

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



Dissertação

**Simulação da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente
na CLC**

Cristiane Schwartz Venzke

Pelotas, 2015

Cristiane Schwartz Venzke

**Simulação da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente
na CLC**

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

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Camila Pinto da Costa
Coorientadora: Prof^a. Dr^a. Rejane Pergher

Pelotas, 2015

Dados de catalogação na fonte:
Ubirajara Buddin Cruz – CRB 10/901
Biblioteca de Ciência & Tecnologia - UFPel

V472s

Venzke, Cristiane Schwartz

Simulação da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente na CLC / Cristiane Schwartz Venzke. – 72f. : il. – Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática. Universidade Federal de Pelotas. Instituto de Física e Matemática, 2015. – Orientadora Camila Pinto da Costa ; coorientadora Rejane Pergher.

1. Camada limite convectiva. 2. Dispersão de poluentes na atmosfera. 3. Equação de advecção-difusão. 4. Contragradiente. 5. Efeito não local. I. Costa, Camila Pinto da. II. Pergher, Rejane. III. Título.

CDD: 628.168

BANCA EXAMINADORA

Profa. Dra. Camila Pinto da Costa
DME/IFM/UFPeI

Profa. Dra. Rejane Pergher
DME/IFM/UFPeI

Profa. Dra. Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez
IMEF/FURG

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho
FMet/UFPeI

Prof. Dr. Glênio Aguiar Gonçalves
DME/IFM /UFPeI

Dedico à minha família.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à meus pais, primeiros professores que tive contato na vida, por terem me guiado e possibilitado a realização deste sonho.

Agradeço sobretudo aos meus irmãos pelo carinho e pela compreensão que tiveram durante esta caminhada. Sem vocês, provavelmente, eu não teria tanta garra e coragem para lutar e vencer obstáculos. Cada abraço apertado que eu recebo desta família maravilhosa a qual pertencço, gera um alívio e uma força incrível para seguir em frente.

Agradeço à minha orientadora Prof^a. Camila e à minha coorientadora Prof^a. Rejane. Sem vocês nada disso teria se tornado realidade.

Agradeço à PPGMMat e aos demais professores do Programa pela colaboração em minha formação.

Agradeço aos colegas da PPGMMat pelo companheirismo. Agradeço ao meu namorado, às minhas colegas e amigas, Renata e Karine, por sempre estarem do meu lado, me apoiando em cada pedacinho desta trajetória. Obrigada do fundo do meu coração, vocês foram muito importantes neste trabalho.

Agradeço à CAPES pelo suporte financeiro.

Agradeço a Deus e a todos que de algum modo me auxiliaram neste percurso.

**É muito melhor arriscar coisas grandiosas,
alcançar triunfos e glórias, mesmo expondo-se ao fracasso,
do que formar fila com os pobres de espírito,
que nem gozam muito nem sofrem muito,
porque vivem nessa penumbra cinzenta,
onde não conhecem derrotas nem vitórias.**

— THEODORE ROOSEVELT

RESUMO

VENZKE, Cristiane Schwartz. **Simulação da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente na CLC**. 2015. 72 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2015.

Este trabalho apresenta uma aplicação do método ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method) para simular a dispersão de poluentes na atmosfera com uma abordagem diferente da forma usual para o termo de contragradiente. Sendo assim, é encontrada uma solução semianalítica para a equação de advecção-difusão com fechamento não Fickiano o que faz gerar um termo a mais na equação em relação às simulações que resolvem o problema de fechamento da equação com a formulação Fickiana.

Assim, além da turbulência atmosférica ser parametrizada pelo coeficiente de difusão tornando o modelo mais próximo da realidade física, também estará presente na própria equação diferencial do modelo um termo de contragradiente, o que permitirá abordar a física da turbulência de forma mais ampla.

Por fim, o desempenho deste modelo será avaliado utilizando dados experimentais presentes na literatura. Além disso, o modelo que possui o termo de contragradiente será comparado com outro que desconsidera este termo mostrando que a dispersão de poluentes possui influência do termo de contragradiente.

Palavras-chave: Camada Limite Convectiva, Dispersão de poluentes na atmosfera, Equação de advecção-difusão, Contragradiente, Efeito não local.

ABSTRACT

VENZKE, Cristiane Schwartz. **Simulation of pollutant dispersion considering the term of countergradient in the CBL.** 2015. 72 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 work presents an application of the ADMM method (Advection Diffusion Multi-layer Method) to simulate the dispersion of pollutants in the atmosphere with a different approach in the usual way for the term of countergradient. Therefore, it is found a semi-analytical solution to the advection-diffusion equation with a non-Fickian closure that generate more one term in equation in relation to the simulations that solve the problem of closing of the equation with the Fickian formulation.

Thus, besides the atmospheric turbulence is parameterized by the diffusion coefficient making closer model of physical reality, will also be present a countergradient term in the differential equation of the model, which will address the physics of turbulence in a more wide way.

Finally, the performance will be evaluated in this model using experimental data in the literature. Furthermore, the model that has the term of countergradient will be compared with another who ignores this term shows that the dispersion of pollutants has influence of countergradient term.

Keywords: Convective Boundary Layer, Dispersion of pollutants in the atmosphere, Advection-diffusion equation, Countergradient, Nonlocal effect.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Concentrações médias anuais de PM_{10} em 2009 pela densidade populacional. (FAJERSZTAJN et al., 2013).	16
Figura 2	Camadas da atmosfera terrestre e suas variações de temperatura em função da altitude. Adaptado de (AHRENS, 2009).	27
Figura 3	Ciclo diurno da CLP conforme os processos físicos que incidem nesta. Adaptado de (STULL, 1988).	28
Figura 4	A CLC como um sistema de multicamadas.	34
Figura 5	O experimento de Copenhagen.	48
Figura 6	Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contra-gradiente para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^*=100$, considerando o algoritmo de <i>Talbot</i> . Utilizando-se dados do experimento 8 de Copenhagen, o vento que obedece uma lei logarítmica e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$	52
Figura 7	Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contra-gradiente para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^*=100$, considerando o algoritmo de <i>Talbot</i> . Utilizando-se dados do experimento 8 de Copenhagen, o vento que obedece uma lei de potência e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$	53
Figura 8	Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contra-gradiente para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^*=100$, considerando o algoritmo de <i>Talbot</i> . Utilizando-se dados do experimento 9 de Copenhagen, o vento que obedece uma lei logarítmica e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$	54
Figura 9	Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contra-gradiente para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^*=100$, considerando o algoritmo de <i>Talbot</i> . Utilizando-se dados do experimento 9 de Copenhagen, o vento que obedece uma lei de potência e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$	55

Figura 10	Gráficos de espalhamento entre as concentrações observadas (C_o) e as preditas pelo modelo (C_p) para os três coeficientes de difusão. Na 1ª coluna, para os gráficos (a), (b) e (c) utiliza-se vento com perfil logarítmico, já na 2ª, para os gráficos (d), (e) e (f), vento que segue a lei de potência.	60
Figura 11	Gráficos da concentração em função da distância da fonte para os três distintos coeficientes de difusão (K_α , K_β e K_ζ). Na 1ª coluna, para os gráficos (a), (b) e (c) utiliza-se vento com perfil logarítmico, já na 2ª, para os gráficos (d), (e) e (f), vento que segue a lei de potência. Experimento 8 de Copenhagen.	61
Figura 12	Gráficos da concentração em função da distância da fonte para os três distintos coeficientes de difusão (K_α , K_β e K_ζ). Na 1ª coluna, para os gráficos (a), (b) e (c) utiliza-se vento com perfil logarítmico, já na 2ª, para os gráficos (d), (e) e (f), vento que segue a lei de potência. Experimento 9 de Copenhagen.	62

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Relação entre a estabilidade atmosférica e o comprimento de Monin-Obukhov.	29
Tabela 2	Dados micrometeorológicos do experimento de Copenhagen e concentrações observadas (C_o).	49
Tabela 3	Índices estatísticos para os modelos com e sem termo de contra-gradiente e com perfis de vento que obedecem uma lei logarítmica.	56
Tabela 4	Índices estatísticos para os modelos com e sem termo de contra-gradiente com perfis de vento que obedecem uma lei de potência. .	57

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADMM	Advection Diffusion Multilayer Method
AL	Atmosfera Livre
CI	Camada Interfacial
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Noturna
CLP	Camada Limite Planetária
CLS	Camada Limite Superficial
CM	Camada de Mistura
CR	Camada Residual
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EDP	Equação Diferencial Parcial
GIADMT	Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique
GITT	Generalized Integral Transform Technique
ZE	Zona de Entranhamento
	Símbolos:
b	Constante ($b = 1.5$)
C_{or}	Coefficiente de correlação
C_o	Concentrações observadas
C_p	Concentrações preditas pelo modelo
\bar{c}	Concentração média integrada lateralmente
\mathbb{C}	Conjunto dos números complexos
$\overline{C_{n_h}}$	Solução homogênea
$\overline{C_{n_p}}$	Solução particular

$Fa2$	Fator de 2
Fb	Fração de inclinação
Fs	Desvio fracional padrão
δ	Função delta de Dirac
$(f_m^*)_i$	Frequência adimensional do pico espectral
γ	Contragradiante
$G(z, t)$	Função de Green
h	Altura da Camada Limite Convectiva
H	Função de Heaviside
H_s	Altura da fonte
j	Número complexo
κ	Constante de von Kármán ($\kappa = 0.4$)
K_z	Coeficiente de difusão turbulento
K_α	Coeficiente de difusão turbulento vertical válido na CLC
K_β	Coeficiente de difusão turbulento vertical válido na CLC
K_ζ	Coeficiente de difusão turbulento vertical válido na CLC
L	Comprimento de Monin-Obukov
\mathcal{L}	Transformada de Laplace
$(\lambda_m)_w$	Comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical
n^*	Região de emissão do poluente
$Nmse$	Erro quadrático médio normalizado
ψ	Função de dissipação adimensional
Ψ_m	Função estabilidade
P_{n^*}	Solução particular na região de emissão
P'_{n^*}	Derivada da solução particular na região de emissão
Q	Taxa de emissão da fonte na altura H_s
S	Termo fonte
S_k	Assimetria (Skewness)
SF_6	Hexafluoreto de enxofre
σ_w	Desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical
σ_i^2	Variância generalizada
σ_w^2	Variância da velocidade turbulenta
t	Tempo
T_{Lw}	Escala de tempo Lagrangiana vertical

τ	Tempo de relaxação
u	Velocidade média do vento na direção x
U	Velocidade do vento na altura da fonte
u_*	Velocidade de fricção
W	Wronskiano
w_*	Escala convectiva da velocidade
$\overline{w'c'}$	Fluxo turbulento de poluentes na direção z
x	Distância da fonte
z	Altura acima da superfície
z_0	Comprimento de rugosidade do terreno

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
3	ATMOSFERA TERRESTRE E CAMADA LIMITE PLANETÁRIA	26
3.1	A Atmosfera Terrestre	26
3.2	A Troposfera	26
3.2.1	A Camada Limite Planetária (ou Camada Limite Atmosférica - CLA)	27
4	DESCRIÇÃO DO MÉTODO	31
4.1	O Modelo	31
4.2	Procedimento de Resolução da Equação de Advecção-Difusão com Fechamento não Fickiano	33
4.2.1	Soluções Homogênea e Particular	35
4.2.2	Solução Geral	38
4.2.3	Inversão usando o Algoritmo de <i>Talbot</i>	40
4.3	Algumas Considerações acerca da Solução Encontrada	41
5	PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA E PERFIL DO VENTO	43
5.1	Coeficiente de Difusão	43
5.2	Perfil do Vento	45
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	47
6.1	Experimento de Copenhagen	47
6.1.1	Índices Estatísticos	49
6.2	Resultados	50
7	CONCLUSÕES	63
	REFERÊNCIAS	66

1 INTRODUÇÃO

O avanço industrial e tecnológico causa uma emissão excessiva de poluentes provocando sérios danos ambientais, principalmente, a poluição do ar. Os enormes problemas ocasionados pela poluição do ar afetam diretamente os processos naturais, alterando o equilíbrio ambiental.

Conforme dados da Organização Mundial da Saúde (OMS) (ADJUTO, 2014), a poluição do ar se tornou um dos maiores fatores de risco ambiental para a saúde no mundo. No ano de 2012, uma em cada oito mortes foi provocada pelo contato com a poluição atmosférica, o que totaliza cerca de sete milhões de mortes ocasionadas pela forte exposição a este tipo de poluição.

No artigo divulgado por Fajersztajn et al. (FAJERSZTAJN et al., 2013), pesquisadores da Universidade de São Paulo (USP) mostram um mapa da poluição atmosférica na Terra e esclarecem que os países com menor desenvolvimento na produção científica sobre o assunto da qualidade do ar, são aqueles com maiores índices de poluição. Além disso, nações em desenvolvimento localizadas na América do Sul, norte da África e regiões próximas à Índia e à China apresentaram os mais altos índices de poluição que correspondem em torno de 71 a 142 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ de material particulado inalável. O aconselhável pela OMS para este poluente são quantias abaixo de 20 $\mu\text{g}/\text{m}^3$.

No mapa (Figura 1) tem-se a comparação da concentração média anual de material particulado (PM_{10}) com a densidade populacional de 2009 em todo o planeta, baseando-se em dados do Banco Mundial.

Os riscos da poluição do ar são agora muito maiores do que se pensava. Há provas científicas que relacionam exposição à poluição a tendência de apresentar doenças cardiovasculares, problemas respiratórios e câncer. No mesmo artigo de 2013, pesquisadores agruparam vários trabalhos que mostram como os poluentes elevam o risco de câncer de pulmão.

Um dos estudos publicado no *The Lancet Oncology* (NIELSEN, 2013), abordou informações de mais de 300 mil pessoas em nove países e, com relação ao grupo submetido a exposição à poluição, obteve-se como resultado que o risco de câncer

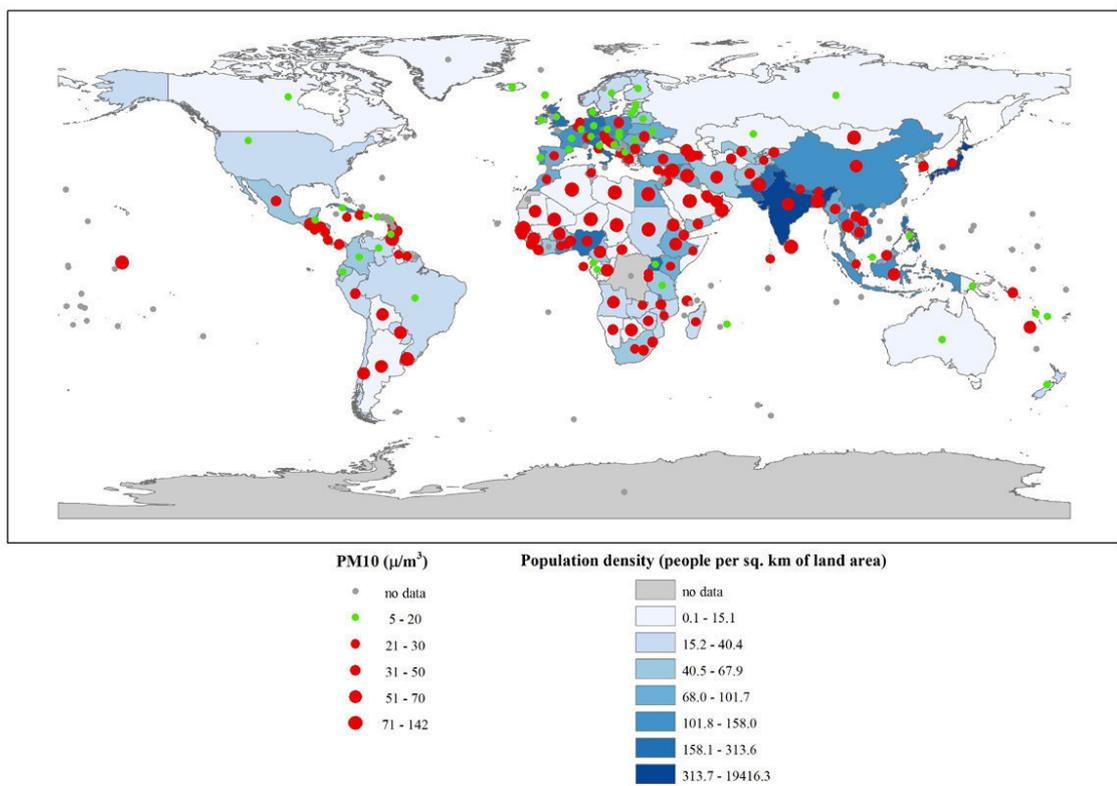


Figura 1: Concentrações médias anuais de PM₁₀ em 2009 pela densidade populacional. (FAJERSZTAJN et al., 2013).

aumenta em 50% a cada $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ de material particulado fino inalado.

No município de Pelotas (RS), conforme o Diário Popular do dia 16 de Novembro de 2013 (FERREIRA, 2013), uma pesquisa desenvolvida na Universidade Federal de Pelotas (UFPel) aponta dados preocupantes sobre a poluição do ar na cidade. Segundo Roberta Szczepaniak, a pesquisadora e mestrandia em Bioquímica e Bioprospecção da UFPel, em estações frias como o inverno o índice de partículas suspensas no ar aumenta drasticamente, ultrapassando o nível recomendado pela OMS. Isso se dá, principalmente, em função do aumento do número de automóveis e processos industriais, devido à crescente urbanização de Pelotas.

Reduzir a poluição do ar poderia salvar muitas vidas. Assim, um estudo sobre a dispersão e o transporte de poluentes na atmosfera é essencial na busca de alternativas que minimizem os impactos da poluição no meio ambiente.

A análise e avaliação da dispersão de poluentes pode ser realizada utilizando-se métodos de investigação como experimentos de campo ou laboratório, ou também, simulações computacionais (sendo este último mais utilizado). A modelagem matemática faz-se útil ao avaliar o acúmulo de poluentes atmosféricos, pois consegue reproduzir de forma satisfatória o campo de concentração de poluentes, considerando os parâmetros físicos meteorológicos que promovem o transporte de poluentes. Conforme Daly e Zannetti (DALY; ZANNETTI, 2007), a modelagem matemática permite descrever o problema da qualidade do ar da forma mais completa possível.

Para estimar o campo de concentrações na baixa atmosfera, é comum utilizar um modelo matemático que parametrize os fluxos turbulentos na equação da continuidade, ou seja, empregar a equação de advecção-difusão.

Um grande número de soluções numéricas desta equação encontra-se presente na literatura, porém optar pela busca de soluções analíticas ou semianalíticas proporciona certos benefícios, principalmente pela facilidade em determinar a influência de um parâmetro específico na equação de advecção-difusão, analisando rapidamente a importância deste parâmetro sobre o resultado final do modelo.

O problema de fechamento da equação de advecção-difusão pode ser resolvido, de forma aproximada, fundamentado na teoria do transporte por gradiente que, em relação a difusão molecular, admite que a turbulência é proporcional à magnitude do gradiente da concentração média (SEINFELD; PANDIS, 1997). A teoria de transporte por gradiente funciona bem quando a dimensão da pluma é muito maior que o dos turbilhões envolvidos no processo difusivo, ou seja, para grandes tempos de viagem (MANGIA et al., 2002). Esta teoria é bastante aplicada para solucionar problemas de fechamento da turbulência nas equações de advecção-difusão, principalmente devido a sua praticidade de uso, porém esta teoria possui algumas limitações; visto que são apenas aproximações, não possuindo um embasamento físico real (ARYA, 1999).

Ao contrário da difusão molecular, a difusão turbulenta depende da escala. Ou

seja, pode-se dizer que na maioria das vezes, a taxa de difusão de uma pluma de material é dependente das dimensões desta pluma e da intensidade de turbulência. À medida que a pluma cresce, turbilhões maiores são inseridos no processo de expansão, de modo que uma fração progressivamente maior da energia cinética turbulenta está disponível para o desenvolvimento da pluma (ARYA, 1999).

Outra limitação bem conhecida deste método é que ele não pode descrever adequadamente o transporte para cima de calor na metade superior da Camada Limite Convectiva (CLC); onde este transporte é tipicamente acompanhado por um gradiente de temperatura ligeiramente mais estável. Percebeu-se que nesta parte superior da CLC o fluxo de temperatura potencial é ao contrário do gradiente de perfil de temperatura potencial do meio (DEARDORFF, 1972a). Se constitui, então, um transporte de calor contragradiente que provém de grandes plumas convectivas (ou turbilhões) que dominam o transporte na CLC. Isto entra em confronto com o fechamento da turbulência tradicional (fechamento local, obedecendo a lei de Fick), já que ele não considera o caráter não homogêneo da turbulência na CLC, tratando-se de uma formulação de difusividade turbulenta baseada somente em gradientes locais. Logo, a hipótese do transporte por gradiente é inconsistente com as características da difusão turbulenta na parte superior da CLC, para os casos convectivos onde o fluxo de contragradiente ocorre (DEARDORFF; WILLIS, 1975). Para suprir essa lacuna, tem-se o chamado termo de contragradiente que leva em consideração a capacidade das plumas ascenderem contra o sentido do gradiente médio (o qual aponta para baixo) (SIEBESMA; SOARES; TEIXEIRA, 2007).

O termo do contragradiente surge na equação quando se considera o fechamento não local, também conhecido por fechamento não Fickiano da turbulência por não obedecer a lei de Fick. Este fechamento possibilita analisar o efeito dos turbilhões mais energéticos em diferentes alturas e, como mencionado anteriormente, tem sido empregado porque é capaz de representar escoamentos do tipo contragradiente, os quais só são verificados em camadas convectivas. Logo, uma forma de estimar a concentração de poluentes considerando, de um modo mais realístico, a estrutura complexa da turbulência na CLC é levar em conta os efeitos do termo de contragradiente caracterizado pelo transporte não local da dispersão (ARYA, 1999).

Nesta dissertação, utiliza-se o fechamento não Fickiano na equação de advecção-difusão para simular a dispersão de poluentes. Ao aplicar este fechamento, um termo adicional surge na equação, esse termo leva em conta o caráter não local da dispersão de poluentes pois possui o termo de contragradiente. O caráter local sugere que somente partículas vizinhas se relacionam, enquanto que o não local indica que quaisquer partículas podem se inter-relacionar, o que torna o modelo mais realístico e melhora a modelagem.

Portanto, o objetivo principal deste trabalho é estimar a concentração de poluentes

através de uma modelagem que considera os efeitos não locais na dispersão. Para alcançar este objetivo, deseja-se obter uma solução semianalítica para a equação de advecção-difusão em estado estacionário que possui uma abordagem diferente da usual para o termo do contragradiente. Para tanto, será aplicado o método ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method) com a resolução analítica de Equações Diferenciais Parciais (EDPs) e com o emprego da técnica da Transformada de Laplace, onde a CLC será vista como um sistema multicamadas. E, ao final, o desempenho do modelo será comparado com dados obtidos do experimento de Copenhagen (GRYNING; LYCK, 1984) (GRYNING et al., 1987) (GRYNING, 2002) que realizou observações de concentrações superficiais.

O presente texto está organizado em sete capítulos: no segundo capítulo encontra-se uma revisão bibliográfica. No terceiro capítulo apresenta-se uma breve descrição sobre as camadas que compõem a atmosfera terrestre, dando-se ênfase ao estudo da CLC, onde serão analisados os efeitos não locais da dispersão presentes nesta camada. No quarto capítulo descreve-se o método utilizado para a obtenção da solução semianalítica da equação de advecção-difusão considerando-se os efeitos não locais na dispersão. No quinto capítulo, parametriza-se a turbulência, sendo apresentados os coeficientes de difusão e os perfis de vento utilizados no modelo. No sexto capítulo, expõe-se e discute-se os resultados obtidos. No sétimo capítulo, são apresentadas as conclusões.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Com o intuito de medir a concentração de poluentes na atmosfera foram elaborados diversos experimentos como os experimentos de tanque de Willis e Deardorff (WILLIS; DEARDORFF, 1974) (WILLIS; DEARDORFF, 1976) (WILLIS; DEARDORFF, 1978) (WILLIS; DEARDORFF, 1981), o de Kinkaid (HANNA; PAINE, 1989), o de Hanford (DORAN; HORST, 1985), o de Prairie Grass (BARAD, 1958a) (BARAD, 1958b), o de IIT Delhi (SHARAN; SINGH; YADAV, 1996) (SHARAN; YADAV; MODANI, 2002) e o de Copenhagen (GRYNING et al., 1987) (GRYNING; LYCK, 1984) (GRYNING, 2002). Este último será empregado para validar o modelo desenvolvido neste trabalho sendo este experimento analisado em condições instáveis, o que condiz com as condições atmosféricas predominantes na CLC. Além disso, no experimento de Copenhagen considerou-se a fonte de emissão do poluente como uma fonte alta, o que possibilita investigar a dispersão de poluentes que são emitidos em processos industriais.

O experimento de Copenhagen consistiu na liberação de SF₆ (hexafluoreto de enxofre) de uma fonte de 115 m de altura na região norte de Copenhagen (zona basicamente residencial com rugosidade de 0,6 m) e foi coletado ao nível da superfície por amostradores de concentração em três distâncias na direção preferencial do vento.

Porém, as observações de campo são muitas vezes dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos envolvidos, o que faz com que, conseqüentemente, a modelagem matemática (simulação computacional) se torne o método mais utilizado para a compreensão do processo de dispersão de poluentes.

Para estimar a concentração de poluentes no ar foram desenvolvidos vários modelos matemáticos, os quais tornam possível analisar o impacto ambiental causado pela poluição, prever os possíveis efeitos da mesma sobre os diferentes ecossistemas e agir no sentido de solucionar o problema da forma mais apropriada.

Dentre estes modelos utilizados para simular a dispersão de poluentes na atmosfera destacam-se os modelos Lagrangiano e Euleriano (ANFOSSI, 2005) (MUNSON; YOUNG; OKIISHI, 2004) (BULIGON et al., 2004). No modelo Lagrangiano, o sistema de referência é móvel, segue o movimento da partícula na corrente do fluido, ou seja, as partículas seguem a velocidade instantânea do fluido. As grandezas físicas que

descrevem as trajetórias são especificadas em termos probabilísticos.

Já, o sistema de referência Euleriano encontra-se fixo em relação a terra, ou melhor, o instrumento utilizado para uma medição Euleriana possui sua posição fixa em relação ao poluente que está sendo medido. Neste trabalho, é de interesse compreender, estudar e utilizar o modelo Euleriano para obter o campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera uma vez que na aproximação Euleriana o processo de dispersão é estudado em termos de uma equação diferencial de conservação da massa do poluente (equação de advecção-difusão).

Logo, o modelo presente nesta dissertação envolverá o sistema de referência Euleriano, com a resolução da equação de advecção-difusão e, além disso, levará em conta os efeitos de um termo de contragradiente, considerando a estrutura complexa da turbulência de uma forma mais realística.

Na literatura há uma ampla diversidade de soluções numéricas da equação de advecção-difusão ((NIEUWSTADT; VAN ULDEN, 1978); (LAMB, 1978); (CARVALHO, 1996)). Porém, como dito anteriormente, optar pelas soluções analíticas (ou semianalíticas) proporciona certos benefícios, principalmente pela facilidade em determinar a influência de um parâmetro específico na equação, analisando rapidamente a importância deste parâmetro sobre o resultado final do modelo.

Desta forma, para resolver problemas de dispersão obtendo soluções analíticas podem ser utilizados vários métodos, tais como: ADMM (Advection Diffusion Multilayer Method), GITT (Generalized Integral Transform Technique), GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique) e GIADMT (Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique).

O ADMM (VILHENA et al., 1998) trata-se de um método multicamadas, onde a CLC é discretizada em N subcamadas e em cada subcamada são tomados os valores médios dos parâmetros micrometeorológicos dependentes da altura. Este procedimento visa a resolução analítica de Equações Diferenciais Parciais (EDPs) e a aplicação da técnica da Transformada de Laplace. A solução analítica é expressa na forma integral.

A técnica de transformação integral, GITT (COTTA, 1993), é baseada na junção de uma expansão em série com uma integração. Uma base trigonométrica, originada de um problema auxiliar, é usada como base para a expansão. Aproveitando-se da propriedade de ortogonalidade da base utilizada na expansão, a integração é realizada em todo o intervalo da variável transformada. Assim, um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) é gerado e resolvido numericamente.

Já a técnica GILTT (WORTMANN et al., 2005), é uma combinação da GITT com a técnica da Transformada de Laplace. Consiste em resolver o problema transformado (um sistema de EDOs) analiticamente, usando Transformada de Laplace e diagonalização, obtendo-se a solução analítica em forma de uma série de Fourier.

Os métodos ADMM, GITT e GILTT são utilizados para solucionar a equação de advecção-difusão unidimensional transiente, bidimensional ou bidimensional transiente. Assim, o método GIADMT (COSTA et al., 2006) foi criado ao resolver a equação de advecção-difusão tridimensional combinando-se as técnicas ADMM e GITT.

Vale mencionar que o presente trabalho tem por objetivo procurar uma solução semianalítica para a equação de advecção-difusão. Dentre os quatro métodos descritos acima, para resolver a equação de advecção-difusão que estima o campo de concentrações de poluentes na baixa atmosfera, opta-se pela aplicação do método ADMM, visto que ele é amplamente empregado para solucionar problemas deste gênero. Segundo o artigo de Moreira et al. (MOREIRA et al., 2010), foi realizada uma comparação entre os métodos ADMM e GILTT, onde os autores comentam que a abordagem com o método ADMM é mais eficiente do ponto de vista computacional referindo-se à questão de tempo computacional sendo, conseqüentemente, a utilização deste método mais adequada para simular a dispersão de poluentes na atmosfera.

A partir destas ideias, fez-se necessário pesquisar e estudar algumas publicações na literatura que incluem estes saberes e, portanto, é apresentada uma revisão sobre algumas das soluções analíticas ou semianalíticas para a equação de advecção-difusão aplicadas à dispersão de poluentes, analisando apenas resultados e textos presentes na literatura que abordam uma modelagem onde se considera os efeitos não locais na dispersão, visto que este é o foco deste trabalho.

Em 2003, um modelo bidimensional foi resolvido por Costa et al. (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2003), onde foi considerada a equação de advecção-difusão com duas dimensões em estado estacionário, utilizando fechamento não Fickiano da turbulência (fechamento não local) e o método ADMM de multicamadas para a resolução desta equação. Já em 2004, Moreira et al. (MOREIRA et al., 2004a) deram continuidade a esse trabalho, no qual uma comparação com o experimento de Copenhague foi realizada.

Além disso, Buligon et al. (BULIGON et al., 2004) apresentaram uma solução da equação de difusão unidimensional transiente para modelar a dispersão de poluentes, via método ADMM e fechamento não local na dispersão.

Ainda em 2004, Costa et al. (COSTA, 2004), (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2004) e Moreira et al. (MOREIRA et al., 2004b) realizaram um estudo completo sobre a modelagem bidimensional considerando efeitos do contragradiente, levando em conta o caráter não local da dispersão utilizando o método ADMM.

Posteriormente, um modelo bidimensional estacionário com fechamento não Fickiano foi apresentado por Buske et al. (BUSKE et al., 2007a), cuja solução foi obtida aplicando-se a técnica GILTT.

Através da técnica GILTT e, ainda no ano de 2007, Buske et al. (BUSKE et al.,

2007b) apresentaram uma solução tridimensional estacionária considerando o caráter não local da dispersão, resolvendo a equação de advecção-difusão com duas dimensões e a terceira dimensão foi obtida ao multiplicar uma gaussiana em y .

Em 2008, Vilhena et al. (VILHENA et al., 2008) trabalharam com o método GIADMT e obtiveram uma solução semianalítica para a equação de advecção-difusão tridimensional estacionária considerando fechamento não local da turbulência.

Mais adiante, Costa et al. (COSTA et al., 2012) desenvolveram um modelo tridimensional com fechamento não Fickiano, obtendo uma solução para a equação de advecção-difusão tridimensional transiente ao utilizarem o método GIADMT e a Transformada de Laplace.

No mesmo ano, Buske et al. (BUSKE et al., 2012), apresentaram uma solução tridimensional não Fickiana para a equação de advecção-difusão tridimensional em estado estacionário, via método GILTT.

Conforme mencionado anteriormente, deseja-se simular a dispersão de poluentes na atmosfera considerando o fechamento não local da dispersão por este ser mais apropriado já que permite abordar a física da turbulência de forma mais ampla, aproximando-se da realidade física da CLC. Assim, torna-se essencial realizar uma breve revisão sobre alguns valores encontrados para este termo de contragradiente, bem como, alguns trabalhos onde utilizaram-se este fechamento não local (que possui o termo de contragradiente).

Em 1966, visando encontrar a magnitude do termo de contragradiente, Deardorff (DEARDORFF, 1966) usou valores dos termos de produção e de difusão medidos por Telford e Warner (TELFORD; WARNER, 1964) na equação da variância de temperatura. Interpreta-se qualitativamente o termo de difusão, o qual permite a existência do fluxo contragradiente. A magnitude obtida por Deardorff para o termo contrário ao gradiente, foi de aproximadamente $6.5(10^{-6})Cm^{-1}$.

A partir da equação de conservação do fluxo de calor turbulento, em 1972, Deardorff (DEARDORFF, 1972b) derivou um termo de contragradiente para o calor na CLC. Novamente, medidas de Telford e Warner (TELFORD; WARNER, 1964), assim como, de Lenschow (LENSCHOW, 1970), foram utilizadas na expressão de Deardorff, em níveis médios e superiores na CLC, sendo obtido para o termo de contragradiente o valor de aproximadamente $0.7(10^{-5})Kcm^{-1}$; sendo este valor da mesma ordem de magnitude do valor obtido antes. Este termo foi utilizado em alguns modelos (MILHOT; BENOIT, 1982), (THERRY; LACARRÉRE, 1983) sofrendo, depois, uma pequena modificação em 1989, por Moeng e Wyngaard (MOENG; WYNGAARD, 1989), que obtiveram resultados de simulações em grande escala (LES - Large Eddy Simulation).

Posteriormente, com base em resultados das simulações dos grandes turbilhões e utilizando a equação do fluxo de calor turbulento, Holstlag e Moeng (HOLSTLAG;

MOENG, 1991) realizaram uma derivação similar a de Deardorff (DEARDORFF, 1972b) e indicaram uma expressão para o termo de contragradiente:

$$\gamma = \frac{2w_*^2\theta_*}{w_*^2h}. \quad (1)$$

sendo θ a temperatura potencial média, h a altura da CLC, w_* a escala convectiva da velocidade. Porém, a interpretação física para o termo de contragradiente difere. A expressão derivada por Deardorff resultou do termo de produção térmica e a de Holstlag e Moeng surgiu partindo-se do momento de terceira ordem na equação de balanço para o fluxo de calor turbulento.

Nos trabalhos acima, foram propostas formulações não locais para a temperatura potencial. Wyngaard e Weil (WYNGAARD; WEIL, 1991) formularam uma teoria para a difusão de um escalar passivo com base em uma abordagem anterior de Lumley (LUMLEY, 1975). Desta forma, expandiram o fluxo turbulento, $\overline{w'c'} (\equiv \phi)$ em uma série de Taylor de acordo com

$$\phi = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{1}{2} S_k K_z \sigma_w \tau \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + D \frac{\partial^3 \bar{c}}{\partial z^3} + \dots, \quad (2)$$

onde z indica a altura acima da superfície, \bar{c} representa a concentração média integrada lateralmente, σ_w é o desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical, K_z é o coeficiente de difusão turbulento, K_z é igual a $\overline{w^2} \tau$, S_k é a assimetria skewness ($S_k \equiv \overline{w^3} / \overline{w^2}^{3/2}$), τ é o tempo de relaxação e D é um coeficiente contendo momentos superiores da velocidade.

Também Hamba (HAMBA, 1993) propõe uma expressão semelhante. Esta série (2) pode ser reformulada como (em (WYNGAARD; MOENG, 1990)):

$$\left(1 + s \frac{\partial}{\partial z}\right) \phi = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \dots, \quad (3)$$

com $s = \frac{1}{2} S_k K / \sigma_w$.

Assim, surgiram novas e mais variadas expressões para o termo de contragradiente e, portanto, há uma vasta gama de parametrizações que podem ser encontradas na literatura para os termos do contragradiente além destas apresentadas aqui ((HOLSTLAG; BOVILLE, 1993), (ROBSON; MAYOCCHI, 1994), (ROODE et al., 2004)). Em todos os estudos de simulação revisados e relatados acima sobre soluções analíticas e semianalíticas encontradas para a equação de advecção-difusão aplicadas à dispersão de poluentes, a parametrização para o termo de contragradiente utilizada foi proposta por Van Dop e Verver (VAN DOP; VERVER, 2001) e baseada no trabalho de Wyngaard e Weil (WYNGAARD; WEIL, 1991), sendo considerado que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio (fechamento não

local):

$$\left[1 + \left(\frac{S_k T_{L_w} \sigma_w}{2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial t} \right] \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (4)$$

onde $\overline{w'c'}$ é o fluxo turbulento de poluentes na direção z , S_k é a assimetria (skewness), t é o tempo e T_{L_w} é a escala de tempo Lagrangiana vertical.

Já, no presente trabalho, opta-se parametrizar o termo de contragradiente de uma forma até então nunca utilizada junto à equação de advecção-difusão bidimensional para simular a dispersão de poluentes, a qual foi proposta por Cuijpers e Holtslag (CUIJPERS; HOLTSLAG, 1998) e cuja formulação será apresentada no Capítulo 4 desta dissertação.

Com isto, espera-se que este trabalho contribua para o crescimento da área, principalmente, por considerar os efeitos do contragradiente na solução da equação de advecção-difusão, contribuindo para a expansão do estudo de soluções semianalíticas para esta equação, dando ênfase a modelos de dispersão de poluentes na atmosfera que consideram a estrutura complexa da turbulência de forma mais realista.

3 ATMOSFERA TERRESTRE E CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

As condições meteorológicas locais influenciam diretamente na concentração de poluentes acumulada em uma determinada região. Conseqüentemente, torna-se fundamental o conhecimento dos fenômenos que predominam na atmosfera para, assim, ser possível controlar a dispersão de poluentes.

Neste capítulo, encontra-se uma breve descrição geral da Atmosfera Terrestre e, em especial, o estudo da Camada Limite Planetária (CLP), a qual corresponde a parte mais baixa de uma das camadas que compõem a atmosfera, conhecida por Troposfera.

É na CLP que se desenvolve a dispersão de poluentes na atmosfera e este é o principal motivo que leva a realização de um estudo sobre essa camada e suas principais características.

3.1 A Atmosfera Terrestre

A Atmosfera Terrestre é separada em camadas que podem ser classificadas de diversos tipos. Assim, pode-se dividir a atmosfera em quatro camadas que se distinguem devido ao seu comportamento de temperatura (Figura 2): Termosfera, Mesosfera, Estratosfera e Troposfera.

Destas quatro camadas, dá-se ênfase ao estudo da camada mais baixa da Atmosfera Terrestre, a Troposfera.

3.2 A Troposfera

É nesta zona que ocorre a maioria dos fenômenos meteorológicos e a turbulência possui papel imprescindível na estruturação desta camada. A espessura média da troposfera é de 13 km nas latitudes médias, sendo menos espessa nos polos e um pouco mais espessa nas regiões tropicais. A área que compreende a fronteira entre a Troposfera e a Estratosfera é conhecida como Tropopausa.

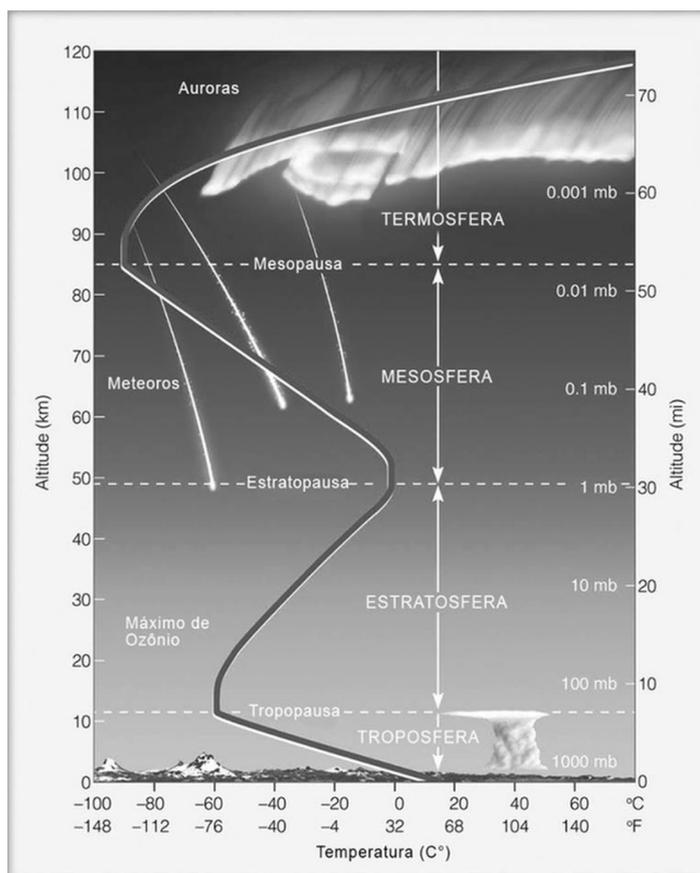


Figura 2: Camadas da atmosfera terrestre e suas variações de temperatura em função da altitude. Adaptado de (AHRENS, 2009).

A parte mais alta da Troposfera é chamada de Atmosfera Livre (AL). Abaixo da AL fica a camada mais baixa da Troposfera, a CLP.

3.2.1 A Camada Limite Planetária (ou Camada Limite Atmosférica - CLA)

Como dito anteriormente, esta camada é o foco principal deste trabalho. A CLP pode atingir até 3000 m de altura, mas sua espessura varia bastante devido a grande influência dos efeitos da turbulência nesta camada e, conforme o relevo e o horário do dia.

Esta camada possui fundamental importância, sendo a parte da atmosfera que recebe diretamente os efeitos resultantes das atividades humanas e naturais que ocorrem na superfície da terra, como fenômenos micrometeorológicos, transporte do calor, de massa e, inclusive, a dispersão de poluentes que são produzidos pelos seres humanos.

Na Figura 3, tem-se a estruturação da CLP, sendo ela dividida em várias subcamadas dependendo dos seus aspectos e perfis relativos a um ciclo diário.

Assim, com o intuito de realizar uma descrição mais profunda sobre a CLP, fragmenta-se esta em suas respectivas subcamadas (apresentadas na Figura 3) de-

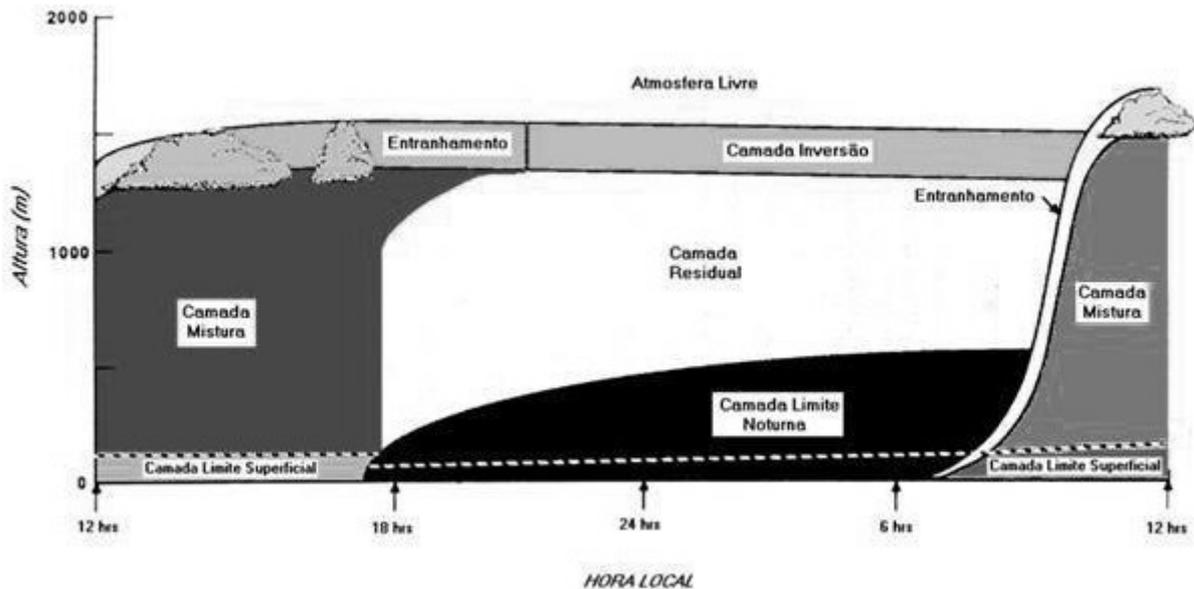


Figura 3: Ciclo diurno da CLP conforme os processos físicos que incidem nesta. Adaptado de (STULL, 1988).

talhando melhor cada uma delas:

- Camada Limite Convectiva (CLC)

Esta camada é gerada por consequência do aquecimento diurno da superfície terrestre pela radiação solar, começando a formar-se logo depois do nascer do sol e cessando com o pôr do sol.

A CLC se constitui de três subcamadas: Camada Limite Superficial (CLS), Camada de Mistura (CM) e Camada Interfacial (CI) ou Zona de Entranhamento (ZE).

A CLS é uma região que varia entre 10 a 200 m de altura, existindo forte interação entre a atmosfera e a superfície terrestre e onde a variação dos fluxos turbulentos de calor e *momentum* é praticamente ignorada (mudam menos de 10% de sua magnitude). Tomando proveito desta característica, surge a teoria da similaridade proposta por (MONIN; OBUKHOV, 1954) para esta camada. Desta forma, introduz-se um parâmetro chamado de comprimento de Monin-Obukhov (L), independente da altura nessa camada e definido como se segue:

$$L = -\frac{u_*^3}{\kappa \frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0} \quad (5)$$

onde L é uma escala de altura, proporcional a uma altura acima da superfície onde os fatores de empuxo térmico do ar se igualam à produção mecânica de turbulência (SEINFELD; PANDIS, 1998). E, u_* é a velocidade de fricção na superfície, κ a constante de von Kármán, g a aceleração da gravidade, Θ a temperatura potencial média e $(\overline{w\theta})_0$ o fluxo de calor turbulento.

Conforme a Tabela 1, a escala de comprimento de Monin-Obukhov é vista como um parâmetro fundamental para a determinação das condições de estabilidade ou instabilidade atmosféricas (PANOFSKY; DUTTON, 1984). Quando $L < 0$, geralmente em dias ensolarados, para alturas menores que $|L|/10$ a turbulência mecânica é predominante e em alturas maiores que $|L|/10$, a turbulência gerada por empuxo térmico domina o escoamento. Na CLS, há aumento de temperatura com a altura durante a noite e diminuição durante o dia.

Tabela 1: Relação entre a estabilidade atmosférica e o comprimento de Monin-Obukhov.

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

Já, a CM é a região central da CLC, não possuindo contato com a superfície terrestre e onde ocorre grande mistura devido à difusão turbulenta. Além disso, os perfis do vento médio e da temperatura são aproximadamente constantes nesta camada.

A ZE corresponde a camada do topo da CLC, fazendo intermediação da CM com a AL. Possui a característica da inversão de temperatura, que passa a limitar os movimentos verticais na CM.

Ainda, é na CLC que ocorre a intensificação da turbulência e a maior concentração de poluentes, visto que as fontes poluidoras encontram-se próximas da superfície da terra e os poluentes são transportados por turbilhões e termas, atingindo alturas gradativamente maiores ao transcorrer do dia.

Uma vez que a dispersão de poluentes faz-se mais significativa ao longo da CLC, torna-se notório o motivo pelo qual o modelo apresentado nesta dissertação é estruturado e aplicado na camada em questão.

- Camada Limite Estável (CLE) ou Camada Limite Noturna (CLN)

Formada por pequenos turbilhões e sua altura é, praticamente, apenas um décimo da CLC, variando em dezenas de metros. Origina-se quando a superfície da Terra se esfria, logo, é comum encontrá-la à noite sobre o continente.

A turbulência é menos acentuada do que na CLC e, desta forma, os poluentes são espalhados ligeiramente na horizontal e lentamente na vertical.

- Camada Residual (CR)

Origina-se cerca de 30 minutos antes do pôr do sol e, portanto, trata-se de uma camada noturna. A formação de termas cessa, acarretando o decaimento da turbulência na CM, o que resulta no surgimento da CR. Logo, esta camada possui características semelhantes às da CM que existe durante o dia e, também, não possui contato com a superfície da terra.

Acompanhando a evolução da CLP, no decorrer de 24 horas (Figura 3) conclui-se que há o surgimento de uma CM a partir das 9h da manhã (aproximadamente) até o pôr do sol; acima desta camada, tem-se a ZE (inversão) e abaixo, a CLS. Conforme o dia passa, com o início do pôr do sol, há a formação da CR, a qual é resultante da CM formada durante o período do dia. Acima da CR, tem-se a Camada de Inversão e, abaixo, forma-se a CLE. Com a vinda do sol ao nascer do dia, surge novamente a CM, gerando um ciclo diurno.

Como já mencionado, dentre todas as camadas apresentadas neste capítulo, opta-se por trabalhar com a CLC devido a presença de uma forte turbulência e de um maior acúmulo de poluentes, deste modo, é adicionado um termo de contragradiente na equação de advecção-difusão que leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência, o que permite considerar de uma forma mais completa a estrutura da turbulência na CLC para estimar a concentração de poluentes.

4 DESCRIÇÃO DO MÉTODO

Nesta seção, descreve-se a metodologia empregada para solucionar a equação de advecção-difusão que leva em conta o termo de contragradiente proposto por Cuijpers e Holtslag (CUIJPERS; HOLTSLAG, 1998), tendo-se por objetivo analisar a influência de efeitos não locais na dispersão de poluentes na CLC.

4.1 O Modelo

A equação de advecção-difusão (modelo Euleriano) é uma forma bastante utilizada para se obter o campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera. Neste contexto, a modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera pode ser descrita pela equação bidimensional de advecção-difusão:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S, \quad (6)$$

onde \bar{c} representa a concentração média integrada lateralmente, u , a velocidade média do vento na direção x , $\overline{w'c'}$, o fluxo turbulento de poluentes na direção z e S , o termo fonte, sujeita às condições de contorno de fluxo nulo no solo e no topo da CLC.

Uma forma de solucionar o problema de fechamento da equação (6) está fundamentada na teoria do transporte por gradiente que, baseada na difusão molecular, admite que a turbulência é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. Este fechamento pode ser denominado como fechamento local ou fechamento Fickiano e é dado por:

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (7)$$

onde K_z é o coeficiente de difusão vertical.

Diferentemente do exposto acima, neste trabalho, pretende-se estimar a concentração de poluentes considerando, de um modo mais realístico, a estrutura complexa da turbulência na CLC, ou seja, levando em conta os efeitos do termo de contragradiente caracterizado pelo transporte não local da dispersão.

Desta forma, considera-se um termo adicional na equação (7), ou seja, um termo

de contragradiente. Assim, o problema de fechamento da equação (6) é resolvido utilizando a relação proposta por Deardorff (DEARDORFF, 1966):

$$\overline{w'c'} = -K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right), \quad (8)$$

onde K_z é o coeficiente de difusão turbulento e γ , o termo de contragradiente.

Vale mencionar que, o caráter não local indica que quaisquer partículas podem se inter-relacionar enquanto que o local sugere que somente partículas vizinhas se relacionam. Sendo assim, a utilização de um termo de contragradiente torna o modelo mais realístico e melhora a modelagem.

Logo, substituindo a equação (8) na equação (6), obtém-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial z} \left[-K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right) \right] + S, \quad (9)$$

a qual torna-se objeto de estudo deste trabalho.

Para o termo de contragradiente, será utilizada a parametrização proposta por Cuijpers e Holtslag (CUIJPERS; HOLTSLAG, 1998):

$$\gamma = b \frac{w_*^2}{\sigma_w^2 h} \bar{c}, \quad (10)$$

onde h é a altura da CLC, σ_w^2 é a variância da velocidade turbulenta, w_* é a escala convectiva da velocidade e b uma constante (cujo valor será determinado no próximo capítulo).

Durante a realização dos cálculos apresentados a seguir, será empregada a terminologia:

$$\gamma = \alpha \bar{c}, \quad (11)$$

sendo $\alpha = b \frac{w_*^2}{\sigma_w^2 h}$.

Portanto, para determinar a concentração \bar{c} , considerando o termo de contragradiente, deve-se resolver o problema representado por (12), sendo admitida taxa de variação da concentração nula no solo e no topo da CLC:

$$\begin{cases} u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial z} \left[-K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \alpha \bar{c} \right) \right] \\ K_z \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) = 0 \quad \text{em } z = 0, h \\ u \bar{c} = Q \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \end{cases}, \quad (12)$$

supondo uma fonte contínua onde Q é a taxa de emissão desta fonte na altura H_s e δ é a função delta de Dirac.

4.2 Procedimento de Resolução da Equação de Advecção-Difusão com Fechamento não Fickiano

Para resolver o problema matemático, será utilizado o método ADMM (MOREIRA et al., 2006) o qual vem sendo amplamente empregado na resolução da equação de advecção-difusão que estima o campo de concentração de poluentes na baixa atmosfera.

O ADMM trata-se de um método multicamadas, onde a CLC é discretizada em N subcamadas e em cada subcamada são tomados os valores médios dos parâmetros micrometeorológicos (K_z , u e α) dependentes da altura z em cada subcamada $\Delta z_n = [z_{n-1}, z_n]$:

$$K_{z_n} = \frac{1}{\Delta z_n} \int_{z_{n-1}}^{z_n} K_z(z) dz, \quad (13)$$

$$u_n = \frac{1}{\Delta z_n} \int_{z_{n-1}}^{z_n} u(z) dz, \quad (14)$$

$$\alpha_n = \frac{1}{\Delta z_n} \int_{z_{n-1}}^{z_n} \alpha(z) dz. \quad (15)$$

Também, supõe-se contato perfeito entre as N subcamadas, com as seguintes condições de continuidade para a concentração e sua taxa de variação em cada interface, em $z = z_n$ e $n = 1, 2, \dots, N - 1$, respectivamente:

$$\bar{c}_n = \bar{c}_{n+1}, \quad (16)$$

$$K_{z_n} \left(\frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \right) = K_{z_{n+1}} \left(\frac{\partial \bar{c}_{n+1}}{\partial z} \right). \quad (17)$$

Logo, ao utilizar o método ADMM, a CLC pode ser vista como um sistema de multicamadas, conforme a Figura 4.

Portanto, a fim de obter a solução do problema (12), devemos resolver N problemas da forma:

$$\begin{cases} u_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} = K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} - K_{z_n} \alpha_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \\ K_{z_n} \left(\frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \right) = 0 \quad \text{em } z = 0, h \\ u_n \bar{c}_n = Q \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \end{cases} . \quad (18)$$

O sistema (18) é solucionado através do método ADMM, com a aplicação da Transformada de Laplace em x , denotando $\mathcal{L}\{\bar{c}_n(x, z)\} = \bar{C}_n(s, z)$, que resultará numa equação diferencial ordinária que depende apenas de z .

Aplicando a Transformada de Laplace em ambos os lados no sistema (18):

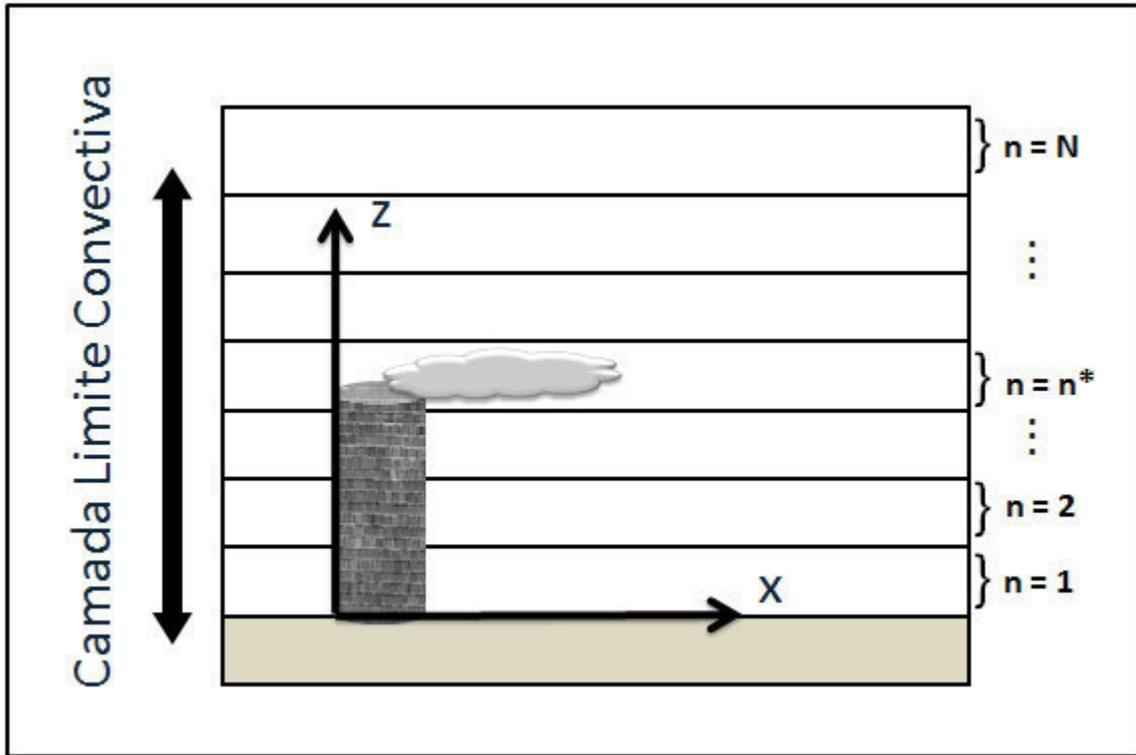


Figura 4: A CLC como um sistema de multicamadas.

$$\mathcal{L} \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} = \mathcal{L} \left\{ K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} - K_{z_n} \alpha_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} \right\}. \quad (19)$$

Pela propriedade de linearidade do operador, obtém-se:

$$\mathcal{L} \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} = \mathcal{L} \left\{ K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} - \mathcal{L} \left\{ K_{z_n} \alpha_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} \right\}, \quad (20)$$

ou ainda,

$$u_n \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} = K_{z_n} \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} - K_{z_n} \alpha_n \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} \right\}, \quad (21)$$

$$u_n \mathcal{L} \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} = K_{z_n} \frac{d^2}{dz^2} (\mathcal{L} \{ \bar{c}_n(x, z) \}) - K_{z_n} \alpha_n \frac{d}{dz} (\mathcal{L} \{ \bar{c}_n(x, z) \}). \quad (22)$$

Pela propriedade da Transformada de Laplace para a derivada primeira e, denotando $\mathcal{L} \{ \bar{c}_n(x, z) \} = \bar{C}_n(s, z)$, tem-se:

$$u_n [s \bar{C}_n(s, z) - \bar{c}_n(0, z)] = K_{z_n} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) - K_{z_n} \alpha_n \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z). \quad (23)$$

Com a aplicação da propriedade distributiva da multiplicação, tem-se:

$$u_n s \bar{C}_n(s, z) - u_n \bar{c}_n(0, z) - K_{z_n} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) + K_{z_n} \alpha_n \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) = 0. \quad (24)$$

Dividindo por $-K_{z_n}$ a equação (24), obtém-se:

$$-\frac{u_n s}{K_{z_n}} \overline{C}_n(s, z) + \frac{u_n}{K_{z_n}} \bar{c}_n(0, z) + \frac{d^2}{dz^2} \overline{C}_n(s, z) - \alpha_n \frac{d}{dz} \overline{C}_n(s, z) = 0. \quad (25)$$

Isolando o termo que acompanha $\bar{c}_n(0, z)$ e aplicando uma das condições dadas no problema, $u_n \bar{c}_n = Q \delta(z - H_s)$ em $x = 0$, tem-se:

$$-\frac{u_n s}{K_{z_n}} \overline{C}_n(s, z) + \frac{d^2}{dz^2} \overline{C}_n(s, z) - \alpha_n \frac{d}{dz} \overline{C}_n(s, z) = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(z - H_s). \quad (26)$$

Logo, chega-se a uma equação diferencial linear não-homogênea com coeficientes constantes:

$$\frac{d^2}{dz^2} \overline{C}_n(s, z) - \alpha_n \frac{d}{dz} \overline{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{K_{z_n}} \overline{C}_n(s, z) = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(z - H_s). \quad (27)$$

Reescrevendo a equação (27), para facilitar o uso da notação:

$$\overline{C}_n'' - \alpha_n \overline{C}_n' - \frac{u_n s}{K_{z_n}} \overline{C}_n = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(z - H_s). \quad (28)$$

Para resolver esta equação diferencial linear não homogênea, é necessário encontrar a equação diferencial linear homogênea associada a ela e obter uma solução particular da equação original. Assim, a solução geral da equação (28) pode ser escrita na forma:

$$\overline{C}_n = \overline{C}_{n_h} + \overline{C}_{n_p}, \quad (29)$$

onde \overline{C}_{n_h} representa a solução homogênea e \overline{C}_{n_p} , a solução particular.

4.2.1 Soluções Homogênea e Particular

A equação (28) possui a seguinte equação homogênea associada:

$$\overline{C}_n'' - \alpha_n \overline{C}_n' - \frac{u_n s}{K_{z_n}} \overline{C}_n = 0. \quad (30)$$

Esta equação será resolvida, obtendo a equação característica associada a ela, que é dada por:

$$\lambda^2 - \alpha_n \lambda - \frac{u_n s}{K_{z_n}} = 0. \quad (31)$$

Resolvendo a equação (31):

$$\lambda = \frac{\alpha_n \pm \sqrt{(-\alpha_n)^2 - 4 \left(-\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)}}{2}, \quad (32)$$

$$\lambda = \frac{\alpha_n}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_n^2 + 4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)}. \quad (33)$$

Para λ_1 e λ_2 distintos e reais, tem-se a solução homogênea:

$$\overline{C_{n_h}} = A_n e^{\lambda_1 z} + B_n e^{\lambda_2 z}, \quad (34)$$

$$\overline{C_{n_h}} = A_n \exp \left\{ \left[\frac{\alpha_n}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_n^2 + 4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)} \right] z \right\} + B_n \exp \left\{ \left[\frac{\alpha_n}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_n^2 + 4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)} \right] z \right\}. \quad (35)$$

Resta encontrar uma solução particular. Desta forma, procura-se a solução particular conforme exposto a seguir, considerando que $\overline{C_{n_p}}$ seja escrita como (KREIDER et al., 1972):

$$\overline{C_{n_p}} = \int_0^h G(z, t) l(t) dt, \quad (36)$$

sendo $l(t) = -\frac{Q}{K_{z_n}} \delta(t - H_s)$ uma função impulso e $G(z, t)$, função de *Green*, dada por:

$$G(z, t) = \frac{y_2(z)y_1(t) - y_1(z)y_2(t)}{W [y_1(t), y_2(t)]}, \quad (37)$$

onde as duas soluções linearmente independentes da equação (35) são $y_1(z)$ e $y_2(z)$ tais que:

$$y_1(z) = e^{\left[\frac{\alpha_n}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_n^2 + 4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)} \right] z}, \quad (38)$$

$$y_2(z) = e^{\left[\frac{\alpha_n}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_n^2 + 4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)} \right] z}, \quad (39)$$

e o Wronskiano destas soluções, $W [y_1(t), y_2(t)]$ é expresso por:

$$W [y_1(t), y_2(t)] = \begin{vmatrix} y_1(t) & y_2(t) \\ y_1'(t) & y_2'(t) \end{vmatrix}. \quad (40)$$

Simplificando a notação, nas equações (38) e (39), utiliza-se:

$$D_n = \frac{\alpha_n}{2} \quad \text{e} \quad F_n = \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_n^2 + 4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)}. \quad (41)$$

Calcula-se $W [y_1(t), y_2(t)]$:

$$W [y_1(t), y_2(t)] = \begin{vmatrix} e^{[D_n + F_n]t} & e^{[D_n - F_n]t} \\ [D_n + F_n] e^{[D_n + F_n]t} & [D_n - F_n] e^{[D_n - F_n]t} \end{vmatrix}, \quad (42)$$

$$W [y_1(t), y_2(t)] = [D_n - F_n] e^{[D_n - F_n]t} e^{[D_n + F_n]t} - [D_n + F_n] e^{[D_n + F_n]t} e^{[D_n - F_n]t}, \quad (43)$$

$$W [y_1(t), y_2(t)] = e^{[D_n - F_n]t} e^{[D_n + F_n]t} [(D_n - F_n) - (D_n + F_n)], \quad (44)$$

$$W [y_1(t), y_2(t)] = e^{[D_n - F_n]t} e^{[D_n + F_n]t} (-F_n - F_n), \quad (45)$$

$$W [y_1(t), y_2(t)] = -2F_n e^{[D_n + F_n]t} e^{[D_n - F_n]t}, \quad (46)$$

$$W [y_1(t), y_2(t)] = -2F_n e^{[D_n + F_n]t + [D_n - F_n]t}, \quad (47)$$

$$W [y_1(t), y_2(t)] = -2F_n e^{2D_n t}. \quad (48)$$

Portanto, a função de *Green* terá a forma,

$$G(z, t) = \frac{e^{[D_n - F_n]z} e^{[D_n + F_n]t} - e^{[D_n + F_n]z} e^{[D_n - F_n]t}}{-2F_n e^{2D_n t}}. \quad (49)$$

Logo, substituindo a equação (49) na equação (36) e lembrando que $l(t) = -\frac{Q}{K_{zn}} \delta(t - H_s)$, tem-se:

$$\overline{C_{np}} = \int_0^h \frac{e^{[D_n - F_n]z} e^{[D_n + F_n]t} - e^{[D_n + F_n]z} e^{[D_n - F_n]t}}{-2F_n e^{2D_n t}} \left[-\frac{Q}{K_{zn}} \delta(t - H_s) \right] dt, \quad (50)$$

$$\overline{C_{np}} = \frac{Q}{2F_n K_{zn}} \left[e^{[D_n - F_n]z} \left(\int_0^h \frac{e^{[D_n + F_n]t}}{e^{2D_n t}} [\delta(t - H_s)] dt \right) + \right. \\ \left. - e^{[D_n + F_n]z} \left(\int_0^h \frac{e^{[D_n - F_n]t}}{e^{2D_n t}} [\delta(t - H_s)] dt \right) \right], \quad (51)$$

$$\overline{C_{np}} = \frac{Q}{2F_n K_{zn}} \left[e^{[D_n - F_n]z} \left(\int_0^h e^{-[D_n - F_n]t} [\delta(t - H_s)] dt \right) + \right. \\ \left. - e^{[D_n + F_n]z} \left(\int_0^h e^{-[D_n + F_n]t} [\delta(t - H_s)] dt \right) \right], \quad (52)$$

$$\overline{C_{np}} = \frac{Q}{2F_n K_{zn}} [e^{[D_n - F_n]z} \cdot e^{-[D_n - F_n]H_s} - e^{[D_n + F_n]z} \cdot e^{-[D_n + F_n]H_s}]. \quad (53)$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & M_{23} & M_{24} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ M_{31} & M_{32} & M_{33} & M_{34} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & M_{43} & M_{44} & M_{45} & M_{46} & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & M_{53} & M_{54} & M_{55} & M_{56} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d-1,d-3} & M_{d-1,d-2} & M_{d-1,d-1} & M_{d-1,d} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & M_{d,d-1} & M_{d,d} \end{bmatrix}, \quad (57)$$

$$\mathbf{v} = \left[A_1 \quad B_1 \quad A_2 \quad B_2 \quad \cdots \quad \cdots \quad A_N \quad B_N \right]^T, \quad (58)$$

$$\mathbf{b} = \left[0 \quad \cdots \quad 0 \quad -P_{n^*} \quad -P'_{n^*} \quad 0 \quad \cdots \quad 0 \right]^T, \quad (59)$$

onde P_{n^*} e P'_{n^*} indicam, respectivamente, a solução particular encontrada e sua derivada e, n^* representa a região onde houve a emissão de poluentes.

Logo,

$$P_{n^*} = \frac{Q}{2F_{n^*}K_{z_{n^*}}} \left[e^{[D_{n^*}-F_{n^*}][z-H_s]} - e^{[D_{n^*}+F_{n^*}][z-H_s]} \right] \quad (60)$$

e

$$P'_{n^*} = K_{z_{n^*}} \frac{Q}{2F_{n^*}K_{z_{n^*}}} \left[[D_{n^*} - F_{n^*}] e^{[D_{n^*}-F_{n^*}][z-H_s]} - [D_{n^*} + F_{n^*}] e^{[D_{n^*}+F_{n^*}][z-H_s]} \right]. \quad (61)$$

Para a matriz \mathbf{M} apresentada anteriormente, calcula-se os elementos por meio das condições de contorno e interface. Em $z = 0$, obtém-se:

$$M_{11} = D_1 + F_1,$$

$$M_{12} = D_1 - F_1,$$

e, para $n = 1, 2, \dots, N - 1$,

$$M_{2n,2n-1} = e^{[D_n+F_n]z_n},$$

$$M_{2n,2n} = e^{[D_n-F_n]z_n},$$

$$M_{2n,2n+1} = -e^{[D_{n+1}+F_{n+1}]z_n},$$

$$M_{2n,2n+2} = -e^{[D_{n+1}-F_{n+1}]z_n},$$

$$M_{2n+1,2n-1} = K_{z_n} [D_n + F_n] e^{[D_n+F_n]z_n},$$

$$\begin{aligned}
M_{2n+1,2n} &= K_{z_n} [D_n - F_n] e^{[D_n - F_n]z_n}, \\
M_{2n+1,2n+1} &= -K_{z_{n+1}} [D_{n+1} + F_{n+1}] e^{[D_{n+1} + F_{n+1}]z_n}, \\
M_{2n+1,2n+2} &= -K_{z_{n+1}} [D_{n+1} - F_{n+1}] e^{[D_{n+1} - F_{n+1}]z_n},
\end{aligned}$$

e, quando $d = 2N$:

$$\begin{aligned}
M_{d,d-1} &= [D_N + F_N] e^{[D_N + F_N]z_N}, \\
M_{d,d} &= [D_N - F_N] e^{[D_N - F_N]z_N}.
\end{aligned}$$

Posteriormente, encontra-se a concentração de poluentes aplicando a Transformada Inversa de Laplace na solução dada pela equação (55), gerando uma solução integral para o problema proposto que será resolvida numericamente. Sendo assim, obtém-se:

$$\begin{aligned}
\bar{c}_n(x, z) &= \frac{1}{2\pi j} \int_{\xi-j\infty}^{\xi+j\infty} e^{sx} \left\{ A_n e^{[D_n + F_n]z} + B_n e^{[D_n - F_n]z} + \right. \\
&\left. + \frac{Q}{2F_n K_{z_n}} \left[e^{[D_n - F_n][z - H_s]} - e^{[D_n + F_n][z - H_s]} \right] \left[H(z - H_s) - H(z - (H_s + \Delta z_n)) \right] \right\} ds, \quad (62)
\end{aligned}$$

onde $D_n = \frac{\alpha_n}{2}$, $F_n = \frac{1}{2} \sqrt{\alpha_n^2 + 4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}} \right)}$ e $j \in \mathbb{C}$.

4.2.3 Inversão usando o Algoritmo de Talbot

Como a resolução da integral de linha presente na solução geral da equação (62) é bastante complexa, pode-se resolvê-la numericamente utilizando o método de *Talbot* (FT algoritmo) proposto por Abate e Valkó (ABATE; VALKÓ, 2004). Tem-se como argumento para tal escolha o fato que o algoritmo de *Talbot* é um método robusto e eficiente para inversão gerando resultados com precisão de até M^* dígitos significativos (onde M^* corresponde ao número de termos do somatório) (VALKÓ; ABATE, 2005). Desta forma,

$$\begin{aligned}
\bar{c}_n(x, z) &= \frac{r}{M^*} \left\{ \frac{1}{2} \bar{c}_n(r, z) e^{rx} + \right. \\
&\left. + \sum_{k=1}^{M^*-1} \operatorname{Re} \left[e^{xS(\theta_k)} \bar{c}_n(S(\theta_k), z) (1 + j\bar{w}(\theta_k)) \right] \right\}, \quad (63)
\end{aligned}$$

onde $j \in \mathbb{C}$, $S(\theta_k) = r\theta(\cot\theta + j)$, $\bar{w}(\theta_k) = \theta_k + (\theta_k \cot\theta_k - 1)\cot\theta_k$, $\theta_k = \frac{k\pi}{M^*}$, $-\pi < \theta < +\pi$ e r , um parâmetro experimental. Ainda, para os termos $\bar{c}_n(r, z)$ e $\bar{c}_n(S(\theta_k), z)$, utiliza-se a equação (55).

A solução do problema estará estabelecida por completo quando forem determinados os parâmetros turbulentos utilizados, conforme o próximo capítulo.

4.3 Algumas Considerações acerca da Solução Encontrada

Considerando $\alpha_n = 0$ no problema (18), obtém-se:

$$\begin{cases} u_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} = K_{z_n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} \\ K_{z_n} \left(\frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \right) = 0 \quad \text{em } z = 0, h \\ u_n \bar{c}_n = Q \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \end{cases}, \quad (64)$$

que é um problema advectivo-difusivo para modelar a dispersão de poluentes sem considerar o fechamento não local, ou seja, um problema de fechamento solucionado pela lei de Fick (fechamento local), onde assume-se que os fluxos turbulentos são proporcionais ao gradiente de concentração média (conforme a equação (7)).

Ao solucionar o problema (64) através do método ADMM, faz-se cálculos análogos aos apresentados na seção 4.2, aplicando a Transformada de Laplace em x e resolvendo uma equação diferencial ordinária dependente apenas de z , obtendo a seguinte solução geral:

$$\begin{aligned} \bar{C}_n(s, z) = & A_n e^{[F_n]z} + B_n e^{[-F_n]z} + \\ & + \frac{Q}{2F_n K_{z_n}} [e^{[-F_n][z-H_s]} - e^{[F_n][z-H_s]}] [H(z - H_s) - H(z - (H_s + \Delta z_n))], \end{aligned} \quad (65)$$

onde $F_n = \sqrt{\left(\frac{u_n s}{K_{z_n}}\right)}$, H é a função de Heaviside e Δz_n é a altura da subcamada.

Posteriormente, chega-se a solução integral:

$$\begin{aligned} \bar{c}_n(x, z) = & \frac{1}{2\pi j} \int_{\xi-j\infty}^{\xi+j\infty} e^{sx} \{ A_n e^{[F_n]z} + B_n e^{[-F_n]z} + \\ & + \frac{Q}{2F_n K_{z_n}} [e^{[-F_n][z-H_s]} - e^{[F_n][z-H_s]}] [H(z - H_s) - H(z - (H_s + \Delta z_n))] \} ds, \end{aligned} \quad (66)$$

onde $j \in \mathbb{C}$, $F_n = \sqrt{\left(\frac{u_n s}{K_{z_n}}\right)}$, H é a função de Heaviside e Δz_n é a altura da subcamada (MOREIRA et al., 2006).

Pode-se observar que na equação (62), a qual é a solução do problema proposto neste trabalho, quando $\alpha = 0$ tem-se $D_n = 0$ e $F_n = \frac{1}{2} \sqrt{4 \left(\frac{u_n s}{K_{z_n}}\right)} = \sqrt{\left(\frac{u_n s}{K_{z_n}}\right)}$ obtendo, desta forma, uma expressão idêntica à equação (66). Ou seja, pode-se afirmar que o problema (18) que considera os efeitos não locais na dispersão por meio do acréscimo do termo de contragradiente é uma generalização do problema (64). Além disso, a solução do problema mais geral, problema (18), dada pela equação (62) quando $\alpha = 0$

é a própria solução do problema (64) dada pela equação (66), mostrando que o método ADMM aplicado ao resolver estes problemas é consistente.

5 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA E PERFIL DO VENTO

A escolha adequada de uma parametrização turbulenta é de fundamental importância ao estimar a concentração de poluentes na CLC através da modelagem matemática. Deste modo, opta-se por parâmetros a fim de exprimir da melhor forma possível a realidade física que há por trás dos modelos matemáticos, fazendo com que estes últimos se aproximem ao máximo das condições reais encontradas em problemas de difusão atmosférica.

5.1 Coeficiente de Difusão

Diversas formulações para o coeficiente de difusão turbulento vertical são encontradas na literatura (ULKE, 2000). Neste trabalho utilizam-se três coeficientes de difusão turbulento vertical válidos na CLC, sendo representados pelas equações (67), (70) e (71), que serão apresentadas mais adiante.

Através da teoria de difusão de Taylor formula-se os coeficientes de difusão que foram deduzidos por Degrazia et al. (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001) (DEGRAZIA et al., 2000) e estes são combinados com o espectro de energia cinética turbulenta para assim descrever a estrutura turbulenta da CLC.

O primeiro coeficiente de difusão turbulento utilizado neste trabalho foi proposto por Degrazia et al. em 2001 (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001), é válido para grandes tempos de difusão e possui a seguinte formulação:

$$K_{\alpha} = \frac{0.55z (1.06c_i)^{1/2} \psi^{1/3} \left(\frac{z}{h}\right)^{1/3} w_*}{4 (f_m^*)_i^{4/3}}, \quad (67)$$

onde w_* é a escala de velocidade convectiva, $\psi = 1.5 - 1.2 \left(\frac{z}{h}\right)^{1/3}$ é a função de dissipação adimensional (LUHAR; BRITTER, 1989), $c_i = \alpha_i (0.5 \pm 0.05) (2\pi\kappa)^{-2/3}$ (CHAMPAGNE et al., 1977) onde $\kappa = 0.4$ é a constante de von Kármán e $\alpha_i = 1, \frac{4}{3}, \frac{4}{3}$ (SORBJAN, 1989), para as componentes de direção do vento u, v e w . Em suma,

utiliza-se $c_i = 0.36$ para as componentes transversais e $c_i = 0.27$ para a componente longitudinal. Ainda, tem-se que $(f_m^*)_i$ é a frequência adimensional do pico espectral:

$$(f_m^*)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i}, \quad (68)$$

sendo $(\lambda_m)_w$ o comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical (CAUGHEY; PALMER, 1979), dado por:

$$(\lambda_m)_w = \begin{cases} \frac{z}{0.55-0.38|\frac{z}{L}|} & 0 \leq z \leq |L| \\ 5.9z & |L| \leq z \leq 0.1h \\ 1.8h \left[1 - e^{\left(\frac{-4z}{h}\right)} - 0.0003e^{\left(\frac{8z}{h}\right)} \right] & 0.1h < z \end{cases}, \quad (69)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukov.

O segundo coeficiente utilizado nesta dissertação também foi sugerido por Degrazia et al. (DEGRAZIA et al., 2000), em 2000, sendo este:

$$K_\beta = 0.16w_*h \left(0.01 \frac{h}{-L} \right)^{1/2} \left[1 - \exp\left(\frac{-4z}{h}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right) \right]^{4/3}. \quad (70)$$

Por fim, tem-se o terceiro coeficiente de difusão, deduzido por Lamb e Durran em 1997 (SEINFELD; PANDIS, 1997), que é dado por:

$$K_\zeta = \begin{cases} 2.5w_*h \left(\frac{\kappa z}{h}\right)^{4/3} \left(1 - 15\frac{z}{L}\right)^{1/4} & 0 \leq \frac{z}{h} < 0.05 \\ w_*h \left[0.021 + 0.408\frac{z}{h} + 1.351\left(\frac{z}{h}\right)^2 - 4.096\left(\frac{z}{h}\right)^3 + 2.560\left(\frac{z}{h}\right)^4 \right] & 0.05 \leq \frac{z}{h} \leq 0.6 \\ 0.2w_*he^{(6-10\frac{z}{h})} & 0.6 < \frac{z}{h} \leq 1.1 \\ 0.0013w_*h & \frac{z}{h} > 1.1 \end{cases}, \quad (71)$$

sendo κ a constante de von Kármán.

Como já comentado anteriormente, a eficiência de um modelo está diretamente ligada a escolha adequada de uma parametrização para os coeficientes de difusão. Assim, é de fundamental importância ao aplicar uma devida parametrização para o coeficiente de difusão, analisar as condições atmosféricas (instável, estável ou neutra) que predominam em cada camada a ser avaliada na atmosfera, visto que estas condições são distintas para cada uma. Desta forma, no presente trabalho, é verificada a influência dos três coeficientes de difusão mencionados acima, sendo estes válidos na CLC, ou seja, para condições instáveis da atmosfera.

Além disso, na parametrização para o termo de contragradiente dada na equação (10), será utilizada constante $b = 1.5$, valor proposto por Cuijpers e Holtslag (CUIJPERS; HOLTSLAG, 1998) e para σ_w^2 serão testadas três expressões distintas a fim de analisar qual apresentará melhores resultados.

A primeira expressão foi deduzida por Sorbjan (SORBJAN, 1989):

$$\sigma_w^2 = 1.8 \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2. \quad (72)$$

Outra parametrização utilizada para σ_w^2 foi proposta por Holstlag e Moeng (HOLSTLAG; MOENG, 1991) e tem a forma:

$$\sigma_w^2 = \left\{ \left[1.6u_*^2 \left(1 - \frac{z}{h}\right) \right]^{3/2} + 1.2w_*^3 \left(\frac{z}{h}\right) \left(1 - 0.9\frac{z}{h}\right)^{3/2} \right\}^{3/2}, \quad (73)$$

onde u_* é a velocidade de fricção.

Deduzida por Degrazia et al. (DEGRAZIA et al., 2000), a terceira fórmula utilizada nesta dissertação para o σ_w^2 e, é representada como se segue:

$$\sigma_w^2 = a_w^2 w_*^2 + b_w^2 u_*^2, \quad (74)$$

sendo $a_w = 500$ e $b_w = 1.8(1 - \exp(-4z/h) - 0.0003\exp(8z/h))$.

No próximo capítulo, para facilitar a notação, a equação (72) será denotada por $\sigma_{w_1}^2$, a equação (73) será denotada por $\sigma_{w_2}^2$ e a equação (74), por $\sigma_{w_3}^2$.

5.2 Perfil do Vento

Neste trabalho são testados dois perfis de vento a fim de verificar qual proporciona melhores resultados perante as simulações realizadas. Um dos perfis de vento foi descrito através de uma lei logarítmica expressa como (BERKOWICZ; OLESEN; TORP, 1986):

$$u = \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b, \quad (75)$$

onde κ é a constante de von Kármán, u_* é a velocidade de fricção, z_0 o comprimento de rugosidade, $z_b = \min[|L|, 0.1h]$ e Ψ_m função estabilidade expressa em (PAULSEN, 1975) como:

$$\Psi_m = 2 \ln \left[\frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[\frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2}, \quad (76)$$

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

O outro perfil de vento obedece uma lei de potência (PANOFSKY; DUTTON, 1988) definida como:

$$\frac{\bar{u}_z}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1} \right)^p, \quad (77)$$

onde \bar{u}_z e \bar{u}_1 são as velocidades do vento médio nas alturas z e z_1 e p está relacionado com a intensidade da turbulência. Como este trabalho é descrito para a CLC,

em condições instáveis e o expoente p varia conforme a condição de estabilidade atmosférica, usa-se $p = 0.1$ (ARYA, 1999).

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O capítulo dedica-se a realização das análises gráficas e estatísticas sobre as concentrações obtidas pela solução, mostrando a estabilidade das concentrações, estabelecendo um estudo acerca dos coeficientes de difusão, expressões utilizadas no cálculo do termo de contragradiente e perfis de vento empregados sendo, essencialmente, voltado à análise da sensibilidade do modelo.

Desta forma, os resultados obtidos são apresentados por meio das simulações numéricas que foram implementadas computacionalmente através da linguagem de programação FORTRAN 90. Para a simulação, considerou-se a altura de cada subcamada (Δz_n) constante e seu valor é $\Delta z_n = 10m$.

Ainda, avalia-se a solução obtida comparando com resultados disponíveis na literatura e faz-se uma análise crítica sobre a física que embasa essa abordagem.

Para a obtenção da concentração de poluentes, foram aplicados dados micrometeorológicos do experimento de Copenhagen. As parametrizações turbulentas como os coeficientes de difusão e os perfis de vento utilizados foram expressos no Capítulo 5.

6.1 Experimento de Copenhagen

Conforme mencionado anteriormente, o experimento de Copenhagen (GRYNING et al., 1987) (GRYNING; LYCK, 1984) (GRYNING, 2002) consistiu na liberação de SF₆ (Hexafluoreto de enxofre) de uma fonte de 115 m de altura na região norte de Copenhagen (zona basicamente residencial com rugosidade de 0,6 m).

O poluente foi coletado ao nível da superfície por amostradores de concentração em três distâncias na direção preferencial do vento. As posições das unidades de amostragem variam entre distâncias de, aproximadamente, 2 a 6 km, partindo do local onde deu-se a liberação do SF₆. Esta liberação do poluente teve início uma hora antes de começar a ocorrer a coleta dos dados. Veja Figura 5.

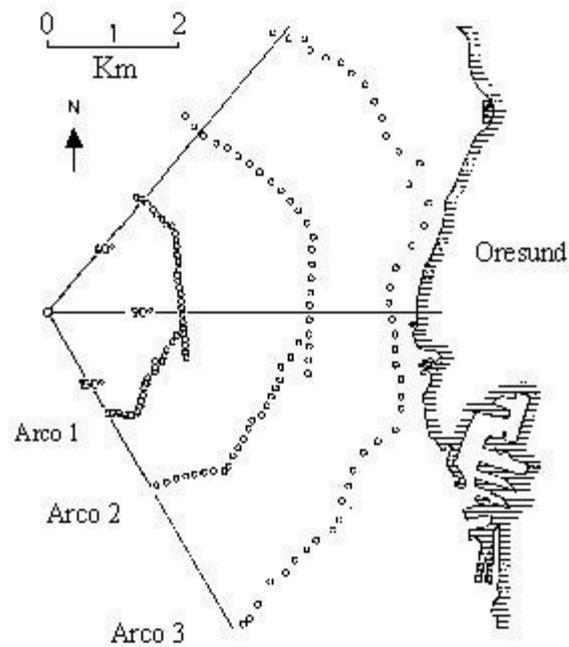


Figura 5: O experimento de Copenhagen.

A tabela 2 apresenta os dados coletados do experimento de Copenhagen (GRY-NING, 2002) referentes a CLC e que serão utilizados para validar o modelo sugerido neste trabalho.

Tabela 2: Dados micrometeorológicos do experimento de Copenhagen e concentrações observadas (C_o).

Experimento	$U(H_s = 115m)$ (ms^{-1})	u_* (ms^{-1})	L (m)	w_* (ms^{-1})	h (m)	Distância (m)	C_o ($10^{-4}sm^{-2}$)
1	3.4	0.37	-46	1.8	1980	1900	6.48
						3700	2.31
2	10.6	0.74	-384	1.8	1920	2100	5.38
						4200	2.95
3	5.0	0.39	-108	1.3	1120	1900	8.20
						3700	6.22
						5400	4.30
4	4.6	0.39	-173	0.7	390	4000	11.66
5	6.7	0.46	-577	0.7	820	2100	6.72
						4200	5.84
						6100	4.97
6	13.2	1.07	-569	2.0	1300	2000	3.96
						4200	2.22
						5900	1.83
7	7.6	0.65	-136	2.2	1850	2000	6.70
						4100	3.25
						5300	2.23
8	9.4	0.70	-72	2.2	810	1900	4.16
						3600	2.02
						5300	1.52
9	10.5	0.77	-382	1.9	2090	2100	4.58
						4200	3.11
						6000	2.59

6.1.1 Índices Estatísticos

Para poder comparar o modelo apresentado com os dados observados no experimento de Copenhagen, faz-se uso de índices estatísticos que se encontram presentes na literatura e que são fortemente recomendados para validar modelos.

Para calcular tais índices estatísticos, é utilizado um programa que foi desenvolvido por Hanna em 1989 (HANNA, 1989), o qual emprega um procedimento padrão aceito e assumido pela comunidade científica da área de dispersão atmosférica.

Com relação a notação, a concentração observada é representada por C_o , enquanto que a predita pelo modelo, por C_p . Ainda, σ descreve o desvio padrão.

Seguem os índices estatísticos que foram aplicados nesta dissertação:

a) O **erro quadrático médio normalizado** ($Nmse$) é um índice estatístico que apresenta todos os desvios ocorridos entre as concentrações observadas e as preditas pelo modelo. Para bons resultados, seu valor deve ser o menor possível.

$$Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}.$$

b) O **coeficiente de correlação** (Cor) indica o grau de associação ou concordância entre as variáveis envolvidas. Quanto mais próximo de um for o seu valor, melhor desempenho da solução.

$$Cor = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}.$$

c) O **fator de 2** ($Fa2$) expressa a porcentagem dos dados que se encontram entre $0.5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$. Logo, para uma boa confiabilidade do modelo, seu valor deve ser o mais próximo de um.

d) A **fração de inclinação** (Fb) mostra a propensão do modelo em superestimar ou subestimar as concentrações observadas. Seu valor ótimo é zero.

$$Fb = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}.$$

e) O **desvio fracional padrão** (Fs) representa o grau de distanciamento das C_o em relação às C_p . Caso $Fs < 0$, o valor previsto está mais disperso que o observado e se $Fs > 0$ o valor previsto está menos disperso que o observado. Seu valor ótimo é zero.

$$Fs = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}.$$

6.2 Resultados

O desempenho do modelo ADMM bidimensional para simular a dispersão de poluentes na atmosfera com uma abordagem diferente da usual para o termo de contragradiente e sob condições instáveis foi avaliado usando os dados do experimento de Copenhagen.

As simulações foram realizadas para os três diferentes coeficientes de difusão (denotados por K_α , K_β e K_ζ e dados pelas equações (67), (70) e (71), respectivamente) e para os dois perfis de vento, um obedecendo uma lei logarítmica (equação (75)) e outro, lei de potência (equação (77)), conforme descrito no Capítulo 5. Ainda, elaborou-se tais simulações para as diferentes expressões de σ_w^2 no cálculo do termo do contragradiente conforme apresentadas no Capítulo 5 pelas equações (72), (73) e (74), denotas por $\sigma_{w_1}^2$, $\sigma_{w_2}^2$ e $\sigma_{w_3}^2$, respectivamente.

Além disso, para evidenciar a influência do termo do contragradiente ao esti-

mar a concentração de poluentes, foram refeitas as simulações sem este termo, considerando-se $\alpha = 0$ na expressão do termo de contragradiente (equação (11)), conseqüentemente, anulando-o ($\gamma = 0$).

Primeiramente, foi realizado um estudo da estabilidade do modelo com o método de inversão utilizado (ABATE; VALKÓ, 2004). Através das Figuras 6 e 8 parametrizadas com um perfil de vento logarítmico e das Figuras 7 e 9, com um perfil de vento que obedece uma lei de potência, pode-se verificar a estabilidade para o modelo.

Tais análises foram realizadas para o modelo que considera os efeitos não locais na dispersão (com contragradiente), para as três distintas expressões para σ_w^2 e, também, para aquele modelo que desconsidera o termo de contragradiente (com $\alpha = 0$). Nas Figuras 6 e 7 utilizam-se os dados do experimento 8 de Copenhague (Tabela 2). Já nas Figuras 8 e 9 são usados os dados do experimento 9 de Copenhague (Tabela 2). Vale ressaltar que nos dois experimentos tomou-se distâncias da fonte de $x = 500m$ e $x = 4000m$.

As Figuras 6, 7, 8 e 9 mostram que o método de inversão empregado é adequado para obter a solução tanto para o modelo com o termo de contragradiente como para o que desconsidera este termo, uma vez que ambos modelos se estabilizam aproximadamente a partir de 40 termos do somatório. Ainda, pode-se afirmar que a escolha do perfil de vento não prejudica a estabilidade da solução pois ela se estabiliza para ambos perfis de ventos utilizados.

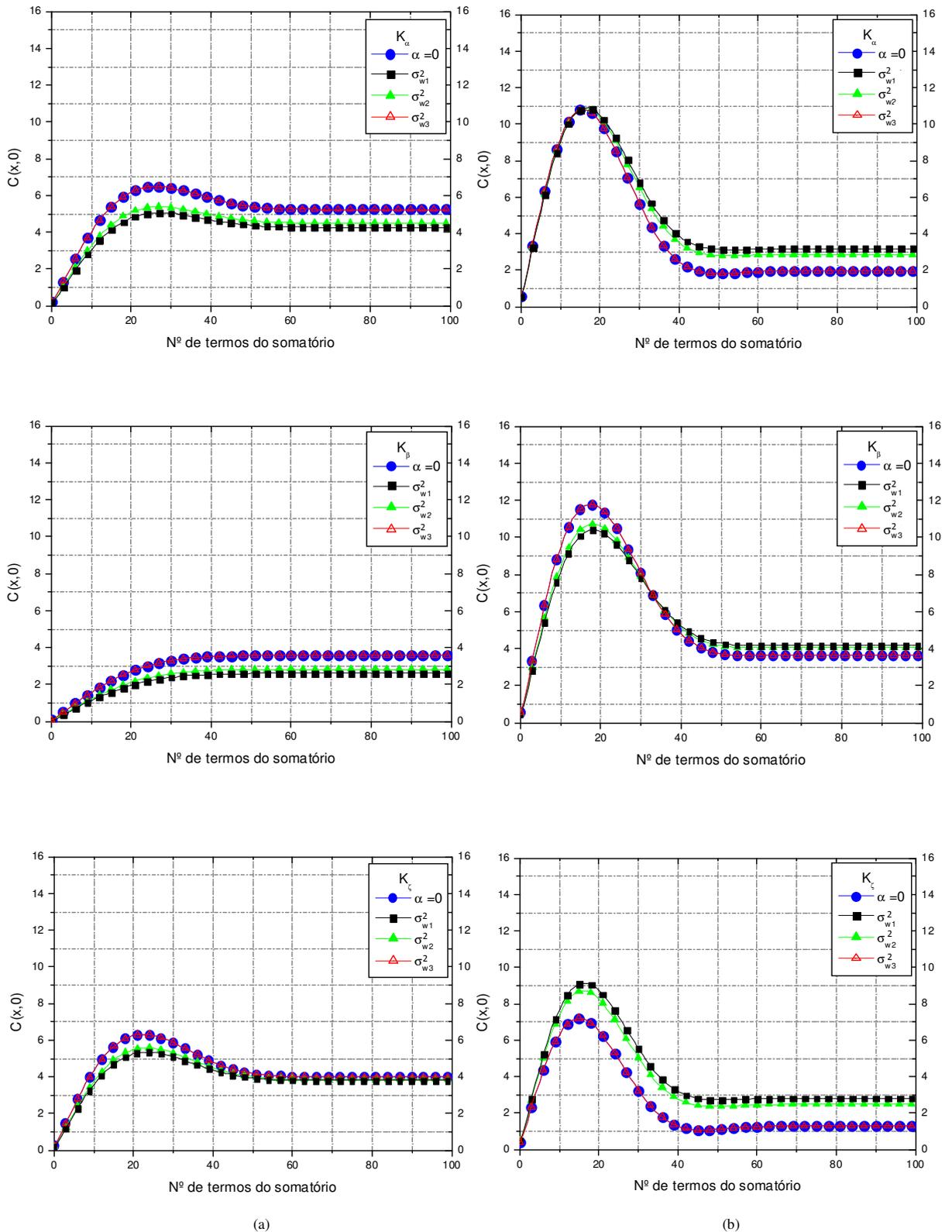


Figura 6: Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contragradiente para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^* = 100$, considerando o algoritmo de *Talbot*. Utilizando-se dados do experimento 8 de Copenhague, o vento que obedece uma lei logarítmica e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$.

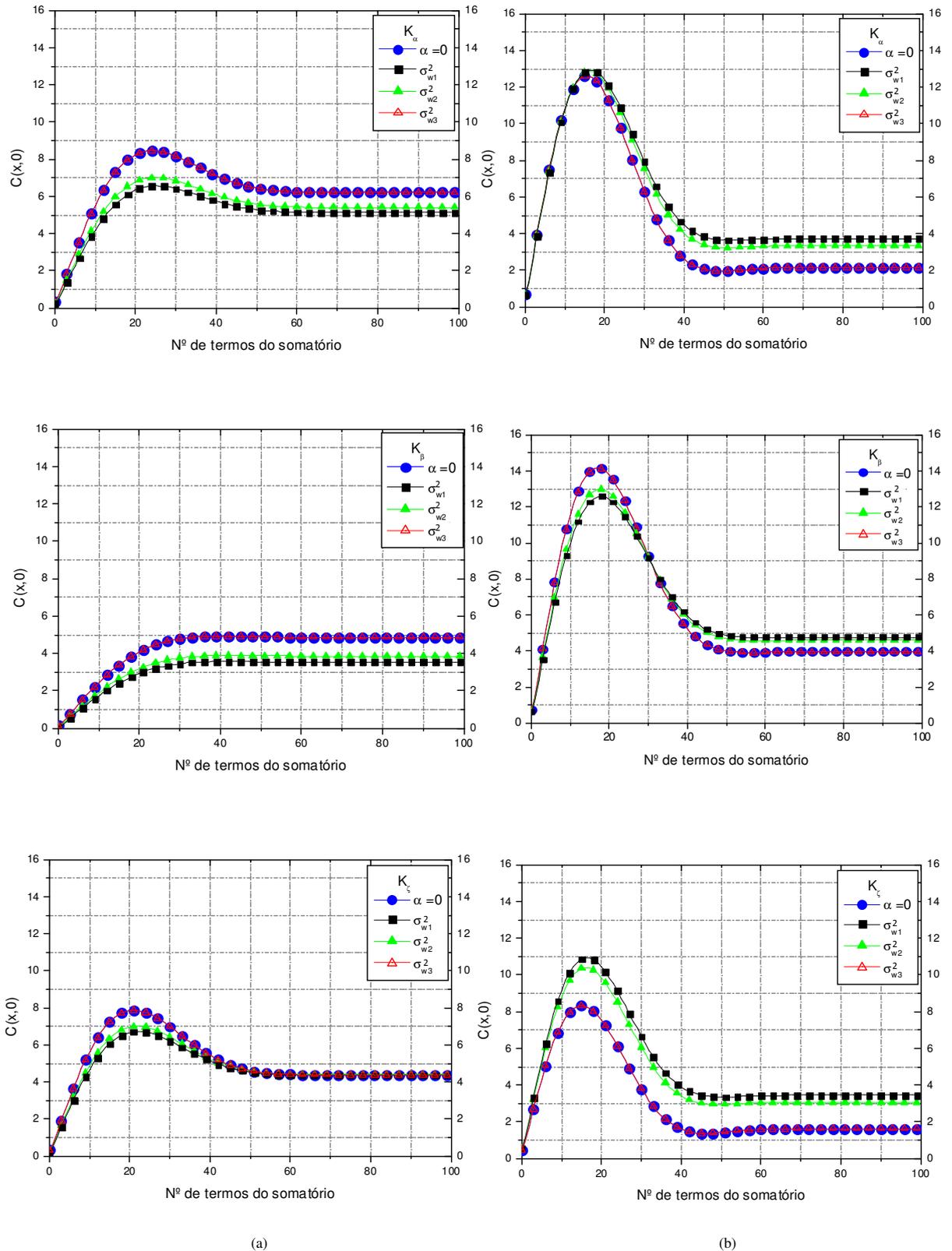


Figura 7: Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contragradiente para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^*=100$, considerando o algoritmo de *Talbot*. Utilizando-se dados do experimento 8 de Copenhagen, o vento que obedece uma lei de potência e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$.

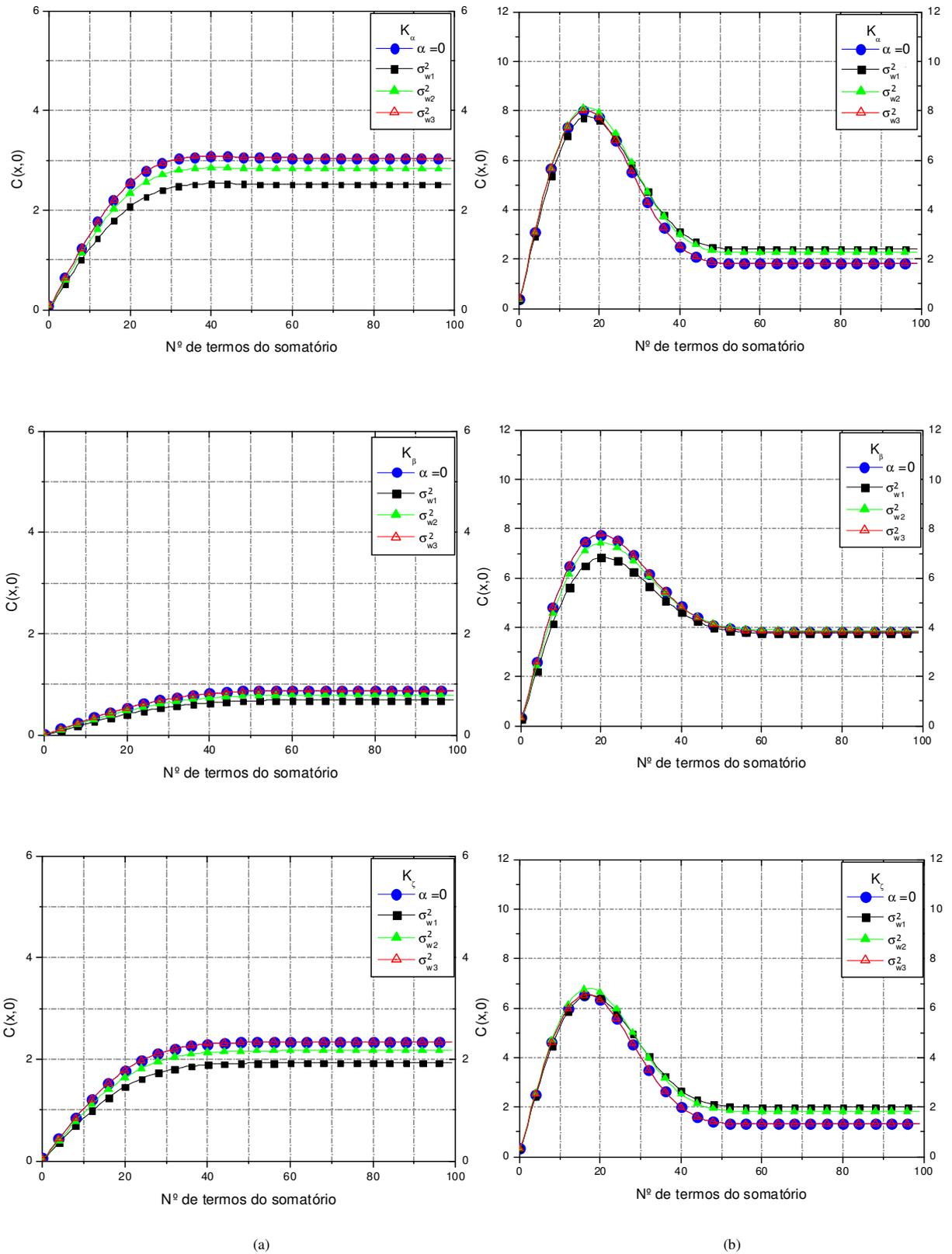


Figura 8: Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contragradiante para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^*=100$, considerando o algoritmo de *Talbot*. Utilizando-se dados do experimento 9 de Copenhague, o vento que obedece uma lei logarítmica e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$.

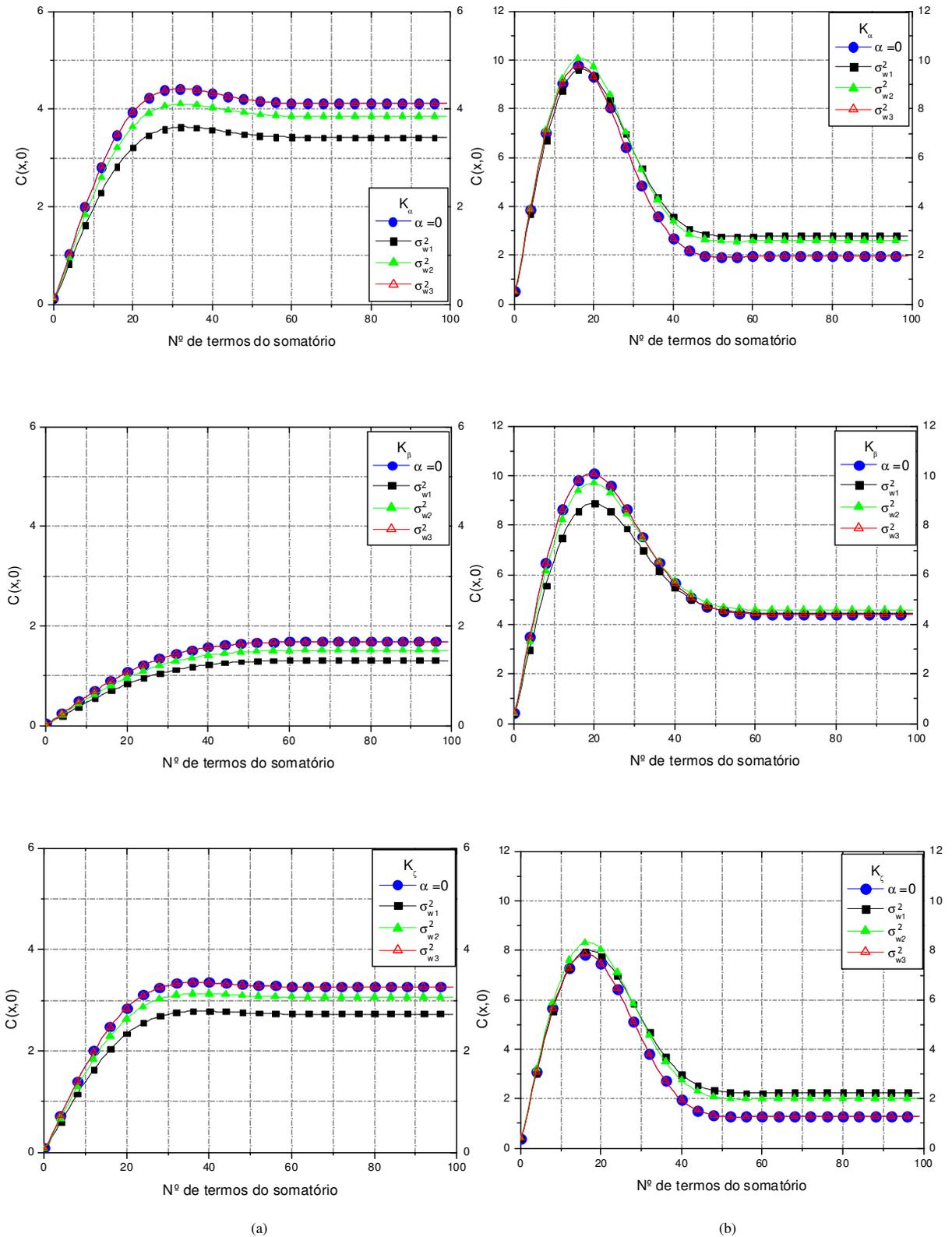


Figura 9: Estabilidade numérica da solução proposta com o termo de contragradiente para a concentração com o aumento do número de termos do somatório até $M^*=100$, considerando o algoritmo de *Talbot*. Utilizando-se dados do experimento 9 de Copenhagen, o vento que obedece uma lei de potência e os três coeficientes de difusão. Em (a), tem-se distâncias para $x = 500m$ e em (b), $x = 4000m$.

Uma vez constatada a estabilidade dos modelos com o método de inversão empregado, o próximo passo foi estimar as concentrações de poluentes. A Tabela 3 mostra a análise estatística dos modelos com e sem termo de contragradiente quando confrontados com os dados observados no experimento de Copenhagen para os três coeficientes de difusão turbulentos e para o perfil de vento descrito por meio de uma lei logarítmica.

Tabela 3: Índices estatísticos para os modelos com e sem termo de contragradiente e com perfis de vento que obedecem uma lei logarítmica.

	Modelo	Coef.	σ_w^2	Nmse	Cor	Fa2	Fb	Fs
1	Com Contragradiente	K_α	$\sigma_{w_1}^2$	0.12	0.87	1.00	0.16	0.40
2	Com Contragradiente	K_α	$\sigma_{w_2}^2$	0.40	0.37	0.91	0.24	0.43
3	Com Contragradiente	K_α	$\sigma_{w_3}^2$	0.29	0.90	0.87	0.41	0.43
4	Sem Contragradiente	K_α	-	0.27	0.90	0.96	0.39	0.44
5	Com Contragradiente	K_β	$\sigma_{w_1}^2$	0.21	0.55	0.83	0.04	0.36
6	Com Contragradiente	K_β	$\sigma_{w_2}^2$	0.47	-0.10	0.74	0.15	0.68
7	Com Contragradiente	K_β	$\sigma_{w_3}^2$	0.12	0.76	0.91	0.02	0.22
8	Sem Contragradiente	K_β	-	0.13	0.73	0.83	-0.07	0.20
9	Com Contragradiente	K_ζ	$\sigma_{w_1}^2$	0.29	0.87	0.96	0.38	0.55
10	Com Contragradiente	K_ζ	$\sigma_{w_2}^2$	0.52	0.40	0.83	0.37	0.38
11	Com Contragradiente	K_ζ	$\sigma_{w_3}^2$	1.15	0.79	0.35	0.83	0.63
12	Sem Contragradiente	K_ζ	-	0.69	0.84	0.61	0.65	0.60

Observando a Tabela 3 e fazendo uma análise dos coeficientes de difusão separadamente, pode-se notar que sempre há um resultado com termo de contragradiente que é melhor do que sem o termo.

Para K_α , foi obtido melhor resultado quando usa-se o $\sigma_{w_1}^2$ no cálculo do contragradiente, conforme linha 1 da Tabela 3. Já ao analisar o coeficiente de difusão K_β , tem-se melhor resultado ao considerar o $\sigma_{w_3}^2$ no termo do contragradiente, conforme linha 7 da Tabela 3. E, para K_ζ , o melhor resultado foi encontrado ao utilizar $\sigma_{w_1}^2$ no cálculo do contragradiente, conforme linha 9 da Tabela 3.

Além disso, foram realizadas as mesmas análises de índices estatísticos para o perfil de vento que obedece uma lei de potência, conforme a Tabela 4.

Tabela 4: Índices estatísticos para os modelos com e sem termo de contragradiente com perfis de vento que obedecem uma lei de potência.

	Modelo	Coef.	σ_w^2	Nmse	Cor	Fa2	Fb	Fs
1	Com Contragradiente	K_α	$\sigma_{w_1}^2$	0.07	0.87	0.91	0.01	0.24
2	Com Contragradiente	K_α	$\sigma_{w_2}^2$	0.34	0.35	0.87	0.08	0.22
3	Com Contragradiente	K_α	$\sigma_{w_3}^2$	0.19	0.89	0.96	0.31	0.28
4	Sem Contragradiente	K_α	-	0.16	0.89	0.96	0.27	0.27
5	Com Contragradiente	K_β	$\sigma_{w_1}^2$	0.17	0.64	0.83	-0.15	0.25
6	Com Contragradiente	K_β	$\sigma_{w_2}^2$	0.38	-0.07	0.74	-0.03	0.61
7	Com Contragradiente	K_β	$\sigma_{w_3}^2$	0.12	0.80	0.87	-0.15	0.03
8	Sem Contragradiente	K_β	-	0.15	0.79	0.87	-0.25	0.02
9	Com Contragradiente	K_ζ	$\sigma_{w_1}^2$	0.15	0.84	0.91	0.21	0.35
10	Com Contragradiente	K_ζ	$\sigma_{w_2}^2$	0.43	0.36	0.83	0.21	0.15
11	Com Contragradiente	K_ζ	$\sigma_{w_3}^2$	0.87	0.79	0.44	0.73	0.45
12	Sem Contragradiente	K_ζ	-	0.47	0.83	0.70	0.54	0.40

Através da Tabela 4, onde considera-se o perfil de vento que obedece a lei de potência, observa-se que a modelagem com o termo do contragradiente não apresenta uma expressiva vantagem de utilização em relação ao modelo sem este termo. Porém, quando usa-se K_ζ com $\sigma_{w_1}^2$ (linha 9, Tabela 4) o resultado do modelo com o termo de contragradiente apresenta uma melhora significativa.

De modo geral, pode-se observar através das análises das Tabelas 3 e 4, que o modelo apresentou bons resultados com exceção das linhas 6 e 11 de ambas tabelas. Ou seja, de acordo com os testes aqui realizados pode-se afirmar que não é indicado simular a dispersão de poluentes com o termo de contragradiente utilizando na parametrização da turbulência o coeficiente de difusão K_β com $\sigma_{w_2}^2$ ao mesmo tempo, assim como, o coeficiente de difusão K_ζ com $\sigma_{w_3}^2$, independentemente do perfil de vento empregado.

Ainda, os melhores resultados ocorrem na Tabela 3, linha 1, quando as concentrações de poluentes são estimadas combinando o coeficiente de difusão K_α , $\sigma_{w_1}^2$ no termo do contragradiente e perfil de vento obedecendo uma lei logarítmica. Esta afirmação decorre do fato dos valores dos índices $Nmse$, Fb e Fs estarem na vizinhança de zero, o valor de Cor próximo a um e, principalmente, o $Fa2$ ser igual a um.

A Figura 10 apresenta gráficos de espalhamento entre as concentrações observadas (C_o) em todos os experimentos de Copenhagen e as previstas pelo modelo (C_p) para os três coeficientes de difusão e os dois perfis de vento. Em cada gráfico há a comparação das concentrações calculadas com as diferentes expressões utilizadas para σ_w^2 no termo de contragradiente e, também, as concentrações estimadas com $\alpha = 0$ (efeito local). Desta forma, na Figura 10, tem-se a análise dos modelos com efeito local e não local.

O melhor resultado da Tabela 3 (linha 1) é evidenciado no gráfico (a) da Figura 10, no qual apresenta todos pontos dentro do campo $0.5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$ (Fa2), ou melhor, apresenta todos pontos compreendidos entre as duas linhas e isso não ocorre em mais nenhum gráfico.

Já as Figuras 11 e 12 apresentam a concentração prevista ao nível do solo em função da distância da fonte, tanto para o modelo que leva em conta o termo de contragradiente, sendo utilizado novamente as três diferentes expressões para σ_w^2 , como para o que desconsidera este termo ($\alpha = 0$). Neste caso foram utilizados os dados do experimento de Copenhagen (Tabela 2), mais precisamente, dados do experimento 8 na Figura 11 e dados do experimento 9 na Figura 12.

Através das Figuras 11 e 12, pode-se observar o processo de homogeneização das concentrações ao utilizar quaisquer coeficiente de difusão. Ao considerar distâncias menores, ou seja, próximas a fonte, as concentrações calculadas com o termo de contragradiente apresentam valores menores que as calculadas sem o termo de contragradiente. Porém, a partir de uma determinada distância, ocorre o inverso; ou seja, as concentrações com contragradiente são sempre maiores quando comparadas àquelas calculadas sem este termo.

A distância onde acontece este fenômeno varia de acordo com o experimento, coeficiente de difusão e perfil de vento empregados. Na Figura 11, quando utiliza-se K_α com perfil de vento que obedece uma lei logarítmica, isto ocorre a partir de $1100m$, já para vento com perfil de potência, começa a partir de $1000m$. Para K_β tem início em $2600m$ quando utiliza-se vento com perfil logarítmico e altera para $2500m$, para vento com perfil de potência. Já para K_ζ , a mudança ocorre a partir de $600m$ com perfil de vento que obedece uma lei logarítmica e a partir de $500m$, com perfil de vento obedecendo uma lei de potência. Na Figura 12, ao utilizar K_α com perfil de vento que obedece uma lei logarítmica, isto acontece a partir de $1500m$, já para vento com perfil de potência, ocorre a partir de $1400m$. Para K_β , a mudança inicia em $4500m$ quando utiliza-se vento com perfil logarítmico e em $4100m$, para vento com perfil de potência. Já para K_ζ , tem início em $1600m$ com perfil de vento que obedece uma lei logarítmica e a partir de $1400m$, com perfil de vento obedecendo uma lei de potência.

Salienta-se que todos experimentos de Copenhagen (Tabela 2) ou são de classe A ou de classe B,C conforme os dados da Tabela 1 sobre estabilidade atmosférica.

Logo, escolheu-se trabalhar com o experimento 8 por este ser de classe A (muito instável) e o experimento 9, por representar a classe B,C (instável).

Ainda, vale ressaltar que o experimento de Copenhagen foi medido considerando distâncias em torno de $x = 2km$ até $x = 6km$, o que evidencia a importância da análise da qualidade do ar para distâncias que se encontram mais longes da fonte poluidora.

Sendo assim, se o termo de contragradiente não for considerado, as concentrações distantes da fonte serão subestimadas, uma vez que o termo de contragradiente acarretou num aumento das concentrações.

Portanto, ao realizar uma análise dos índices estatísticos das Tabelas 3 e 4 e, observando as Figuras 10, 11 e 12, conclui-se que o modelo sugerido nesta dissertação, o qual considera o coeficiente de difusão K_α e o termo de contragradiente calculado com $\sigma_{w_1}^2$ e que, conseqüentemente, utiliza uma modelagem mais realística, levando em conta a estrutura complexa da turbulência, possui uma melhor aproximação com a realidade e apresenta melhores resultados quando comparado com o modelo que desconsidera os efeitos não locais na dispersão.

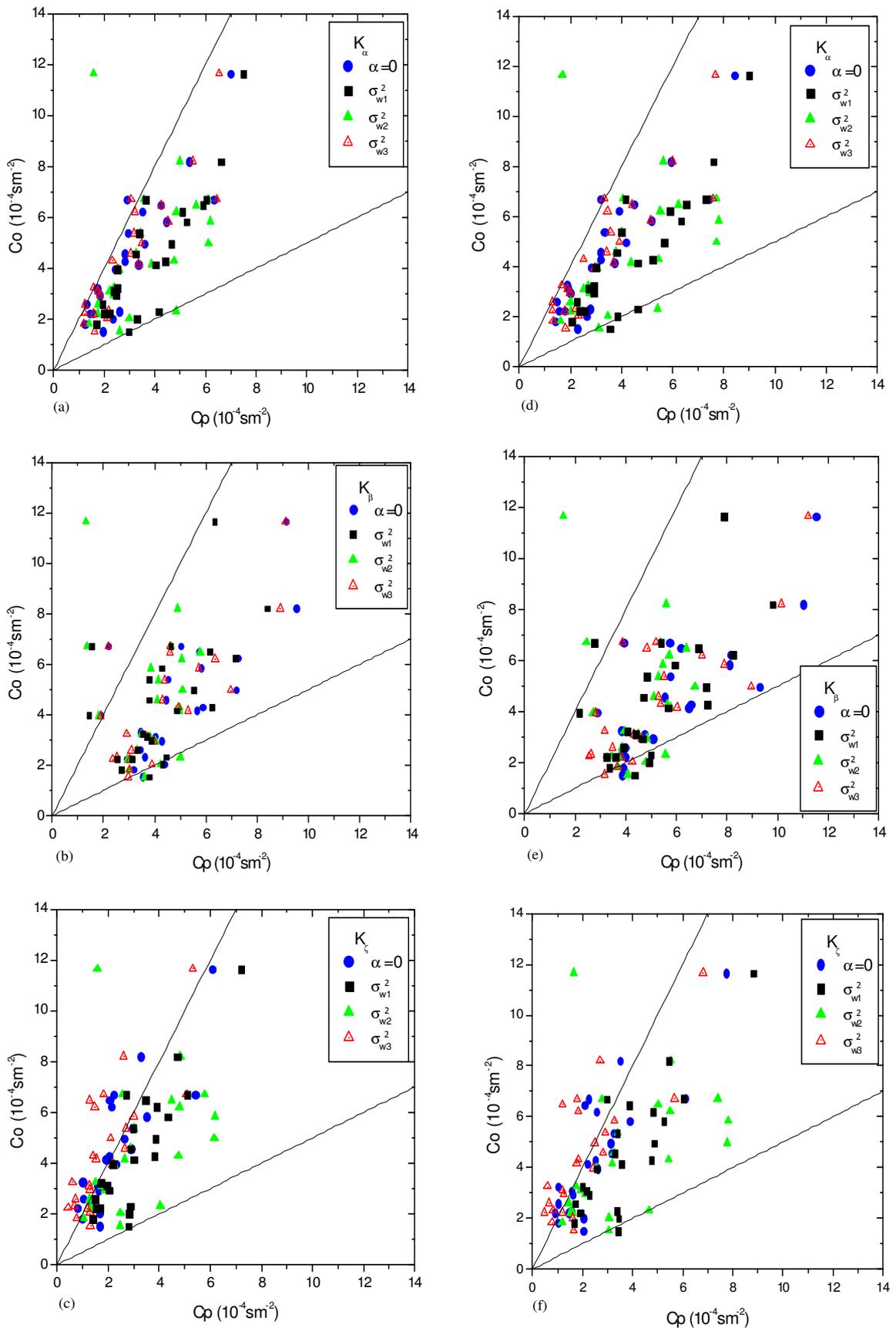


Figura 10: Gráficos de espalhamento entre as concentrações observadas (C_o) e as previstas pelo modelo (C_p) para os três coeficientes de difusão. Na 1ª coluna, para os gráficos (a), (b) e (c) utiliza-se vento com perfil logarítmico, já na 2ª, para os gráficos (d), (e) e (f), vento que segue a lei de potência.

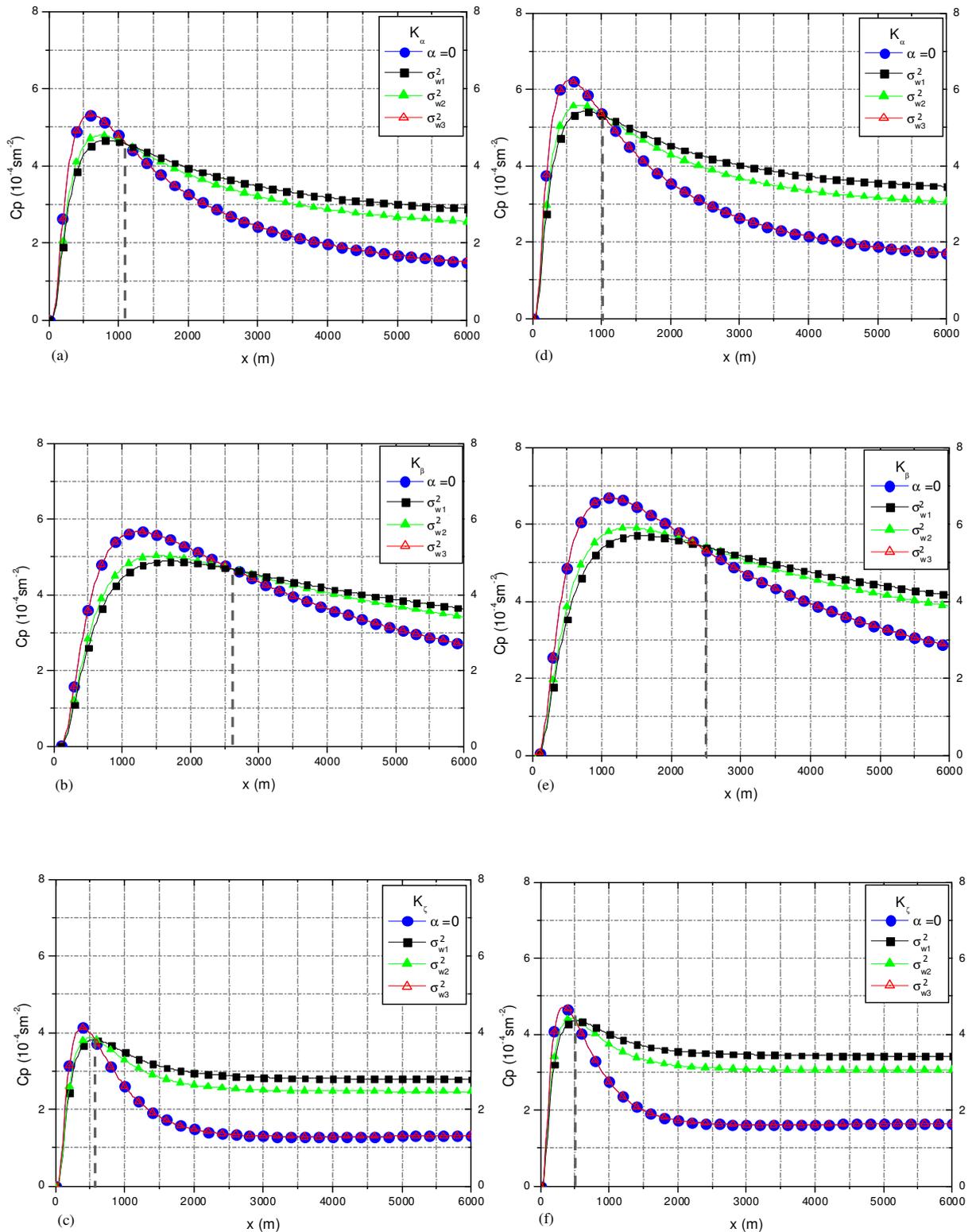


Figura 11: Gráficos da concentração em função da distância da fonte para os três distintos coeficientes de difusão (K_α , K_β e K_ζ). Na 1ª coluna, para os gráficos (a), (b) e (c) utiliza-se vento com perfil logarítmico, já na 2ª, para os gráficos (d), (e) e (f), vento que segue a lei de potência. Experimento 8 de Copenhagen.

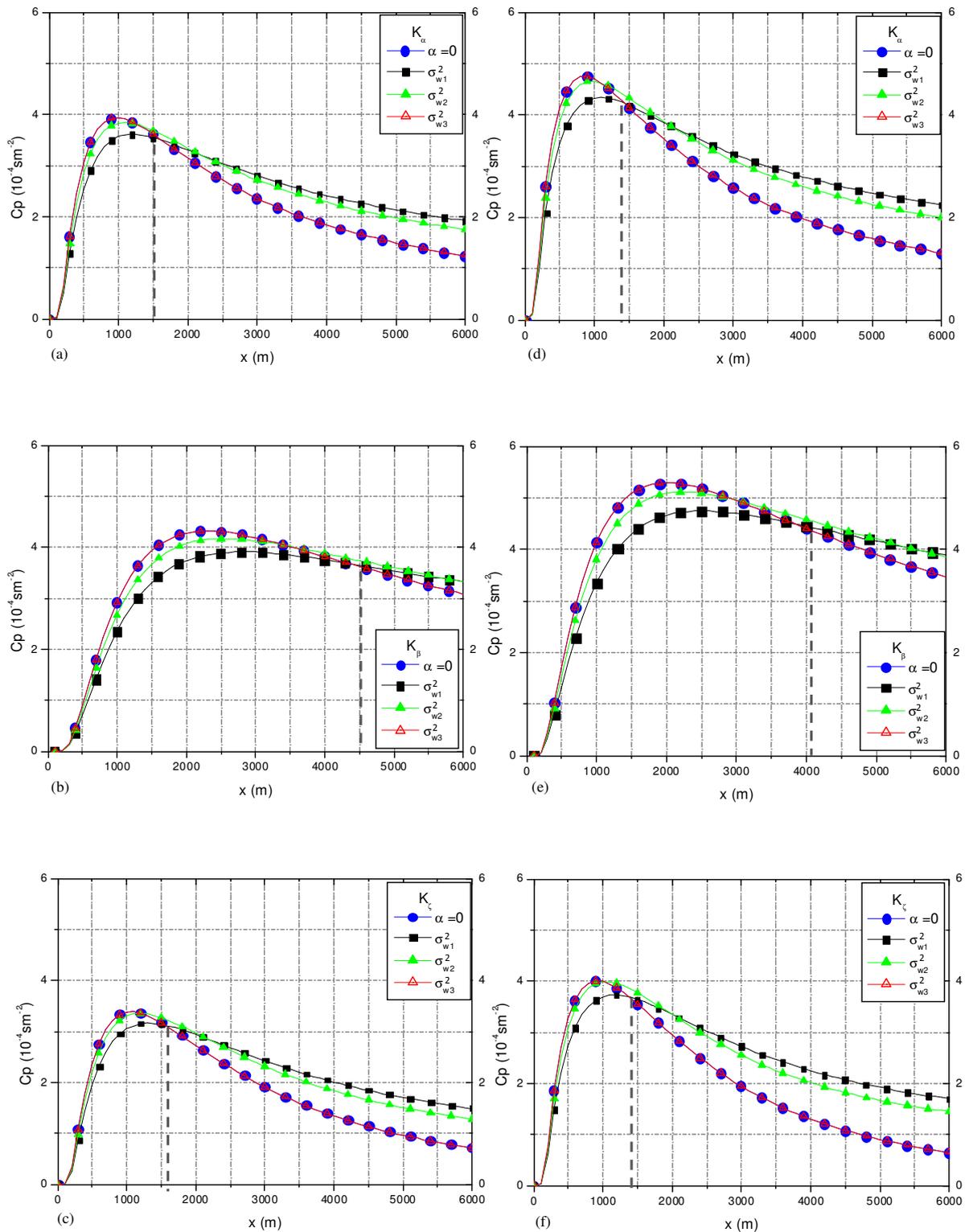


Figura 12: Gráficos da concentração em função da distância da fonte para os três distintos coeficientes de difusão (K_α , K_β e K_ζ). Na 1ª coluna, para os gráficos (a), (b) e (c) utiliza-se vento com perfil logarítmico, já na 2ª, para os gráficos (d), (e) e (f), vento que segue a lei de potência. Experimento 9 de Copenhagen.

7 CONCLUSÕES

Neste trabalho obteve-se uma solução semianalítica para a equação de advecção-difusão bidimensional estacionária com fechamento não Fickiano que determina a concentração de poluentes atmosféricos liberados por fontes contínuas num escoamento do tipo contragradiente.

A resolução desta equação foi obtida através do método ADMM, onde considerou-se a CLC como um sistema multicamadas e em cada subcamada os parâmetros relativos a turbulência assumiram um valor médio constante. Desta forma, trabalhou-se com a resolução analítica de EDPs e EDOs e com a aplicação da técnica da Transformada de Laplace. Por fim, a Transformada Inversa de Laplace foi encontrada numericamente utilizando-se o algoritmo de *Talbot*, por este ser um método robusto e eficiente para inversão (ABATE; VALKÓ, 2004).

A consequência de trabalhar-se com um termo de contragradiente que considera o caráter não local no fechamento da turbulência provocou o aparecimento de um termo adicional na equação de advecção-difusão estudada. Porém, é com satisfação que pode-se afirmar que seu acréscimo não gerou grandes dificuldades na aplicação do método ADMM para resolver a equação de advecção-difusão que modela a dispersão de poluentes.

Além do mais, a inclusão do termo de contragradiente permitiu levar em conta as características da física da turbulência não apenas no coeficiente de difusão, mas também em um termo pertencente a própria equação diferencial do modelo, fazendo com que a dispersão ocorra num escoamento do tipo contragradiente tornando a modelagem da estrutura da turbulência na CLC mais completa.

Para avaliar a execução do modelo bidimensional (que considera a atmosfera sob condições instáveis) na estimativa de concentrações, fez-se a comparação dos resultados preditos pelo modelo com os observados através de dados experimentais.

De modo geral, pode-se garantir, que o modelo com as diferentes parametrizações sugeridas e utilizadas nesta dissertação, que compreendem a física da turbulência não homogênea e que abrangem o fechamento não Fickiano da turbulência, simulou satisfatoriamente as concentrações observadas, produzindo conformidade entre as

concentrações medidas e as concentrações geradas, na maioria dos testes realizados.

Pôde-se observar que o melhor desempenho é o do modelo que leva em conta o termo adicional do contragradiente quando comparado com os resultados do modelo onde desconsiderou-se este termo. Principalmente tratando-se do modelo com o termo do contragradiente calculado com $\sigma_{w_1}^2$ (equação (72)), com a parametrização para o coeficiente de difusão K_α sugerida por Degrazia et al. em 2001 (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001) (equação (67)) e o perfil de vento obedecendo uma lei logarítmica (equação (75)).

Tal afirmativa é comprovada pelos índices estatísticos presentes na linha 1 da Tabela 3, onde é possível notar o fator de dois ($Fa2$) igual a um aliado a uma forte correlação (Cor) e baixos valores para os indicadores $Nmse$, Fb e Fs , em relação à aplicação de todas as demais parametrizações para os coeficientes de difusão, para os perfis de vento e para σ_w^2 no termo do contragradiente, ou seja, em relação a todos testes que foram realizados; seja entre os modelos com fechamento local e não local, seja entre as variadas expressões para σ_w^2 no termo do contragradiente para o modelo com efeito não local.

Pode-se ressaltar que o método empregado não demonstrou maiores dificuldades de implementação e apresentou eficácia, visto que reproduziu adequadamente a dispersão de poluentes na CLC, descrevendo resultados coerentes com os disponíveis na literatura.

Os objetivos foram alcançados pois foi possível ampliar a aplicabilidade do método utilizado e afirmar que a abordagem inédita do termo de contragradiente proposto por Cuijpers e Holtslag (CUIJPERS; HOLTSLAG, 1998), para o caso bidimensional ao estimar a concentração de poluentes, melhora a modelagem.

Como resultado final, foi obtido um modelo capaz de simular a dispersão de poluentes na atmosfera que considera a estrutura complexa da turbulência de forma mais realista, uma vez que a inclusão do termo de contragradiente permitiu acrescentar informações sobre a física da CLC na modelagem proposta. Sendo assim, pode-se afirmar que a solução encontrada no presente trabalho é uma ferramenta indispensável no cálculo da concentração de poluentes da atmosfera.

Acredita-se que o grande impacto deste trabalho seja a contribuição para o desenvolvimento desta linha de pesquisa que busca compreender os processos envolvidos na dispersão de poluentes na atmosfera. Como trabalhos futuros, sugere-se uma continuação do estudo realizado nesta dissertação, considerando o caso bidimensional transiente utilizando a metodologia aqui apresentada mais a Transformada de Laplace no tempo. Além disso, pode-se confrontar o modelo desenvolvido no presente trabalho com outros experimentos (por exemplo, o experimento de tanque).

Ainda, pode-se pensar em desenvolver um modelo tridimensional para simular a dispersão de poluentes levando em conta o fechamento não local da turbulência con-

forme realizado neste estudo, ou seja, considerando uma abordagem diferente da forma usual para o termo de contragradiente.

REFERÊNCIAS

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

ADJUTO, G. OMS 7 milhões de mortes em 2012 foram associadas à poluição. **Agência Brasil**, 2014.

AHRENS, C. D. **Meteorology Today: An Introduction to Weather, Climate, and the Environment**. [S.l.]: 9th edition. Brooks/Cole, Cengage Learning, 2009.

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, Organized by: Moreira, D. M. and Carvalho, J. C. and Vilhena, M. T., 2005.

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

BARAD, M. Project Prairie Grass, A Field Program In Diffusion. **Geophysical Research**, v.I (59), p.299, 1958.

BARAD, M. Project Prairie Grass, A Field Program In Diffusion. **Geophysical Research**, v.II (59), p.218, 1958.

BERKOWICZ, R. R.; OLESEN, H. R.; TORP, U. **The danish gaussian air pollution model (oml)**: Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. [S.l.]: Air Pollution modeling and its application. Edited by C. De Wisseleare, F.A. Schiermeier and N.V. Gillani, Plenum Publishing Corporation, 1986.

BULIGON, L.; SZINVELSKI, C.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; DEGRAZIA, G. Solução da Equação de Difusão Unidimensional Transiente para o estudo da Dispersão de Poluente na Camada Limite Planetária. **In XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2004.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Environmental Fluid Mechanics**, v.7, p.43–54, 2007.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Solução analítica da equação de advecção-difusão considerando fechamento não-local da turbulência e condições de vento fraco. **Revista Ciência e Natura**, v.1, p.27–30, 2007.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; R.S., Q.; BODMANN, B. **A closed form solution for pollutant dispersion in atmosphere considering nonlocal closure of the turbulent diffusion**. [S.l.]: Air Pollution XX, Editors: J.W.S. Longhurst and C.A. Brebbia, Published by: WIT Press, 2012. v.1, p.59–69.

CARVALHO, J. C. **Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva**. 1996. Dissertação de mestrado em meteorologia — Universidade de São Paulo, São Paulo.

CAUGHEY, S. J.; PALMER, S. G. Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.105, p.811–827, 1979.

CHAMPAGNE, F. H.; FRIEHE, C. A.; LARVE, J. C.; WYNGAARD, J. Flux measurements, flux estimation techniques, and fine scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land. **Journal Atmospheric Society**, v.34, p.515–520, 1977.

COSTA, C. P. da. **Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**. 2004. Dissertação de mestrado — Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada Ambiental, UFRGS.

COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Solução da equação de difusão-advecção com o termo de contra-gradiente no fechamento da turbulência para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. **Ciência e Natura**, p.111–114, 2003.

COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na camada limite convectiva. **In XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia, Fortaleza**, p.1–19, 2004.

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, Flórida: CRC Press, 1993.

CUIJPERS, J.; HOLTSLAG, A. Impact of skewness and nonlocal effects on scalar and boundary fluxes in convective boundary layers. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.55, p.151, 1998.

DALY, A.; ZANNETTI, P. Air Pollution Modeling - An Overview. In: **Ambient air pollution. The Arab School for Science and Technology (ASST) and The EnviroComp Institute**, 2007.

DEARDORFF, J. The countergradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.23, p.503–506, 1966.

DEARDORFF, J. Parameterization of the Planetary Boundary layer for Use in General Circulation Models. **Monthly Weather Review**, v.100, p.93–106, 1972.

DEARDORFF, J. Theoretical expression for the counter-gradient vertical heat flux. **Journal Geophys. Res.**, v.77, p.5900–5904, 1972.

DEARDORFF, J. W.; WILLIS, G. E. A parameterization of diffusion into the mixed layer. **Journal of Applied Meteorology**, v.14, p.1451–1458, 1975.

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.; 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.

DORAN, J. C.; HORST, T. W. An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements. **Atmospheric Environment**, v.19, p.939–951, 1985.

FAJERSZTAJN, L.; VERAS, M.; BARROZO, L. V.; SALDIVA, P. Air pollution: a potentially modifiable risk factor for lung cancer. **Nature Reviews Cancer**, v.13, p.674–678, 2013.

FERREIRA, M. Dados preliminares apontam poluição alta em Pelotas. **Diário Popular**, 2013.

GRYNING, S. The Copenhagen Tracer Experiments: Reporting of Measurements. **Riso National Laboratory**, p.10, 2002.

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 (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 (1), p.79–89, 1987.

HAMBA, F. A modified K model for chemically reactive species in the planetary boundary layer. **Journal Geophys. Res.**, v.98(3), p.5173–5182, 1993.

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 jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1385–1395, 1989.

HOLSTLAG, A.; BOVILLE, B. Local versus nonlocal boundary layer diffusion in a global climate model. **Journal Climate**, v.6, p.1825–1842, 1993.

HOLSTLAG, A.; MOENG, C. Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.48, p.1690–1698, 1991.

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

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

LENSCHOW, D. H. Airplane measurement of planetary boundary layer structure. **Journal Appl. Met.**, v.9, p.874–884, 1970.

LUHAR, A. K.; BRITTER, R. E. A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Atmospheric Environment (1967)**, v.23, p.1911–1924, 1989.

LUMLEY, J. Modeling turbulent flows of passive scalar quantities in inhomogeneous flows. **Phys. Fluids**, v.18, p.619–621, 1975.

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.

MILHOT, J.; BENOIT, R. A finite-element model of the atmospheric boundary layer suitable for use with numerical weather prediction models. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.39, p.2249–2266, 1982.

MOENG, C. H.; WYNGAARD, J. C. Spectral analysis of large-eddy simulations of the convective boundary layer. **Journal Atmospheric Sciences**, v.45, p.3573–3587, 1989.

MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M. Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground. **Tr. Akad. Nauk, SSSR, Geofiz. Inst.**, v.24, p.1963–1987, 1954.

MOREIRA, D. M.; COSTA, C.; VILHENA, M. T.; CARVALHO, J.; DEGRAZIA, G.; GOU-LART, A. Simulation of the dispersion of pollutants considering nonlocal effects in the solution of the advection-diffusion equation. **27th NATO/CCMS - International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and its Application**, p.325–326, 2004b.

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, 2004a.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; COSTA, C. Comparison between analytical models to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **International Journal of Environment and Waste Management**, v.6, p.327 – 344, 2010.

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.

MUNSON, B. R.; YOUNG, D.; OKIISHI, T. **Fundamentos da mecânica dos fluidos**. São Paulo: Edgard Blucher, 2004.

NIELSEN, O. Air pollution and lung cancer incidence in 17 European cohorts: prospective analyses from the European Study of Cohorts for Air Pollution Effects (ESCAPE). **The Lancet Oncology**, v.14, p.813–822, 2013.

NIEUWSTADT, F. T. M.; VAN ULDEN, A. 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.

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

PANOFSKY, H. A.; DUTTON, J. A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1988.

PAULSEN, C. A. The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer. **Journal of Applied Meteorology**, v.9, p.857–861, 1975.

ROBSON, R.; MAYOCCHI, C. A simple model of countergradient flow. **Physics of Fluids**, v.6(6), p.1952–1954, 1994.

ROODE, S. D.; JONKER, H.; DUYNKERKE, P.; STEVENS, B. Countergradient fluxes of conserved variables in the clear convective and stratocumulus-topped boundary layer: the role of the entrainment flux. **Boundary Layer Meteorology**, v.112, p.179–196, 2004.

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

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric chemistry and physics - From Air Pollution to Climate Change**. New York: John Wiley & Sons, 1998.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K. A mathematical model for the atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmospheric Environment**, v.30 (7), p.1137–1145, 1996.

SHARAN, M.; YADAV, A. K.; MODANI, M. Simulation of short-range diffusion experiment in low wind convective conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.1901–1906, 2002.

SIEBESMA, A. P.; SOARES, P. M. M.; TEIXEIRA, J. A Combined Eddy-Diffusivity Mass-Flux Approach for the Convective Boundary Layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.64, p.1230–1248, 2007.

SORBJAN, Z. Structure of the atmospheric boundary layer. **Prentice Hall, New Jersey**, p.113, 317, 1989.

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

TELFORD, J. W.; WARNER, J. Fluxes of heat and vapor in the lower atmosphere derived from aircraft observations. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.21, p.539–548, 1964.

THERRY, G.; LACARRÉRE, P. Improving the eddy kinetic energy model for planetary boundary layer description. **Bound. Layer Meteor.**, v.25, p.63–88, 1983.

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

VALKÓ, P.; ABATE, J. Numerical inversion of 2-D Laplace transforms applied to fractional diffusion equations. **Journal Applied Numerical Mathematics**, v.53, p.73–88, 2005.

VAN DOP, H.; VERVER, G. Countergradient transport revisited. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.58, p.2240–2247, 2001.

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

VILHENA, M. T.; COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. A semi-analytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Atmospheric Research**, v.1, p.63–69, 2008.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. A laboratory model of the unstable planetary boundary layer. **Journal Atmospheric Society**, v.31, p.1297–1307, 1974.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer. **Quarterly Journal of The Royal Meteorological Society**, v.102, p.427–445, 1976.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. A laboratory study of dispersion from elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1305–1311, 1978.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer. **Atmospheric Environment**, v.15, p.109–117, 1981.

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

WYNGAARD, J.; MOENG, C. Large-eddy simulation in geophysical turbulence parametrization. **Preprints, Workshop on Large-Eddy Simulation: Where do we stand? St. Petersburg, FL.**, 1990.

WYNGAARD, J.; WEIL, J. Transport asymmetry in skewed turbulence. **Physics of Fluids**, v.A3, p.155–162, 1991.