, p.77–85, 2006.

BUSKE, D.; QUADROS, R.; VILHENA, M.; MOREIRA, D. Simulação analítica da dispersão analítica de poluentes atmosféricos tridimensional. **Revista Ciência e Natura**, p.29–32, 2009.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D. A 3D analytical solution of the advection-diffusion equation applied to pollutant dispersion in atmosphere. **Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 2009.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; BODMANN, B.; TIRABASSI, T. **Analytical Model for Air Pollution in the Atmospheric Boundary Layer**. [S.l.]: Air Pollution - Book 1, Organized by: M. Khare, 2012a. v.1, p.39–58.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; BODMANN, B. **An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; S. Potapenko, 2007a. p.27–36.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; FISCH, G. Simulation of the transport and diffusion of an atmospheric gases plume in the alcântara launch center. **Proceedings of the 6th Jordanian International Mechanical Engineering Conference, Amman, Jordânia**, 2007b.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; SEGATTO, C. F.; QUADROS, R. S. **A General Analytical Solution of the Advection-Diffusion Equation for Fickian Closure**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; P. Harris, 2011a. v.1, p.25–34.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BODMANN, B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. **Journal of Environmental Protection**, v.4, p.1–10, 2012b.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; QUADROS, R.; SEGATTO, C. F. Modelo analítico tridimensional de dispersão de poluentes na camada limite atmosférica. **Revista Ciência e Natura**, v.1, p.115–118, 2011b.

CARVALHO, D. L. **Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva**. 1996. Dissertação de mestrado — Mestrado em Meteorologia, USP.

CASTRO-NEVES, B. M. d. **Efeito de queimadas em áreas de cerrado stricto sensu e na biomassa de raízes finas**. Brasília: Instituto de Ciências Biológicas, Universidade de Brasília, 2007.

CATALANO, G. D. An analytical solution to the turbulent diffusion equation with mean vertical wind. **Southeastern Sem. Thermal**, p.143–151, 1982.

CAUGHEY, S. J. **Diffusion in the convective boundary layer**. Reidel, Boston: Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling, Editted by F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, 1982.

CHEROTO, S.; MIKHAILOV, M. D.; KAKAÇ, S.; COTTA, R. M. Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms. **International Journal of Thermal Sciences**, v.38, p.613–621, 1999.

CHRYSIKOPOULOS, C.; HILDEMANN, L. M.; ROBERTS, P. V. A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground level area source. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.747–757, 1992.

COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na camada limite convectiva. **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2004.

COSTA, C. P.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T. **A Closed-Form Formulation for Pollutant Dispersion in the Atmosphere**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Computational Methods, Organized by: C. Constanda; M. E. Perez, 2010. v.2, p.141–150.

COSTA, C. P.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere. **Journal of Engineering Mathematics**, v.74, p.159–173, 2012.

COSTA, C.; 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**, 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.

COTTA, R. M.; BARROS, F. P. J. Integral transforms for three-dimensional steady turbulent dispersion in rivers and channels. **Applied Mathematical Modelling**, v.31, p.2719–2732, 2007.

COTTA, R.; MIKHAYLOV, M. **Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. Baffins Lane, Chinchester, England: John Wiley & Sons, 1997.

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

COUTINHO, L. M.; KLEIN, A. O bioma do cerrado. **Eugen Warming eo cerrado brasileiro: um século depois**, p.77–91, 2002.

DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M.; CAMPOS, C. R. J.; CARVALHO, J. C.; VILHENA, M. T. Comparison between an integral and algebraic formulation for the eddy diffusivity using the Copenhagen experimental dataset. **Il Nuovo Cimento**, v.25C, p.207–218, 2002.

DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, p.1233–1240, 2001.

DEGRAZIA, G. A.; VELHO, H. F. C.; CARVALHO, J. C. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contributions to Atmospheric Physics**, p.57–64, 1997.

DEGRAZIA, G. A.; VILHENA, M. T.; MORAES, O. L. L. An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion. **Il Nuovo Cimento**, v.19C, p.399–403, 1996.

DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.34, p.3575–3583, 2000.

DEGRAZIA, G.; MORAES, O. A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.58, p.205–214, 1992.

DEMUTH, C. A. Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1255–1258, 1978.

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

FREITAS, S. R.; LONGO, K. M.; CHATFIELD, R.; LATHAM, D.; SILVA DIAS, M. A. F.; ANDREAE, M. O.; PRINS, E.; SANTOS, J. C.; GIELOW, R.; CARVALHO JR, J. A. Including the sub-grid scale plume rise of vegetation fires in resolution atmospheric transport models. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v.7, p.3385–3398, 2007.

FREITAS, S. R.; LONGO, K. M.; DIAS, M.; DIAS, P. Emissões de queimadas em ecossistemas da América do Sul. **Estudos Avançados**, v.19, n.53, p.167–185, 2005.

GRYNING, S. E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, v.23, n.4, p.651–660, 1984.

GRYNING, S.; HOLTSLAG, A.; IRWING, J.; SILVERSTEN, B. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment**, v.21, n.1, p.79–89, 1987.

GUERRERO, J. S. P.; PIMENTEL, L. C. G.; OLIVEIRA JR., J. F.; HEILBRON FILHO, P. F. L.; ULKE, A. G. A Unified Analytical Solution of the Steady-State Atmospheric Diffusion Equation. **Atmospheric Environment**, v.55, p.201–212, 2012.

HANNA, S.; PAINE, R. J. Hibrid plume dispersion model (HPDM) development and evaluation. **Journal of Applied Meteorology**, v.28, p.206–224, 1989.

HANNA, S. R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jacknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1385–1395, 1989.

HOJSTRUP, J. Velocity spectra in the unstable boundary layer. **Journal of Amospheric Sciences**, v.39, p.2239–2248, 1982.

IRIART, P. G.; CARVALHO, M. V. C.; PAREIRA NETO, A. V. **Manual de instalação, compilação e execução do sistema de modelagem numérica WRF no ICEA**. São José dos Campos: Subdivisão de Climatologia e Arquivo Meteorológico (PBCA), Instituto de Controle do EspaÃ§o Aéreo (ICEA), 2011.

IRWIN, J. S. A theorical variation of the wind profile power-low exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment**, v.13, 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**, v.23, p.1729–1732, 1989.

LAMB, R. G. A numerical study of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1297–1304, 1978.

LIU, C.; SZECSODY, J.; ZACHARA, J.; BALL, W. Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. **Advances in Water Resouces**, v.23, p.483–492, 2000.

MAGNO, R. N.; MACÊDO, E. N.; QUARESMA, J. N. Solutions for the internal boundary layer equations in simultaneously developing flow os power-law fluids within parallel plates channels. **Chemical Engineering Journal**, v.87, p.339–350, 2002.

MANGIA, C.; MOREIRA, D. M.; SCHIPA, I.; DEGRAZIA, G. A.; TIRABASSI, T.; RIZZA, U. Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.67–76, 2002.

MELLO, K. B. **Simulação da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária através da Solução da Equação de Langevin pelo Método de Decomposição**. 2010. Tese de doutorado — Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

MIKHAYLOV, M.; ÖZISIK. **Ünified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**. New York: John Wiley & Sons, 1984.

MIRANDA, H. S.; BUSTAMANTE, M. M.; MIRANDA, A. C. The fire factor. **The Cerrados of Brazil. Ecology and Natural History of a Neotropical Savanna**, p.51–68, 2002.

MOENG, C. H.; SULLIVAN, P. P. A comparison of shear and buoyancy driven planetary boundary layer flows. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.51, p.999–1022, 1994.

MOREIRA, D. M.; CARVALHO, J. C.; TIRABASSI, T. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. **Atmospheric Environment**, v.39, n.20, p.3643–3650, 2005.

MOREIRA, D. M.; COSTA, C. P.; VILHENA, M. T.; BRAUER, C. R.; CARVALHO, J. C.; DEGRAZIA, G. A. A new semi-analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the Planetary Boundary Layer. **Proceedings do 28th NATO/CCMS, Leipzig, Alemanha**, 2006.

MOREIRA, D. M.; FERREIRA NETO, P. V.; CARVALHO, J. C. Analytical solution of the Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation. **Environmental Modelling and Software**, v.20, p.1159–1165, 2005.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D. **On the GILTT Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer**. CRC Press, Boca Raton - Flórida: Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications, Organized by: D. Moreira; M. Vilhena, 2009. v.1, p.179–202.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL. **Atmospheric Environment**, v.40, p.3186–3194, 2006.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, p.1–17, 2009.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; CARVALHO, C. Tritium dispersion simulation in the atmosphere from ANGRA I Nuclear Power Plant. **International Journal of Nuclear Energy Science and Technology**, v.3, p.118–130, 2007.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; CARVALHO, C.; DEGRAZIA, G. A. Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion. **Environmental Modelling and Software**, v.20, n.10, p.1347–1351, 2004.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; COSTA, C. P. Comparison between analytical models to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **International Journal of Environment and Waste Management**, v.1, n.2, p.in press, 2008.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, C. A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant. **Ecological Modelling**, v.189, n.3-4, p.413–424, 2005.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; COSTA, C.; BODMANN, B. Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. **Water, Air and Soil Pollution**, v.177, p.411–439, 2006.

MOURA, A.; VILHENA, M.; DEGRAZIA, G. Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável. **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 1995.

NIEUWSTADT, F. T. M. An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.14, p.1361–1364, 1980.

NIEUWSTADT, F. T. M.; HAAN, B. J. An analytical solution of the one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation. **Atmospheric Environment**, v.15, p.845–851, 1981.

NIEUWSTADT, F. T. M.; VAN ULDEN, A. P. A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2119–2124, 1978.

OLESEN, H. R. Datasets and protocol for model validation. **International Journal of Environment and Pollution**, v.5, p.693–701, 1995.

OLESEN, H. R.; LARSEN, S. E.; HOJSTRUP, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.29, p.285–312, 1984.

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.

PEREIRA, L. M.; GUERRERO, J. S.; BRAZÃO, N.; COTTA, R. M. Compressible flow and heat transfer in ultracentrifuges hybrid analysis via integral transforms. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.45, p.99–112, 2002.

RIBEIRO, M.; CATALDI, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Estudo da dispersão de poluentes na atmosfera via transformação integral. **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, v.1, p.2969–2975, 2000.

RIBEIRO, M.; FERREIRA, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Efeito do meca- nismo de reação química sobre o transporte de contaminantes na região da camada limite atmosférica. **Proceedings do XII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2002.

RIZZA, U.; VILHENA, M. T.; BODMANN, B.; DEGRAZIA, G. A.; MANGIA, C. Micrometeorological dispersion parametrization for short range air pollution modelling in the site of nuclear power plant. **International Journal of Nuclear Energy Science and Technology**, 2011.

ROBERTS, O. F. T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. **Proceedings of the Royal Society of London**, v.104, p.640–648, 1923.

ROUNDS, W. Solutions of the two-dimensional diffusion equation. **American Geophysical Union**, v.36, p.395–405, 1955.

SCHUCH, D.; WEYMAR, G. J.; FURTADO, I.; QUADROS, R. S.; BUSKE, D. Simulação da dispersão de poluentes na camada limite atmosférica incluindo o efeito da deposição seca no solo. **Revista Ciência e Natura**, v.1, p.127–130, 2011.

SCRIVEN, R. A.; FISHER, B. A. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II - The efect of turbulent diffusion. **Atmospheric Environment**, v.9, p.59–69, 1975.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric chemistry and physics of air pollution**. New York: John Wiley & Sons, 1997.

SMITH, F. B. The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere. **Journal of Fluid Mechanics**, v.2, p.49–76, 1957.

SMITH, F. B. **Convection-diffusion processes below a stable layer**. London: Meteorological Research Committee, 1957. (1048).

SOARES, R. V. Queimas controladas: prós e contras. **Fórum Nacional Sobre Incêndios Florestais**, p.6–10, 1995.

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo eulariano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos. **Revista Ciência e Natura**, p.103–106, 2003.

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Atmospheric dispersion simulation via generalized integral transform technique and sign-count method. **Revista Ciência e Natura**, p.277–280, 2005.

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

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

TAYLOR, G. I. **Diffusion by continuous movement**. [S.l.]: Proc. Lond. Math. Soc., 1921. v.2, p.196–211.

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**, p.In Press, 2008.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. An analytical model for a screen evaluation of the enviromental impact from a single point source. **Il Nuovo Cimento**, v.15c, p.181–190, 1992.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. An air pollution model for complex terrain. **Proceeding of Air Pollution conference, Monterrey, México**, p.149–156, 1993.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. A practical model for the dispersion of skewed puffs. **Journal of Applied Meteorology**, v.34, p.989–993, 1995.

TIRABASSI, T.; TAGLIAZUCCA, M.; PAGGI, P. A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.23, p.857–862, 1989.

TIRABASSI, T.; TAGLIAZUCCA, M.; ZANNETTI, P. A non-Gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements. **JAPCA**, v.36, p.592–596, 1986.

TIRABASSI, T.; TIESI, A.; BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection-diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.43, p.2221–2227, 2009.

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

VAN ULDEN, A. P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2125–2129, 1978.

VELLOSO, M.; BARBARIOLI, A.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo computacional para estudo do efeito do mecanismo de deposição sobre a dispersão de poluentes atmosféricos. **Revista Ciência e Natura**, p.25–28, 2003.

VELLOSO, M. F.; STORCH, R. B.; PEREZ GUERRERO, J. S.; PIMENTEL, L. C. Estudo do transporte de poluentes na camada limite atmosférica a partir de dois modelos algébricos para o coeficiente de difusão turbulenta e transformação integral. **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2004.

VILHENA, M.; RIZZA, U.; DEGRAZIA, G.; MANGIA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. An analytical air pollution model: Development and evalution. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315–320, 1998.

VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; DEGRAZIA, G. A.; QUADROS, R. S. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v.391, p.2576–2584, 2012.

WANDEL, C. F.; KOFOED-HANSEN, O. **On the Eulerian-Lagrangian Transform in the Statistical Theory of Turbulence**. [S.l.]: J. Geo. Research, 1962. v.67, p.3089–3093.

WEIL, J. C. **Assessment of plume rise and dispersion models using lidar data**. [S.l.]: Prepared by Environmental Center, Martin Marietta Corporation, for Maryland Departament of Natural Resources, 1979. (PPSP-MP-24).

WORTMANN, S. **Formulação Semi-analítica para a Equação Transformada Resultante da Aplicação da GITT em Problemas Difusivos-Advectivos**. 2003. Tese de doutorado — Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

WORTMANN, S.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D.; BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, p.2171–2178, 2005.

YEH, G.; HUANG, C. Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere. **Boundary-Layer Meteorology**, v.9, p.381–390, 1975.