

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



Dissertação

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes considerando o fechamento não local da turbulência**

**Viliam Cardoso da Silveira**

Pelotas, 2022

**Viliam Cardoso da Silveira**

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes considerando o fechamento não local da turbulência**

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

Orientador: Prof. Dr. Guilherme Jahnecke Weymar  
Coorientador: Prof. Dra. Daniela Buske

Pelotas, 2022

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas  
Catalogação na Publicação

S587s Silveira, Viliam Cardoso da

Simulação tridimensional da dispersão de poluentes considerando o fechamento não local da turbulência / Viliam Cardoso da Silveira ; Guilherme Jahnecke Weymar, orientador ; Daniela Buske, coorientadora. — Pelotas, 2022.  
67 f.

Dissertação (Mestrado) — Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2022.

1. Equação de advecção-difusão. 2. Técnica GILTT. 3. Fechamento não local. 4. Dispersão de poluentes.. I. Weymar, Guilherme Jahnecke, orient. II. Buske, Daniela, coorient. III. Título.

CDD : 515.723

**SIMULAÇÃO TRIDIMENSIONAL DA DISPERSÃO DE POLUENTES  
CONSIDERANDO O FECHAMENTO NÃO LOCAL DA TURBULÊNCIA**

por

**Viliam Cardoso da Silveira**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, PPGMMat, do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

**Mestre em Modelagem Matemática**

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Guilherme Jahnecke Weymar - Orientador (UFPel)

Profa. Dra. Daniela Buske - (UFPel)

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho (UFPel)

Prof. Dr. Glênio Aguiar Gonçalves (UFPel)

Prof. Dr. Antônio Gledson de Oliveira Goulart (FURG)

Prof. Dr. Davidson Martins Moreira (SENAI CIMATEC)

Pelotas, 15 de dezembro de 2022

## RESUMO

CARDOSO DA SILVEIRA, Viliam. **Simulação tridimensional da dispersão de poluentes considerando o fechamento não local da turbulência**. 2022. 67 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2022.

A hipótese de transporte por gradiente é uma das maneiras mais utilizadas para resolver o problema de fechamento da equação de advecção-difusão, que assume que o fluxo turbulento da concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. Entretanto, a hipótese de transporte por gradiente não é válida na parte superior da camada limite convectiva, pois nessa região se tem a presença de um fluxo contragradiente. Considerando o fechamento não local da turbulência, pode ser levada em conta a assimetria no processo da dispersão de poluentes na atmosfera. Com isso, pode ser utilizada uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio fazendo com que apareça um termo adicional na equação que é associado ao termo de contragradiente. O objetivo desse trabalho é avaliar a dispersão de poluentes na atmosfera, considerando a equação de advecção-difusão transiente tridimensional, incluindo a difusão longitudinal e o fechamento não local da turbulência. A solução do problema proposto é encontrada utilizando técnicas de transformadas integrais. Para a obtenção dos resultados e avaliação do modelo foram utilizados dados dos experimentos difusivos IIT-Delhi e Copenhagen. O modelo simulou de forma satisfatória a concentração de poluentes quando comparado aos dados experimentais e a resultados da literatura.

**Palavras-chave:** Equação de advecção-difusão, técnica GILTT, fechamento não local, dispersão de poluentes.

## ABSTRACT

CARDOSO DA SILVEIRA, Viliam. **Three-dimensional simulation of the pollutant dispersion considering non-local turbulence closure**. 2022. 67 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2022.

The gradient transport hypothesis is one of the most used ways to solve the advection-diffusion equation closure problem, which assumes that the concentration turbulent flow is proportional to the mean concentration gradient magnitude. However, the gradient transport hypothesis is not valid in the top of the convective boundary layer, because in this region there is the presence of a countergradient flow. Considering the non-local turbulence closure, can be taken into account the asymmetry in the pollutants dispersion process in the atmosphere. Thus, a generic equation for turbulent diffusion can be used, considering that the flux plus its derivative are proportional to the average gradient, causing an additional term to appear in the equation that is associated with the countergradient term. The aim of this work is to evaluate the pollutants dispersion in the atmosphere, considering the transient three-dimensional advection-diffusion equation, the longitudinal diffusion and non-local turbulence closure term. The proposed problem solution is found using integral transform techniques. To obtain the results and evaluate the model, data from IIT-Delhi and Copenhagen diffusion experiments were used. The model satisfactorily simulated the pollutants concentration when compared to experimental data and literature results.

**Keywords:** advection-diffusion equation, GILTT technique, non-local closure, pollutants dispersion.

## LISTA DE FIGURAS

3.1	Esquema ilustrativo do efeito local (à esquerda) e efeito não-local (à direita) na dispersão do poluente. Fonte: página 226 de (STULL, 1988a).	22
5.1	Convergência numérica da concentração de poluentes utilizando a equação (3.25), experimento 12 de IIT-Delhi, coeficientes de difusão propostos por Degrazia e perfil de vento potência.	45
5.2	Convergência numérica da concentração de poluentes em função do número de autovalores $N$ , para as distâncias da fonte de $x_m = 50 m$ e $x_m = 100 m$ para o experimento 12 de IIT-Delhi	46
5.3	Convergência numérica da concentração de poluentes ao longo do tempo para o experimento 12 de IIT-Delhi e distância da fonte de $x_m = 50 m$ e $x_m = 100 m$ .	46
5.4	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento IIT Delhi para $S_k = 0, 0$ e $S_k = 0, 6$ e $v = 0$ .	48
5.5	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento IIT-Delhi para $S_k = 0, 0$ e $S_k = 0, 6$ e $v \neq 0$ .	49
5.6	Convergência numérica da concentração de poluentes utilizando a equação (3.25), experimento 1 de Copenhagen, coeficientes de difusão propostos por Degrazia e perfil de vento potência.	50
5.7	Convergência numérica da concentração de poluentes em função do número de autovalores $N$ , para as distâncias da fonte de $x_m = 1900 m$ e $x_m = 3700 m$ para o experimento 1 de Copenhagen.	51
5.8	Convergência numérica da concentração de poluentes ao longo do tempo para o experimento 1 de Copenhagen e distância da fonte de $x_m = 1900 m$ e $x_m = 3700 m$ .	51
5.9	Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento de Copenhagen para $S_k = 0, 0$ e $S_k = 0, 6$ .	53

## LISTA DE TABELAS

4.1	Parâmetros meteorológicos observados no experimento IIT-Delhi. . . . .	41
4.2	Parâmetros meteorológicos observados no experimento de Copenhagen. . .	42
5.1	Comportamento da concentração de poluente para o experimento 12 do experimento IIT-Delhi, utilizando a equação (3.25), coeficientes de difusão propostos por Degrazia e o perfil de vento potência. . . . .	45
5.2	Concentrações observadas e previstas para o experimento IIT-Delhi (ppt). .	47
5.3	Desempenho estatístico do modelo para o experimento IIT-Delhi, não considerando ( $S_k = 0$ ) e considerando ( $S_k = 0,6$ ) o termo de assimetria. . . .	47
5.4	Comportamento da concentração de poluente para o experimento 1 do experimento de Copenhagen, utilizando a equação (3.25), coeficientes de difusão propostos por Degrazia e o perfil de vento potência. . . . .	50
5.5	Concentrações observadas e previstas para o experimento de Copenhagen ( $*10^{-7} sm^{-3}$ ). . . . .	52
5.6	Desempenho estatístico do modelo para o experimento de Copenhagen, não considerando ( $S_k = 0$ ) e considerando ( $S_k = 0,6$ ) o termo de assimetria. .	52



## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

### Abreviaturas:

<i>CLA</i>	Camada Limite Atmosférica
<i>CLP</i>	Camada Limite Planetária
<i>CLC</i>	Camada Limite Convectiva
<i>ADMM</i>	<i>Advection Diffusion Multilayer Model</i>
<i>GIADMT</i>	<i>Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique</i>
<i>GILTT</i>	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
<i>3D-GILTT</i>	<i>Three-Dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
<i>GILTTG</i>	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique with a Gaussian in y-direction</i>

### Parâmetros estatísticos:

<i>NMSE</i>	Erro quadrático médio normalizado
<i>COR</i>	Coefficiente de correlação
<i>FAT2</i>	Fator de dois
<i>FB</i>	Fração de inclinação
<i>FS</i>	Desvio fracional padrão
$\sigma_o$	Desvio padrão observado
$\sigma_p$	Desvio padrão predito

### Modelo matemático:

$\bar{c}_n$	Variável dependente da expansão em série do problema tridimensional
$\bar{c}_{n,i}$	Variável dependente da expansão em série do problema bidimensional
$B, R, S$	Matrizes de coeficientes do problema transformado de segunda ordem
$D$	Matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem
$F$	Matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $F = B^{-1}R$
$G$	Matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $G = B^{-1}S$

$G(x)$	Matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem após inversão
$H$	Matriz bloco do problema transformado de primeira ordem
$I$	Matriz identidade
$X$	Matriz diagonal dos autovetores do problema transformado de primeira ordem
$X^{-1}$	Matriz diagonal inversa dos autovetores do problema transformado de primeira ordem
$Y(x)$	Vetor de incógnitas do problema transformado de segunda ordem
$Z(x)$	Vetor de incógnitas do problema transformado de primeira ordem
$\xi$	Vetor representado por $X^{-1}Z(0)$
$\zeta_n, \zeta_i$	Autofunções do problema de Sturm-Liouville
$\mathfrak{L}^{-1}$	Transformada inversa de Laplace
$\lambda_n, \gamma_i$	Autovalores do problema de Sturm-Liouville

**Demais parâmetros:**

$A_k, P_k$	Pesos e pontos da Quadratura de Gauss
$c_o$	Concentrações observadas experimentalmente
$\bar{c}$	Concentração média de um contaminante passivo
$c_p$	Concentrações previstas pelo modelo
$N$	Número de autovalores no somatório da fórmula da inversa da GILTT
$x$	Distância longitudinal da fonte ( $m$ )
$y$	Distância lateral da fonte ( $m$ )
$X^*$	Distância adimensional da fonte
$t$	Variável temporal ( $s$ )
$z$	Altura acima da superfície do solo ( $m$ )
$z_r$	Altura de referência do vento ( $m$ )
$L_x$	Distância para longe da fonte no eixo $x$ ( $m^2/s$ )
$L_y$	Distância para longe da fonte no eixo $y$ ( $m^2/s$ )
$\overline{u'c'}$	Fluxo turbulento de contaminante na direção longitudinal ( $g/sm^2$ )
$\overline{v'c'}$	Fluxo turbulento de contaminante na direção lateral ( $g/sm^2$ )
$\overline{w'c'}$	Fluxo turbulento de contaminante na direção vertical ( $g/sm^2$ )
$U$	Velocidade instantânea do vento na direção $x$ ( $m/s$ )
$V$	Velocidade instantânea do vento na direção $y$ ( $m/s$ )
$W$	Velocidade instantânea do vento na direção $z$ ( $m/s$ )
$\bar{u}$	Componente zonal do vento médio ( $m/s$ )

$\bar{v}$	Componente meridional do vento médio ( $m/s$ )
$\bar{w}$	Componente vertical do vento médio ( $m/s$ )
$K_\alpha$	Coeficiente de difusão turbulenta onde $\alpha$ indica as direções $x$ , $y$ e $z$ ( $m^2/s$ )
$K_x$	Coeficiente de difusão na direção $x$ ( $m^2/s$ )
$K_y$	Coeficiente de difusão na direção $y$ ( $m^2/s$ )
$K_z$	Coeficiente de difusão na direção $z$ ( $m^2/s$ )
$Q$	Intensidade da fonte ( $g/s$ )
$H_s$	Altura da fonte ( $m$ )
$z_i$	Altura da camada limite convectiva ( $m$ )
$\delta$	Função delta de Dirac
$L$	Comprimento de Monin-Obukhov ( $m$ )
$u_*$	Velocidade de fricção ( $m/s$ )
$w_*$	Escala de velocidade convectiva ( $m/s$ )
$f_c$	Parâmetro de Coriolis: $f_c = 1,46 \times 10^{-4} (s^{-1})$
$z_0$	Comprimento de rugosidade ( $m$ )
$(f_m)_i$	Frequência do pico espectral ( $s$ )
$(f_m)_{n,i}$	Frequência do pico espectral na estratificação neutra ( $s$ )
$S_k$	assimetria ( <i>skewness</i> )
$\tau$	tempo de relaxação ( $s$ )
$\beta$	termos adicionais no contragradiente
$\gamma$	representa o termo de contragradiente
$\sigma_w$	desvio padrão da velocidade turbulenta vertical
$k$	Constante de von-Kármán
$T_{lw}$	escala de tempo lagrangeana ( $s$ )

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>12</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>14</b>
2.1	Soluções da equação de advecção-difusão por transformadas integrais	14
2.2	Soluções da equação de advecção-difusão por transformadas integrais considerando o termo de contragradiente	16
<b>3</b>	<b>SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO</b>	<b>19</b>
3.1	O problema de fechamento da turbulência	20
3.2	A equação de difusão tridimensional com fechamento não Fickiano	23
3.3	Solução da equação de advecção-difusão tridimensional	26
3.4	Inversão numérica da transformada de Laplace: <i>Quadratura Gaussiana</i>	38
<b>4</b>	<b>VALIDAÇÃO DO MODELO</b>	<b>39</b>
4.1	Parametrizações da turbulência	39
4.2	Perfil do vento	40
4.3	Dados experimentais	40
4.3.1	Experimento IIT-Delhi (Índia)	41
4.3.2	Experimento de Copenhagen (Dinamarca)	41
4.4	Índices estatísticos	42
4.5	<i>Updrafts e downdrafts</i>	43
<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b>	<b>44</b>
5.1	Resultados considerando o experimento de IIT-Delhi	44
5.2	Resultados considerando o experimento de Copenhagen	49
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>54</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>55</b>
	<b>ANEXO A CONDIÇÃO DE FONTE</b>	<b>65</b>

# 1 INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica é um fenômeno recorrente no nosso dia a dia, seja ela ocasionada por efeitos naturais (por exemplo, emissão de gás metano) ou antropogênicos (por exemplo, pela queima de combustíveis fósseis). Os poluentes emitidos em um determinado local podem causar diversos problemas ao meio ambiente e atingir regiões distantes de onde foram emitidos, por isso a importância de estudar o comportamento dos poluentes nas mais diversas situações que podem ocorrer na atmosfera. A atividade antropogênica traz inúmeros problemas com a emissão de gases, gerando um desequilíbrio ecológico. Os gases e poeiras esquecidos na atmosfera provocam problemas nas proximidades das fontes, reduzindo a qualidade do ar em regiões urbanas, causam chuva ácida a médias e longas distâncias e buracos na camada de ozônio em escala global.

Os movimentos atmosféricos são classificados de acordo com suas dimensões horizontais em três amplas categorias: macroescala (escala horizontal da ordem de 1000 km), mesoescala (escala horizontal da ordem de 100 km) e microescala (escala horizontal da ordem de 10 km ou menos) (ARYA, 1999).

Existem dois modelos matemáticos para simular numericamente a concentração de poluentes na atmosfera: Lagrangiano e Euleriano. O modelo Lagrangiano segue a velocidade instantânea do fluido, e o Euleriano é fixo em relação à terra (ANFOSSI, 2005). O esquema principal dos modelos Eulerianos de dispersão é a solução da equação de advecção-difusão, que é expressa através da parametrização dos fluxos turbulentos. Sob condições específicas consegue-se expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão de pluma.

Encontram-se vários trabalhos disponíveis na literatura que focam no estudo da dinâmica da camada limite planetária (CLP), em que são considerados diversos modelos para fechamento das equações dos fluxos turbulentos, por exemplo: modelos de primeira ordem ou teoria K, segunda ordem ou superior.

A hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) é uma das maneiras mais utilizadas para resolver o problema de fechamento da equação de advecção-difusão que assume que o fluxo turbulento da concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. Entretanto, a hipótese de transporte por gradiente não é válida na parte superior da

camada limite convectiva (CLC), pois nessa região se tem a presença de um fluxo contragradiente (DEARDOFF; WILLIS, 1975). Observou-se que na parte superior da CLC o fluxo de temperatura potencial é ao contrário do gradiente de perfil de temperatura potencial do meio (DEARDOFF, 1966). O gradiente de temperatura potencial do meio e o fluxo trocam de sinal em diferentes níveis, que afeta o fechamento da turbulência de primeira ordem, pois não leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência da CLC.

Considerando o fechamento não local da turbulência, pode ser levada em conta a assimetria no processo da dispersão de poluentes na atmosfera. Com isso, pode ser utilizada uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio fazendo com que apareça um termo adicional na equação que é associado ao termo de contragradiente (WYNGAARD; WEIL, 1991), (VAN DOP; VERVER, 2001).

Diversos estudos já foram desenvolvidos para estudar a dispersão de poluentes na atmosfera considerando a equação de advecção-difusão em diversas condições de estabilidade atmosférica e utilizando a técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). A inovação desse trabalho é considerar a equação da difusão na sua forma mais completa, considerando um modelo tridimensional transiente, com difusão longitudinal e o termo de fechamento não local da turbulência.

Na sequência será apresentada uma breve revisão bibliográfica, dando ênfase a trabalhos que abordem o problema de fechamento não local da turbulência, no capítulo 3 será apresentada a solução da equação de advecção-difusão proposta, no capítulo 4 os dados para validação do modelo e por fim no capítulo 5 serão apresentados os resultados, e finalmente as conclusões.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Um esforço contínuo e progressivo tem sido feito ao longo dos anos para se obter soluções analíticas para a equação de advecção-difusão. A solução dessa equação, oriunda de abordagens analíticas, é fundamental para entender e descrever os fenômenos físicos envolvidos na dispersão de poluentes, visto que considera explicitamente todos os parâmetros envolvidos no problema. Assim sendo, a influência dentro dessa solução, de cada um dos parâmetros pode ser investigada (BUSKE et al., 2012b). Além disso, enquanto os modelos numéricos existentes necessitam de melhorias para aplicabilidade em situações mais realísticas, é de grande auxílio primeiramente examinar algumas possibilidades de soluções analíticas (ou semi-analíticas) para obter um sistema de soluções para teste (MOREIRA; ALBUQUERQUE, 2016).

Uma revisão sobre soluções gaussianas da equação de advecção-difusão é encontrada nos trabalhos de (FAVERO, 2020), (TADEO, 2021) e (RIBAS, 2021). Na sequência são abordadas soluções obtidas por modelos não gaussianos. Neste trabalho, são de interesse particular as soluções analíticas obtidas através da aplicação de transformadas integrais.

### 2.1 Soluções da equação de advecção-difusão por transformadas integrais

Nas últimas décadas surgiram modelos analíticos/semi-analíticos não Gaussianos e com coeficientes de difusão arbitrários. Dentre estes, destacam-se principalmente: ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Model*, Modelo de Multicamada Advectivo Difusivo), GITT (*Generalized Integral Transform Technique*, Técnica da Transformada Integral Generalizada), GIADMT (*Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique*) e o método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) e suas variações.

O método ADMM vem sendo utilizado na resolução da equação de advecção-difusão para simular a dispersão de poluentes na atmosfera desde a década de 90 (MOURA; VILHENA; DEGRAZIA, 1995), (VILHENA et al., 1998), (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001a), (FERREIRA NETO, 2003), (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2004), (MOREIRA et al., 2004), (MOREIRA; CARVALHO; TIRABASSI, 2005), (MOREIRA; FERREIRA NETO; CARVALHO, 2005), (MOREIRA et al., 2005), (MOREIRA et al., 2006), (BULIGON; MOREIRA; VILHENA,

2006) e (RUI, 2016). No método ADMM a equação de advecção-difusão é resolvida de forma semi-analítica. O método consiste na divisão da CLP em diferentes camadas ou subcamadas. A solução da equação, em cada uma das camadas, é obtida pela técnica da transformada de Laplace com inversão numérica, considerando ventos e coeficientes de difusão turbulenta constantes com a altura da camada. A divisão em subcamadas permite que um valor médio da velocidade do vento e do coeficiente de difusão turbulenta seja utilizado em cada uma delas. Dessa forma, o problema original com coeficientes variáveis passa a ter coeficientes constantes em cada camada, de acordo com a continuidade de concentração e o fluxo de contaminante nas interfaces. Esse método é amplamente utilizado na dispersão de poluentes na atmosfera. Uma revisão do método pode ser encontrada em (MOREIRA et al., 2006).

O método GITT é analítico-numérico (COTTA, 1993), (COTTA; MIKHAYLOV, 1997) derivado da transformação integral clássica (MIKHAYLOV; OZISIK, 1984) e pode ser descrito como uma transformação integral associada a uma expansão em série, usado para resolver equações diferenciais parciais. Suas principais etapas incluem a elaboração do problema auxiliar de Sturm-Liouville associado ao problema original, a determinação de uma série através da técnica de transformada integral usando como base as autofunções que constituem a solução do problema de Sturm-Liouville e a substituição dessa série no problema original. Esse procedimento resulta em uma equação diferencial ordinária, que é resolvida numericamente. A técnica GITT vem sendo utilizada na solução de diferentes classes de problemas lineares e não-lineares de difusão e advecção-difusão. Na área de dispersão de poluentes podemos citar os trabalhos (CATALDI et al., 2000), (RIBEIRO et al., 2000), (STORCH; PIMENTEL, 2003), (VELLOSO et al., 2004), (COTTA; BARROS, 2007) e (GUERRERO et al., 2012).

Através da combinação dos métodos ADMM e GITT obtém-se o método conhecido como GIADMT. Ou seja, o problema tridimensional é transformado em um problema bidimensional utilizando a técnica GITT e é então resolvido pelo método ADMM (COSTA et al., 2006), (VILHENA et al., 2008), (COSTA; TIRABASSI; VILHENA, 2010) e (COSTA et al., 2012).

O método GILTT é obtido pela aplicação da técnica GITT em problemas de poluição atmosférica de forma totalmente analítica. Seguindo o mesmo procedimento adotado no método GITT, esta técnica resulta em um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), que é resolvido analiticamente aplicando-se a transformada de Laplace (resolvida numericamente com o método GITT). A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após a diagonalização, essa matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico. Esta inversão é analítica e sem custo computacional por ser uma matriz diagonalizada. Assim, a solução analítica do problema transformado é finalmente encontrada. O método GILTT é analítico no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, a não ser o truncamento de um somatório infinito. Muitos estudos são apresentados na literatura a respeito da dispersão de poluentes utilizando o método GILTT na equação de advecção-difusão bidimensional (WORTMANN et al., 2005), (MOREIRA et al., 2006), (BUSKE et al., 2008), (BUSKE et al., 2007a), (BUSKE et al., 2007b), (TIRABASSI



et al., 2008), (TIRABASSI et al., 2009), (MOREIRA; VILHENA; BUSKE, 2009), (MOREIRA et al., 2009) e (BUSKE et al., 2010). Uma revisão do método GILTT para problemas de dispersão atmosférica unidimensionais e bidimensionais da equação advecção-difusão pode ser encontrada em (MOREIRA et al., 2009).

Mais recentemente uma solução da equação de advecção-difusão combinando o método de separação de variáveis e o método GILTT foi obtida pelos autores (WEYMAR et al., 2018), (GONCALVES et al., 2018), (FAVERO et al., 2020), (BUSKE et al., 2020), (FAVERO, 2020) e (RIBAS, 2021). Através dessa metodologia é encontrada uma solução analítica sem a necessidade de inversão numérica no tempo (os problemas transientes que utilizam somente a GILTT possuem uma inversão numérica no tempo). Um diferencial desta solução é a inserção de variáveis estocásticas ao modelo Euleriano.

O método GILTT pode ser usado para a solução de problemas em três dimensões utilizando os métodos conhecidos como GILTTG ou 3D-GILTT. Pelo método GILTTG o problema é resolvido com o uso do método GILTT, e de forma a se obter a solução tridimensional aproximada, assume-se que a pluma de poluentes tem distribuição gaussiana na direção  $y$  (BUSKE et al., 2007a), (BUSKE et al., 2008), (MOREIRA et al., 2009) e (BUSKE et al., 2010). O método 3D-GILTT surgiu em 2009 e resolve a equação tridimensional de advecção-difusão de forma totalmente analítica, ou seja, a técnica GITT é aplicada na variável  $y$  de forma a se obter um problema bidimensional cuja solução é conhecida e obtida pelo método GILTT bidimensional (BUSKE et al., 2009), (BUSKE; VILHENA; MOREIRA, 2009), (BUSKE et al., 2011), (BUSKE et al., 2011), (BUSKE et al., 2012b), (VILHENA et al., 2012) e (SILVEIRA, 2017).

## **2.2 Soluções da equação de advecção-difusão por transformadas integrais considerando o termo de contragradiente**

Para motivar a realização deste trabalho, é apresentada na sequência uma revisão bibliográfica sobre as soluções analíticas da equação de advecção-difusão que utilizam o fechamento não local da turbulência.

Em 2003 foi apresentado um modelo bidimensional, onde foi considerada a equação de advecção-difusão com duas dimensões em estado estacionário, utilizando fechamento não Fickiano da turbulência e o método ADMM para a resolução desta equação (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2003). Um ano depois (MOREIRA et al., 2004) deram seguimento a esse trabalho, no qual uma comparação com o experimento de Copenhagen foi realizada. O problema foi retomado no trabalho de (VENZKE, 2015).

No ano de 2004 foi apresentada uma solução da equação de difusão unidimensional transiente para modelar a dispersão de poluentes, utilizando o método ADMM e fechamento não local na dispersão (BULIGON, 2004).

Ainda em 2004 foi realizado um estudo completo sobre a modelagem bidimensional conside-

rando efeitos do contragradiente, levando em conta o caráter não local da dispersão utilizando o método ADMM (COSTA, 2004), (COSTA; MOREIRA; VILHENA, 2004) e (MOREIRA et al., 2004). O estudo mostra que a inclusão do termo contragradiente modifica a concentração máxima que é um dos parâmetros mais importantes no contexto da qualidade do ar.

Em 2006, uma solução analítica da equação de advecção-difusão bidimensional transiente foi apresentada. O método GILTT foi utilizado para avaliar a concentração de poluentes na atmosfera, assumindo fechamento não local da difusão turbulenta, onde foram feitas comparações estatísticas com dados experimentais (BUSKE et al., 2006), (BUSKE, 2008).

Através da técnica GILTTG, (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  $y$  (GILTTG).

Uma solução analítica, em estado estacionário, tridimensional da equação de advecção-difusão, considerando o fechamento não local da turbulência, usando a técnica 3D-GILTT foi apresentada pelos autores (BUSKE et al., 2012). Este trabalho foi estendido em 2015, apresentando uma solução para o problema 3D transiente (BUSKE et al., 2015a). Nestes trabalhos foram apresentados resultados numéricos e comparações estatísticas com dados experimentais. A difusão longitudinal e a advecção em  $y$  não foram consideradas.

Uma solução da equação de advecção-difusão foi obtida pela utilização da técnica de transformada de Laplace, considerando a camada limite convectiva como um sistema de multicamadas, os parâmetros turbulentos foram derivados da teoria de difusão estatística de Taylor, combinada com a teoria de similaridade (PANTOJA, 2014). Nesse trabalho, foram apresentadas simulações para diferentes valores de assimetria, o que propiciou a obtenção da concentração de poluentes em diferentes alturas. A avaliação do desempenho do modelo foi obtida através de um experimento de tanque convectivo tradicional. Nesse experimento, o termo contragradiente influenciou a concentração de poluentes, no entanto, com as parametrizações utilizadas, o modelo não conseguiu captar de forma eficiente o comportamento da concentração em pontos mais distantes da fonte.

A equação de advecção-difusão tridimensional estacionária usando a técnica GIADMT, considerando o fechamento não-local para o fluxo turbulento, foi resolvida pelos autores (COSTA; RUI, 2017) e (COSTA; RUI; PÉREZ-FERNÁNDEZ, 2018). Os autores consideraram duas parametrizações para o termo do contragradiente e utilizaram diferentes métodos de inversão numérica para a transformada inversa de Laplace. Os resultados foram comparados com dados medidos no experimento de Copenhagen e utilizaram-se diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão turbulento vertical e o perfil do vento.

Em 2021, o problema da dispersão de poluentes na atmosfera, considerando a equação da difusão e o termo de fechamento não local da turbulência unidimensional foi avaliada utilizando a técnica GILTT (TADEO, 2021). Os resultados desse trabalho estão de acordo com a literatura e a concentração apresenta um pico no tempo inicial e depois diminui e

fica homogênea. Embora seja um modelo simplificado, o mesmo apresenta o comportamento esperado da pluma de poluentes. A solução do problema unidimensional com fechamento não local e utilizando a técnica GILTT ainda não existia na literatura.

Modelos de fechamento algébrico não local associados com ambos os termos de transporte advectivo não resolvido e reação não linear em um contexto das equações de Navier-Stokes com média de Reynolds foram apresentados em (SHENDEA; MANI, 2022). Em particular, um sistema de espécies sujeito a reações binárias e transporte por advecção e difusão são examinados expandindo a análise originalmente desenvolvida para reações binárias no contexto de dispersão de escalares de Taylor. Nesse trabalho é ampliada a forma do modelo das extensões fracamente não lineares da teoria da dispersão e o papel não local na presença de reações é estudado e capturado por expressões algébricas analíticas. Essas expressões podem ser incorporadas em uma matriz de difusividade turbulenta que captura explicitamente a influência da cinética química nos operadores de fechamento. Além do mais, foi demonstrado que a forma do modelo derivada em um contexto laminar se traduz diretamente em uma configuração análoga a turbulência isotrópica homogênea. Foi mostrado também que essas considerações melhoram a previsão de quantidades médias comparado aos resultados anteriores.

Como se pode ver, são muitos os esforços para se chegar a uma solução mais abrangente da equação de advecção-difusão. Espera-se, com o presente trabalho, contribuir nesta busca, apresentando uma solução mais abrangente para a equação de advecção-difusão utilizando o método GILTT. Cabe salientar que esta solução é a mais completa já obtida até o momento por esta metodologia.

### 3 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

A advecção e difusão atmosférica podem ser modeladas aplicando-se a equação de conservação de massa (SEINFELD; PANDIS, 1997), também conhecida como equação da continuidade. Considera-se uma espécie genérica  $C$  que se conserva na atmosfera e com isso tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad (3.1)$$

onde  $U$ ,  $V$  e  $W$  representam as componentes da velocidade instantânea do vento ( $m/s$ ) nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  respectivamente.

Na modelagem matemática de difusão e turbulência, todas as variáveis são geralmente expressadas como somas de suas médias e flutuações (ARYA, 2003):

$$U = \bar{u} + u'; \quad V = \bar{v} + v'; \quad W = \bar{w} + w'; \quad C = \bar{c} + c'. \quad (3.2)$$

Substituindo as equações (3.2) na equação (3.1) e utilizando as regras da decomposição de Reynolds (ARYA, 2003), a equação de advecção-difusão tridimensional pode ser escrita como (STULL, 1988b):

$$\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial t} + (\bar{u} + u') \frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial x} + (\bar{v} + v') \frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial y} + (\bar{w} + w') \frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial z} = 0. \quad (3.3)$$

Efetuada as derivadas e multiplicações da equação (3.3) tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial c'}{\partial x} + u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + u' \frac{\partial c'}{\partial x} + \\ + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial c'}{\partial y} + v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + v' \frac{\partial c'}{\partial y} + \\ + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w} \frac{\partial c'}{\partial z} + w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + w' \frac{\partial c'}{\partial z} = 0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Agora, aplicando a média de Reynolds, obtém-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c}'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial x} + \bar{u}' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u}' \frac{\partial \bar{c}'}{\partial x} + \\ + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial y} + \bar{v}' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v}' \frac{\partial \bar{c}'}{\partial y} + \\ + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial z} + \bar{w}' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w}' \frac{\partial \bar{c}'}{\partial z} = 0. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Sabe-se das regras de decomposição de Reynolds que:

$$\frac{\partial \bar{c}'}{\partial t} = 0; \quad \bar{u} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial x} = 0; \quad \bar{u}' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = 0; \quad \bar{v} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial y} = 0; \quad \bar{v}' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0; \quad \bar{w} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial z} = 0; \quad \bar{w}' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0. \quad (3.6)$$

Considerando as equações (3.6) na equação (3.5) tem-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = -\frac{\partial \bar{u}' \bar{c}'}{\partial x} - \frac{\partial \bar{v}' \bar{c}'}{\partial y} - \frac{\partial \bar{w}' \bar{c}'}{\partial z}, \quad (3.7)$$

onde  $\bar{c}$  ( $\bar{c} = \bar{c}(x, y, z, t)$ ) denota a concentração média de um contaminante passivo,  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$  são as componentes cartesianas do vento médio ( $m/s$ ) e  $\bar{u}' \bar{c}'$ ,  $\bar{v}' \bar{c}'$  e  $\bar{w}' \bar{c}'$  representam respectivamente o fluxo turbulento do contaminante ( $g/sm^2$ ) nas direções longitudinal, lateral e vertical.

A equação (3.7) apresenta quatro incógnitas (os fluxos turbulentos e a concentração) e por isso não pode ser resolvida diretamente levando-nos ao chamado problema de fechamento da turbulência (STULL, 1988b).

### 3.1 O problema de fechamento da turbulência

Uma das maneiras mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de difusão (3.7) é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K ou fechamento de primeira ordem) que, em analogia com a lei de Fick da difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média (SEINFELD; PANDIS, 1997) (SEINFELD; PANDIS, 1997).

A hipótese de fechamento Fickiano da turbulência nas direções  $x$  e  $y$  é dada por:

$$\bar{u}' \bar{c}' = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}, \quad (3.8)$$

$$\bar{v}' \bar{c}' = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}. \quad (3.9)$$

em que  $K_x$  e  $K_y$  são os coeficientes de difusão turbulenta ( $m^2/s$ ) nas direções  $x$  e  $y$ . No fechamento de primeira ordem, toda a informação da complexidade da turbulência está contida nesses coeficientes de difusão.

Substituindo as equações (3.8) e (3.9) na equação (3.7), obtém-se a seguinte equação de advecção-difusão (BLACKADAR, 1997):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z}. \quad (3.10)$$

A simplicidade da teoria K de difusão turbulenta conduziu ao uso difundido desta teoria como base matemática para simular a dispersão de poluentes (poluição em campo aberto, urbano, fotoquímico, etc). A teoria K funciona bem quando a difusão do material dispersado é muito maior que o tamanho dos turbilhões envolvidos no processo difusivo, ou seja, para grandes tempos de viagem (MANGIA et al., 2002). Mas o fechamento K tem seus próprios limites. Em contraste com a difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente da escala. Isto significa que a taxa de difusão de uma pluma de material geralmente depende das dimensões da pluma e da intensidade da turbulência. Conforme a pluma cresce, turbilhões maiores são incorporados no processo de expansão, de modo que uma fração progressivamente maior da energia cinética turbulenta está disponível para a expansão da pluma (ARYA, 1999).

Outro problema é que a hipótese de transporte por gradiente é inconsistente com as características da difusão turbulenta na parte superior da camada de mistura, em casos convectivos em que ocorrem fluxos de material contragradiente (DEARDOFF; WILLIS, 1975). Há algumas décadas, já se percebeu que na parte superior da CLC o fluxo de temperatura potencial é ao contrário do gradiente de perfil de temperatura potencial do meio (ERTEL, 1942), (PRIESTLY; SWINBANK, 1947), (DEARDOFF, 1966). O gradiente de temperatura potencial do meio e o fluxo trocam de sinal em diferentes níveis introduzindo uma certa região na CLC. Isto entra em contraste com o fechamento da turbulência tradicional de primeira ordem, pois ele não leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência da CLC.

Para descrever e caracterizar a difusão nesta região, (ERTEL, 1942), (DEARDOFF, 1966) e (DEARDOFF, 1972) propuseram modificar a aplicação usual do fluxo-gradiente na aproximação da teoria K da seguinte forma:

$$\overline{w'c'} = -K_z \left( \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right) \quad (3.11)$$

na qual  $\gamma$  representa o termo de contragradiente e é uma constante.

Muitos esquemas e parametrizações para o termo de contragradiente têm sido desenvolvidos, conforme pode-se verificar nos trabalhos de (WYNGAARD; BROST, 1984), (FIEDLER; MOENG, 1985), (HOLTSLAG; MOENG, 1991), (WYNGAARD; WEIL, 1991), (HOLTSLAG; BOVILLE, 1993), (HAMBA, 1993), (ROBSON; MAYOCCHI, 1994), (ZILITINKEVICH et al., 1999) e (ROODE et al., 2004). Neste trabalho utilizamos as parametrizações propostas por

(VAN DOP; VERVER, 2001) que são baseadas no trabalho de (WYNGAARD; WEIL, 1991). O problema de fechamento da turbulência na equação de difusão foi modificado considerando-se uma equação genérica para a difusão turbulenta de forma que o fluxo vertical turbulento de concentração mais a sua derivada é proporcional ao gradiente médio.

A equação do fluxo turbulento, como sugerida por (VAN DOP; VERVER, 2001), dependente do tempo é escrita como:

$$\left(1 + \left(\frac{S_k \sigma_w T_{l_w}}{2}\right) \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial t}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (3.12)$$

sendo  $S_k$  a assimetria (skewness),  $\sigma_w$  o desvio padrão da velocidade turbulenta vertical (m/s),  $T_{l_w}$  a escala de tempo Lagrangeana (s) e  $\tau$  o tempo de relaxação (s).

Desta forma o problema de fechamento da turbulência é solucionado sem obedecer à lei de Fick, sendo chamado de fechamento não-Fickiano. Este fechamento nos permite investigar o efeito dos turbilhões mais energéticos em diferentes alturas e o efeito do transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes considerando de um modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta. Agora, a turbulência não é mais modelada apenas no coeficiente de difusão  $K_z$ .

O segundo termo do lado esquerdo da equação (3.12) leva em conta o caráter não-local da dispersão. O caráter local indica que apenas partículas de ar vizinhas se relacionam, enquanto que no não-local quaisquer partículas podem se relacionar entre si. A Figura 3.1 mostra um diagrama destes processos. O fato de o caráter não-local da dispersão ser considerado faz com que os modelos não-Fickianos também sejam chamados de modelos com fechamento não-local.

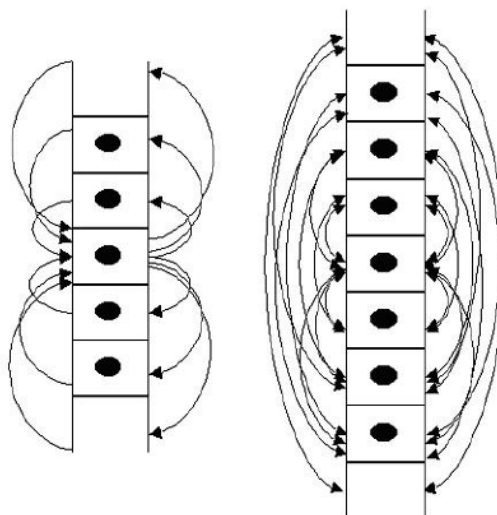


Figura 3.1: Esquema ilustrativo do efeito local (à esquerda) e efeito não-local (à direita) na dispersão do poluente. Fonte: página 226 de (STULL, 1988a).

Assim, a equação (3.12) pode ser escrita como:

$$\left(1 + \beta \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial t}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (3.13)$$

em que  $\beta$  é escrito como:

$$\beta = \frac{S_k \sigma_w T_{lw}}{2}. \quad (3.14)$$

Efetuada as operações na equação (3.13):

$$\overline{w'c'} + \beta \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (3.15)$$

Finalmente reescrevendo a equação (3.15) encontramos o fluxo turbulento vertical, dado por:

$$\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} = -\frac{1}{\beta} \left[ K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} + \overline{w'c'} \right]. \quad (3.16)$$

### 3.2 A equação de difusão tridimensional com fechamento não Fickiano

Consideremos um experimento de dispersão de poluentes na atmosfera, no qual uma fonte libera um traçador químico. Este é abandonado sem empuxo, a partir de uma torre com altura  $H_s$ , que emite poluentes com intensidade  $Q$  a uma taxa constante.

Substituindo a equação (3.16) na equação (3.10):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \\ &+ \frac{1}{\beta} \left[ K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} + \overline{w'c'} \right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

Reescrevendo a equação (3.17):

$$\begin{aligned} \beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \beta \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \beta \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \beta \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) &= \\ &= K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} + \overline{w'c'} \end{aligned} \quad (3.18)$$



Isolando  $\overline{w'c'}$  na equação (3.18):

$$\begin{aligned} \overline{w'c'} = \beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \beta \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \beta \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \\ - \beta \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Substituindo agora, a equação (3.19) na equação (3.10):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \beta \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \beta \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \right. \\ \left. - \beta \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} \right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

Efetuando as derivadas na equação (3.20):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} \right) + \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} \right). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Pelo teorema de Cauchy-Euler temos que:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} \right) = \tau \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \right). \quad (3.22)$$

Assim, podemos reescrever a equação (3.10) como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left( \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} \right) = \\ = -\tau \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Efetuando as derivadas no lado direito da equação (3.23)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left( \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} \right) = & -\tau \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Finalmente, substituindo a equação (3.24) na equação (3.21) obtemos a equação de advecção-difusão tridimensional, dependente do tempo, que considera o fechamento não local da turbulência e é escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = & \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} \right) + \\ & - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) - \tau \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \\ & - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \right), \end{aligned} \quad (3.25)$$

sendo que  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  representam os coeficientes de difusão nas direções longitudinal, lateral e vertical, respectivamente. Como o domínio é finito, a equação (3.25) está sujeita as seguintes condições de contorno:

$$K_x \frac{\partial \bar{c}(L_x, y, z, t)}{\partial x} = K_y \frac{\partial \bar{c}(x, 0, z, t)}{\partial y} = K_y \frac{\partial \bar{c}(x, L_y, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (3.25a)$$

$$K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, 0, t)}{\partial z} = K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, h, t)}{\partial z} = 0 \quad (3.25b)$$

e à condição de fonte

$$\bar{u} \bar{c}(0, y, z, t) = Q \delta(y - y_o) \delta(z - H_s) \quad (3.25c)$$

sendo  $Q$  a intensidade da fonte ( $g/s$ ),  $h$  a altura da camada limite planetária ( $m$ ),  $H_s$  a altura da fonte ( $m$ ),  $L_x$  e  $L_y$  os limites para longe da fonte no eixo  $x$  e  $y$ , respectivamente em ( $m$ ) e  $\delta$  é a função delta de Dirac.

Neste trabalho, em situações de vento fraco e de meandro, as componentes médias  $\bar{u}$  e  $\bar{v}$

do vento serão consideradas respectivamente como:

$$\bar{u} = V \text{sen}(\theta), \quad (3.26)$$

$$\bar{v} = V \text{cos}(\theta), \quad (3.27)$$

em que  $V$  é a velocidade do vento e  $\theta$  é a direção do vento. Por simplicidade, as variáveis  $\bar{u}$  e  $\bar{v}$  serão mantidas genéricas ao longo da dedução da equação que segue abaixo. O mesmo será considerado no caso de não conhecermos a direção do vento.

### 3.3 Solução da equação de advecção-difusão tridimensional

Para obter uma solução analítica para o modelo proposto, utilizou-se a transformada de Laplace e a técnica GILTT.

Aplicando a técnica da transformada de Laplace na equação (3.25), na variável  $t$ , obtemos assim o seguinte problema estacionário  $[\bar{C} = \bar{C}(x, y, z, r)]$ , sendo  $\bar{c}(x, y, z, 0) = 0$ :

$$\begin{aligned} r\bar{C} + \bar{u}\frac{\partial\bar{C}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial\bar{C}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial\bar{C}}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial\bar{C}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial\bar{C}}{\partial y}\right) + \\ &- \frac{\partial}{\partial z}\left(\beta r\bar{C}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\bar{u}\frac{\partial\bar{C}}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\bar{v}\frac{\partial\bar{C}}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\bar{w}\frac{\partial\bar{C}}{\partial z}\right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial\bar{C}}{\partial x}\right)\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\beta\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial\bar{C}}{\partial y}\right)\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial\bar{C}}{\partial z}\right) + \\ &- \tau r^2\bar{C} - \tau\bar{u}r\frac{\partial\bar{C}}{\partial x} - \tau\bar{v}r\frac{\partial\bar{C}}{\partial y} - \tau\bar{w}r\frac{\partial\bar{C}}{\partial z} + \tau r\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial\bar{C}}{\partial x}\right) + \tau r\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial\bar{C}}{\partial y}\right), \end{aligned} \quad (3.28)$$

no qual  $\bar{C}$  denota a transformada de Laplace na variável  $t$   $\bar{C}(x, y, z, r) = \mathcal{L}\{\bar{c}(x, y, z, t); t \rightarrow r\}$  e  $r$  é complexo.

Neste trabalho, por simplicidade, assumimos que o coeficiente de difusão  $K_y$  tem dependência somente na direção  $z$  ( $\partial K_y / \partial y = 0$ ) (ALVES et al., 2012), assim a equação (3.28)

pode ser reescrita efetuando as respectivas derivadas como:

$$\begin{aligned}
\bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} &= K_x \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + K'_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + K_y \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} - \beta r \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \\
&- (\beta r)' \bar{C} - \beta \bar{u} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z \partial x} - (\beta \bar{u})' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - \beta \bar{v} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z \partial y} - (\beta \bar{v})' \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - \beta \bar{w} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + \\
&- (\beta \bar{w})' \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \beta K_x \frac{\partial^3 \bar{C}}{\partial z \partial x^2} + (\beta K_x)' \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \beta K'_x \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z \partial x} + (\beta K'_x)' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \\
&+ \beta K_y \frac{\partial^3 \bar{C}}{\partial z \partial y^2} + (\beta K_y)' \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + K'_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \tau r^2 \bar{C} - \tau \bar{u} r \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \\
&- \tau \bar{v} r \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - \tau \bar{w} r \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \tau r K_x \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \tau r K'_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \tau r K_y \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} - r \bar{C}.
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Aplicando a técnica da transformada integral na variável  $y$ , expande-se a concentração de poluentes como (BUSKE et al., 2012):

$$\bar{C}(x, y, z, r) = \sum_{n=0}^N \frac{\bar{c}_n(x, z, r) \zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}}, \tag{3.30}$$

sendo  $N_n$  dado por

$$N_n = \int_0^{L_y} \zeta_n^2(y) dy.$$

Considerando  $\bar{c}_n = \bar{c}_n(x, z, r)$  e substituindo a equação (3.30) na equação (3.29) obtemos (BUSKE, 2008):

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^N \frac{\bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\bar{v}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} + \sum_{n=0}^N \frac{\bar{w}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) = \\
& = \sum_{n=0}^N \frac{K_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{K'_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{K_y}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial^2 \zeta_n(y)}{\partial y^2} + \\
& - \sum_{n=0}^N \frac{\beta r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta r)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\beta \bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} \zeta_n(y) + \\
& - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta \bar{u})'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\beta \bar{v}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta \bar{v})'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} + \\
& - \sum_{n=0}^N \frac{\beta \bar{w}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta \bar{w})'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\beta K_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^3 \bar{c}_n}{\partial z \partial x^2} \zeta_n(y) + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{(\beta K_x)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\beta K'_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{(\beta K'_x)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{\beta K_y}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \frac{\partial^2 \zeta_n(y)}{\partial y^2} + \sum_{n=0}^N \frac{(\beta K_y)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial^2 \zeta_n(y)}{\partial y^2} + \sum_{n=0}^N \frac{K_z}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} \zeta_n(y) + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{K'_z}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\tau r^2}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\tau \bar{u} r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \\
& - \sum_{n=0}^N \frac{\tau \bar{v} r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} - \sum_{n=0}^N \frac{\tau \bar{w} r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\tau r K_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} \zeta_n(y) + \\
& + \sum_{n=0}^N \frac{\tau r K'_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\tau r K_y}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial^2 \zeta_n(y)}{\partial y^2} - \sum_{n=0}^N \frac{r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \zeta_n(y).
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Utiliza-se o problema auxiliar de Sturm-Liouville dado por:

$$\frac{\partial^2 \zeta_n(y)}{\partial y^2} + \lambda_n^2 \zeta_n(y) = 0 \quad em \quad 0 < y < L_y, \tag{3.32}$$

no qual  $\zeta_n(y)$  é um conjunto de autofunções ortogonais dadas por:

$$\zeta_n(y) = \cos(\lambda_n y),$$

com

$$\lambda_n = \frac{n\pi}{L_y} \quad (n = 0, 1, 2, \dots),$$

sendo  $\lambda_n$  o conjunto de autovalores. Da equação (3.32) temos que:

$$\frac{\partial^2 \zeta_n(y)}{\partial y^2} = -\lambda_n^2 \zeta_n(y). \quad (3.33)$$

Substituindo a equação (3.33) na equação (3.31):

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^N \frac{\bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\bar{v}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} + \sum_{n=0}^N \frac{\bar{w}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) = \\ & = \sum_{n=0}^N \frac{K_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{K'_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{K_y}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \lambda_n^2 \zeta_n(y) + \\ & - \sum_{n=0}^N \frac{\beta r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta r)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\beta \bar{u}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} \zeta_n(y) + \\ & - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta \bar{u})'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\beta \bar{v}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta \bar{v})'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} + \\ & - \sum_{n=0}^N \frac{\beta \bar{w}}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta \bar{w})'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\beta K_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^3 \bar{c}_n}{\partial z \partial x^2} \zeta_n(y) + \\ & + \sum_{n=0}^N \frac{(\beta K_x)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\beta K'_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{(\beta K'_x)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \\ & - \sum_{n=0}^N \frac{\beta K_y}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \lambda_n^2 \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{(\beta K_y)'}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \lambda_n^2 \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{K_z}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} \zeta_n(y) + \\ & + \sum_{n=0}^N \frac{K'_z}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\tau r^2}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\tau \bar{u} r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) + \\ & - \sum_{n=0}^N \frac{\tau \bar{v} r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} - \sum_{n=0}^N \frac{\tau \bar{w} r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \zeta_n(y) + \sum_{n=0}^N \frac{\tau r K_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} \zeta_n(y) + \\ & + \sum_{n=0}^N \frac{\tau r K'_x}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{\tau r K_y}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \lambda_n^2 \zeta_n(y) - \sum_{n=0}^N \frac{r}{N_n^{\frac{1}{2}}} \bar{c}_n \zeta_n(y) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Tomando momentos, ou seja, aplicando o operador integral:

$$\frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} (\cdot) \zeta_m(y) dy, \quad (3.35)$$

e definindo:

$$\alpha_{n,m} = \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \quad (3.36)$$

$$\gamma_{n,m} = \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}} N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \frac{\partial \zeta_n(y)}{\partial y} \zeta_m(y) dy = \begin{cases} \frac{2n^2}{L_y(m^2-n^2)} [\cos(n\pi)\cos(m\pi) - 1], & m \neq n \\ 0, & m = n \end{cases} \quad (3.37)$$

pode-se escrever a equação (3.34) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \alpha_{n,m} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} + \gamma_{n,m} \bar{v} \bar{c}_n + \alpha_{n,m} \bar{w} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} &= \alpha_{n,m} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} + \alpha_{n,m} K'_x \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} + \\ &- \alpha_{n,m} \lambda_n^2 K_y \bar{c}_n - \alpha_{n,m} \beta r \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \alpha_{n,m} (\beta r)' \bar{c}_n - \alpha_{n,m} \beta \bar{u} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} + \\ &- \alpha_{n,m} (\beta \bar{u})' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \gamma_{n,m} \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \gamma_{n,m} (\beta \bar{v})' \bar{c}_n - \alpha_{n,m} \beta \bar{w} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} + \\ &- \alpha_{n,m} (\beta \bar{w})' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} + \alpha_{n,m} \beta K_x \frac{\partial^3 \bar{c}_n}{\partial z \partial x^2} + \alpha_{n,m} (\beta K_x)' \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} + \alpha_{n,m} \beta K'_x \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} + \\ &+ \alpha_{n,m} (\beta K'_x)' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \alpha_{n,m} \lambda_n^2 \beta K_y \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \alpha_{n,m} \lambda_n^2 (\beta K_y)' \bar{c}_n + \alpha_{n,m} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} + \\ &+ \alpha_{n,m} K'_z \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \alpha_{n,m} \tau r^2 \bar{c}_n - \alpha_{n,m} \tau \bar{u} r \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \gamma_{n,m} \tau \bar{v} r \bar{c}_n - \alpha_{n,m} \tau \bar{w} r \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} + \\ &+ \alpha_{n,m} \tau r K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} + \alpha_{n,m} \tau r K'_x \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \alpha_{n,m} \lambda_n^2 \tau r K_y \bar{c}_n - \alpha_{n,m} r \bar{c}_n \end{aligned} \quad (3.38)$$

Como podemos observar, primeiramente tínhamos um problema tridimensional estacionário onde chegamos, após a aplicação da transformada integral em  $y$ , em um problema bidimensional dado pela equação (3.38), cuja solução é conhecida (SILVEIRA, 2017). Assim, aplica-se o método GILTT para resolver o problema dado pela equação (3.38) e expande-se a concentração bidimensional de poluentes da seguinte forma:

$$\bar{c}_n(x, z, r) = \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i}(x, r) \varsigma_i(z), \quad (3.39)$$

em que  $\varsigma_i(z)$  é um conjunto de autofunções ortogonais, dadas por

$$\varsigma_i(z) = \cos(\gamma_i z),$$

com

$$\gamma_i = \frac{i\pi}{h} (i = 0, 1, 2, \dots),$$

no qual  $\gamma_i$  é um conjunto de autovalores.

Substituindo a equação (3.39) na equação (3.38), lembrando que  $\frac{\partial^2 \varsigma_i(z)}{\partial z^2} = -\lambda_i^2 \varsigma_i(z)$  (do problema de Sturm-Liouville) e considerando  $\overline{c_{n,i}} = \overline{c_{n,i}}(x, r)$ , podemos escrever:

$$\begin{aligned}
& \alpha_{n,m} \bar{u} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \varsigma_i(z) + \gamma_{n,m} \bar{v} \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) + \alpha_{n,m} \bar{w} \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} = \\
& = \alpha_{n,m} K_x \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \overline{c_{n,i}}}{\partial x^2} \varsigma_i(z) + \alpha_{n,m} K'_x \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \varsigma_i(z) - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 K_y \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) + \\
& - \alpha_{n,m} \beta r \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} - \alpha_{n,m} (\beta r)' \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) - \alpha_{n,m} \beta \bar{u} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} + \\
& - \alpha_{n,m} (\beta \bar{u})' \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \varsigma_i(z) - \gamma_{n,m} \beta \bar{v} \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} - \gamma_{n,m} (\beta \bar{v})' \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) + \\
& + \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \beta \bar{w} \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) - \alpha_{n,m} (\beta \bar{w})' \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} + \\
& + \alpha_{n,m} \beta K_x \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \overline{c_{n,i}}}{\partial x^2} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} + \alpha_{n,m} (\beta K_x)' \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \overline{c_{n,i}}}{\partial x^2} \varsigma_i(z) + \\
& + \alpha_{n,m} \beta K'_x \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} + \alpha_{n,m} (\beta K'_x)' \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \varsigma_i(z) + \\
& - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \beta K_y \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 (\beta K_y)' \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) + \\
& - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 K_z \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) + \alpha_{n,m} K'_z \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} - \alpha_{n,m} \tau r^2 \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) + \\
& - \alpha_{n,m} \tau \bar{u} r \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \varsigma_i(z) - \gamma_{n,m} \tau \bar{v} r \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) - \alpha_{n,m} \tau \bar{w} r \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} + \\
& + \alpha_{n,m} \tau r K_x \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \overline{c_{n,i}}}{\partial x^2} \varsigma_i(z) + \alpha_{n,m} \tau r K'_x \sum_{i=0}^I \frac{\partial \overline{c_{n,i}}}{\partial x} \varsigma_i(z) + \\
& - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \tau r K_y \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z) - \alpha_{n,m} r \sum_{i=0}^I \overline{c_{n,i}} \varsigma_i(z)
\end{aligned} \tag{3.40}$$



Aplicando o operador integral  $\int_0^h (\cdot) \varsigma_j(z) dz$ , a equação (3.40) é escrita como:

$$\begin{aligned}
& -\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h \bar{u} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \gamma_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \bar{v} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \bar{w} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \bar{c}_{n,i}}{\partial x^2} \int_0^h K_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& +\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h K'_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h K_y \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \beta r \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h (\beta r)' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h \beta \bar{u} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h (\beta \bar{u})' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\gamma_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \beta \bar{v} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz - \gamma_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h (\beta \bar{v})' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& +\alpha_{n,m} \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \beta \bar{w} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h (\beta \bar{w})' \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& +\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \bar{c}_{n,i}}{\partial x^2} \int_0^h \beta K_x \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \bar{c}_{n,i}}{\partial x^2} \int_0^h (\beta K_x)' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \quad (3.41) \\
& +\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h \beta K'_x \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h (\beta K'_x)' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \beta K_y \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h (\beta K_y)' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h K_z \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h K'_z \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \tau r^2 \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h \tau \bar{u} r \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\gamma_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \tau \bar{v} r \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \tau \bar{w} r \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& +\alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial^2 \bar{c}_{n,i}}{\partial x^2} \int_0^h \tau r K_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \frac{\partial \bar{c}_{n,i}}{\partial x} \int_0^h \tau r K'_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \lambda_i^2 \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h \tau r K_y \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i} \int_0^h r \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz = 0
\end{aligned}$$

Reescrevendo a equação (3.41) em notação matricial, tem-se:

$$Y''(x) + F.Y'(x) + G.Y(x) = 0, \quad (3.42)$$

onde,  $Y(x)$  é o vetor coluna cujas componentes são  $\{\overline{c_{n,i}}(x, r)\}$ . A matriz F é dada por:

$$F = B^{-1}.R, \quad (3.43)$$

e a matriz G é dada por:

$$G = B^{-1}.S. \quad (3.44)$$

As matrizes  $B$ ,  $R$  e  $S$  são dadas respectivamente por:

$$\begin{aligned} b_{i,j} = & \alpha_{n,m} \int_0^h K_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \int_0^h \beta K_x \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\ & + \alpha_{n,m} \int_0^h (\beta K_x)' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \int_0^h \tau r K_x \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \end{aligned} \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned} r_{i,j} = & -\alpha_{n,m} \int_0^h \bar{u} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \int_0^h K_x' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\ & -\alpha_{n,m} \int_0^h \beta \bar{u} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \int_0^h (\beta \bar{u})' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\ & + \alpha_{n,m} \int_0^h \beta K_x' \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \int_0^h (\beta K_x')' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\ & -\alpha_{n,m} \int_0^h \tau \bar{u} r \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \int_0^h \tau r K_x' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned}
s_{i,j} = & -\gamma_{n,m} \int_0^h \bar{v} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \int_0^h \bar{w} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \lambda_i^2 \int_0^h K_y \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \int_0^h \beta r \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \int_0^h (\beta r)' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \gamma_{n,m} \int_0^h \beta \bar{v} \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& -\gamma_{n,m} \int_0^h (\beta \bar{v})' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \int_0^h \beta \bar{w} \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \int_0^h (\beta \bar{w})' \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \int_0^h \beta K_y \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \lambda_i^2 \int_0^h (\beta K_y)' \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \lambda_i^2 \int_0^h K_z \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& +\alpha_{n,m} \int_0^h K_z' \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \int_0^h \tau r^2 \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz + \\
& -\gamma_{n,m} \int_0^h \tau \bar{v} r \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \int_0^h \tau \bar{w} r \frac{\partial \varsigma_i(z)}{\partial z} \varsigma_j(z) dz + \\
& -\alpha_{n,m} \lambda_i^2 \int_0^h \tau r K_y \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz - \alpha_{n,m} \int_0^h r \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz
\end{aligned} \tag{3.47}$$

O próximo passo é aplicar uma redução de ordem na equação (3.42), portanto, deve-se, definir novas variáveis:

$$Z_1(x) = Y(x) \tag{3.48}$$

$$Z_2(x) = Y'(x) \tag{3.49}$$

Derivando as equações (3.48) e (3.49):

$$Z_1'(x) = Y'(x) \tag{3.50}$$

$$Z_2'(x) = Y''(x) \tag{3.51}$$

Igualando as equações (3.49) e (3.50):

$$Z_1'(x) = Z_2(x) \tag{3.52}$$

Reorganizando os termos da equação (3.52):

$$Z_1'(x) - Z_2(x) = 0 \tag{3.53}$$

Substituindo as equações (3.48), (3.49) e (3.51) na equação (3.42) pode-se escrever:

$$Z_2'(x) + F.Z_2(x) + G.Z_1(x) = 0 \quad (3.54)$$

As equações (3.53) e (3.54) constituem um sistema de equações matriciais de primeira ordem e podem ser escritas como:

$$\begin{cases} Z_1'(x) + 0Z_2'(x) + 0Z_1(x) - Z_2(x) = 0 \\ 0Z_1'(x) + Z_2'(x) + G.Z_1(x) + F.Z_2(x) = 0 \end{cases} \quad (3.55)$$

O sistema da equação (3.55) pode ser escrito em notação matricial da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} Z_1'(x) \\ Z_2'(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} Z_1(x) \\ Z_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.56)$$

Da equação (3.56) pode-se definir a seguinte EDO na forma matricial:

$$Z'(x) + H.Z(x) = 0 \quad (3.57)$$

no qual o vetor  $Z(x)$  é dado por:

$$Z(x) = \begin{bmatrix} Z_1(x) \\ Z_2(x) \end{bmatrix}$$

e a matriz H tem a forma de bloco representada por:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix}$$

O problema da equação (3.57) é resolvido pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização (BUSKE, 2008; SILVEIRA, 2017). Assim,

$$s\bar{Z}(s) - Z(0) + H.\bar{Z}(s) = 0, \quad (3.58)$$

sendo que  $\bar{Z}(s)$  denota a transformada de Laplace do vetor  $Z(x)$ . Assumindo que a matriz  $H$  é não-degenerada, pode-se escrever:

$$H = X D X^{-1}, \quad (3.59)$$

no qual  $D$  é a matriz diagonal de autovalores da matriz H (GOLUB; LOAN, 1996);  $X$  é a matriz dos respectivos autovetores (BURDEN; FAIRES, 2010) e  $X^{-1}$  é a matriz inversa da matriz dos autovetores.

Substituindo a equação (3.59) na equação (3.58):

$$s\bar{Z}(s) - Z(0) + X D X^{-1} \cdot \bar{Z}(s) = 0 \quad (3.60)$$

Rearranjando os termos da equação (3.60) podemos escrever:

$$(sI + X D X^{-1}) \cdot \bar{Z}(s) = Z(0), \quad (3.61)$$

onde  $I$  é a matriz identidade, sendo que  $X X^{-1} = X^{-1} X = I$ .

Após manipulações algébricas, a solução do problema transformado é dada por (BUSKE, 2008; SILVEIRA, 2017):

$$\bar{Z}(s) = X(sI + D)^{-1} X^{-1} \bar{Z}(0). \quad (3.62)$$

Aplicando a transformada Inversa de Laplace ( $\mathfrak{L}^{-1}$ ) na equação (3.62) obtem-se:

$$Z(x) = X \cdot \mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} \cdot X^{-1} \cdot Z(0) \quad (3.63)$$

em que a matriz  $(sI + D)$  é escrita como:

$$(sI + D) = \begin{bmatrix} s + d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s + d_n \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

sendo que  $d_n$  são os autovalores da matriz  $H$ . Da álgebra matricial, sabe que a inversa de uma matriz diagonal é dada pela inversa dos seus elementos. Assim, a matriz inversa da matriz diagonal  $(sI + D)$  é dada por:

$$(sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s+d_n} \end{bmatrix} \quad (3.65)$$

Fazendo a transformada inversa de Laplace de  $(sI + D)^{-1}$  obtemos:

$$\mathfrak{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} = G(x) = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_n x} \end{bmatrix} \quad (3.66)$$

Finalmente, substituindo a equação (3.66) na equação (3.63), obtemos a solução para o

problema da equação (3.57):

$$Z(x) = X \cdot G(x) \cdot X^{-1} \cdot Z(0) \quad (3.67)$$

Definindo  $M(x) = X \cdot G(x)$  e  $\xi = X^{-1} \cdot Z(0)$ , a equação (3.67) é escrita como:

$$Z(x) = M(x) \xi, \quad (3.68)$$

ou na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} Z_1(x) \\ Z_2(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}(x) & M_{12}(x) \\ M_{21}(x) & M_{22}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}.$$

Finalmente, para determinar o vetor desconhecido  $\xi$  precisamos resolver o seguinte sistema linear resultante da aplicação das condições de contorno na solução da equação (3.57):

$$\begin{pmatrix} M_{11}(0) & M_{12}(0) \\ M_{21}(L_x) & M_{22}(L_x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z_1(0) \\ Z_2(L_x) \end{pmatrix},$$

sendo que  $Z_1(0)$  e  $Z_2(L_x)$  se referem a EDO de primeira ordem (3.57) aplicada na fonte e no limite para longe da fonte da direção  $x$ , respectivamente. O método 3D-GILTT aplicado na condição de fonte é mostrado no anexo A.

Uma vez que o vetor  $\xi$  é obtido, basta substituir o resultado da equação (3.68) na equação (3.39), e obtemos a solução do problema bidimensional estacionário ( $\bar{c}_n(x, z, r)$ ).

Uma vez que os coeficientes da solução em série (3.39) estão determinados, estamos em condições de inverter a solução pela transformada inversa de Laplace e obter a solução final do problema proposto. Este procedimento resulta

$$c(x, y, z, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\eta-i\infty}^{\eta+i\infty} \bar{C}(x, y, z, r) e^{rt} dr, \quad (3.69)$$

ou ainda

$$c(x, y, z, t) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=0}^N \int_{\eta-i\infty}^{\eta+i\infty} \frac{\bar{c}_n(x, z, r) \zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}} e^{rt} dr. \quad (3.70)$$

onde a integral de contorno deve ser calculada ao longo da reta  $Re\{r\} = \eta$  no plano complexo. O valor de  $\eta$  é escolhido de forma que as singularidades de  $\bar{c}_n(x, z, r)$  estejam à esquerda desta reta.

Cabe salientar que nenhuma aproximação é feita durante a derivação da solução até aqui, e, assim, a equação (3.39) é exata exceto pelo erro de truncamento. Uma outra vantagem deste método é que a solução é válida para qualquer perfil de  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$ ,  $\bar{w}$ ,  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  sejam eles constantes ou funções dependentes da altura.

Devido à impossibilidade de determinarmos as singularidades do integrando que aparece

no lado direito da equação (3.69), não poderemos aplicar o Teorema dos Resíduos para avaliar analiticamente a integral. Assim, na seqüência apresentaremos uma solução aproximada da integral acima usando inversão numérica.

### 3.4 Inversão numérica da transformada de Laplace: *Quadratura Gaussiana*

Uma solução aproximada da integral, que aparece na equação (3.69) ou (3.70), pode ser obtida invertendo numericamente a concentração transformada  $\bar{C}(x, y, z, r)$  pelo método da quadratura de Gauss-Legendre (STROUD; SECREST, 1966). Assim

$$c(x, y, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \bar{C}\left(x, y, z, \frac{P_k}{t}\right), \quad (3.71)$$

ou ainda

$$c(x, y, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \sum_{n=0}^N \frac{\bar{c}_n\left(x, z, \frac{P_k}{t}\right) \zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.72)$$

na qual  $N$  é o número de termos do somatório da fórmula da inversa da GILTT,  $A_k$ ,  $P_k$  e  $M$  são, respectivamente, os pesos, as raízes e a ordem da quadratura considerada e estão tabulados no livro (STROUD; SECREST, 1966). Quanto à inversão numérica de Laplace, é importante mencionar, que esta aproximação é exata se a função transformada é um polinômio de grau  $2M - 1$  na variável considerada.

Somos cientes da existência na literatura de métodos mais acurados para avaliar a integral que aparece na equação (3.69), como por exemplo a aproximação de multiprecisão dos autores (VALKÓ; ABATE, 2004) e (ABATE; VALKÓ, 2004). A escolha do método de inversão é baseada nos trabalhos anteriores que utilizam o método GILTT para a obtenção da solução do problema proposto (BUSKE, 2008), além de permitir a comparação dos resultados encontrados.

## 4 VALIDAÇÃO DO MODELO

Para avaliar o efeito do termo de fechamento não local da turbulência na simulação da concentração de poluentes, necessita-se parametrizar os fluxos turbulentos da concentração de poluentes e perfil do vento, pois a altura de medida do vento geralmente é diferente da altura de medida do poluente.

Na sequência, apresentam-se as parametrizações da turbulência, a formulação do perfil do vento, os dados experimentais e as formulações dos índices estatísticos, utilizados para modelar a dispersão de poluentes considerando o fluxo contra-gradiente.

### 4.1 Parametrizações da turbulência

A escolha de uma parametrização turbulenta adequada é imprescindível para prever a concentração de poluentes atmosféricos. Portanto, a precisão dos modelos de dispersão atmosférica está diretamente relacionada com os parâmetros turbulentos, que por sua vez, estão relacionados às propriedades dinâmicas e termodinâmicas da CLP. Do ponto de vista físico, a parametrização da turbulência é a aproximação da natureza que substitui um termo desconhecido.

Na literatura encontram-se diversas e variadas formulações para o coeficiente de difusão turbulento vertical (ULKE, 2000). Os coeficientes de difusão utilizados neste trabalho são apresentados a seguir.

Para condições atmosféricas instáveis (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001b) e (DEGRAZIA et al., 2002) propuseram as seguintes formulações para os coeficientes de difusão, levando em conta o efeito de memória da pluma de poluentes:

$$K_{\alpha} = \frac{0,583w_*z_i c_i \psi^{2/3} (z/z_i)^{4/3} X^* [0,55(z/z_i)^{2/3} + 1,03c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)_i^{2/3} X^*]}{[0,55(z/z_i)^{2/3} (f_m^*)_i^{1/3} + 2,06c_i^{1/2} \psi^{1/3} (f_m^*)_i X^*]^2}, \quad (4.1)$$

em que  $\alpha$  refere-se as direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ ,  $w_*$  é a escala de velocidade convectiva,  $z_i$  é a altura da camada limite convectiva,  $c_i$  ( $c_u = 0,3$ ;  $c_{v,w} = 0,36$ ) é uma constante,  $\psi$  é a função de dissipação dada por (HOJSTRUP, 1982):



$$\psi^{1/3} = \left[ \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2}, \quad (4.2)$$

sendo  $z$  a altura acima da superfície do solo,  $L$  o comprimento de Monin-Obukhov,  $X^*$  a distância adimensional dada pela seguinte equação:

$$X^* = \frac{xw_*}{\bar{u}z_i}. \quad (4.3)$$

A frequência normalizada do pico espectral  $[(f_m^*)_i]$  é dada por (DEGRAZIA et al., 2000):

$$(f_m^*)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i}, \quad (4.4)$$

onde  $(\lambda_m)_i$  é o pico do comprimento de onda do espectro de velocidade turbulenta, com  $(\lambda_m)_u = (\lambda_m)_v = 1,5h$  e

$$(\lambda_m)_w = 1,8z_i \left[ 1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right]. \quad (4.5)$$

A componente longitudinal é dada por  $(f_m^*)_u = 0,67$  (OLESEN; LARSEN; HOJSTRUP, 1984). A função dissipação usada aqui é o valor médio  $\psi = 0,4$  (CAUGHEY, 1982).

## 4.2 Perfil do vento

O perfil da velocidade do vento será descrito por uma lei de potência (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

$$\frac{\bar{V}}{\bar{V}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^\alpha, \quad (4.6)$$

no qual  $\bar{V}$  e  $\bar{V}_1$  são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas  $z$  e  $z_1$  e  $\alpha$  é uma constante, cujo valor é  $\alpha = 0,1$  em condições instáveis.

## 4.3 Dados experimentais

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

Utilizam-se dados coletados no experimento de vento fraco IIT-Delhi (Índia) e no experimento de Copenhagen (Dinamarca) para validar o modelo, devido aos elevados custos para realização de um experimento para essa finalidade.

### 4.3.1 Experimento IIT-Delhi (Índia)

Para validar o modelo sob condições atmosférica instáveis, foram utilizados dados de vento fraco reportados no experimento IIT-Delhi (Índia) (SHARAN; SINGH; YADAV, 1996, SHARAN et al., 1996, SHARAN; YADAV; MODANI, 2002).

Foram obtidas concentrações ao nível do solo do poluente hexafluoreto de enxofre ( $SF_6$ ). O poluente foi liberado sem empuxo de uma altura de 1 m, sendo que as concentrações foram observadas próximo do solo (0,5 m). O período de amostragem do  $SF_6$  é de 30 min a uma taxa de 30 a 50 ml min<sup>-1</sup>. As variáveis meteorológicas, vento e temperatura, foram obtidas em 4 alturas (2, 4, 15 e 30 m) de uma torre micrometeorológica de 30m. Os amostradores foram colocados em arcos de 50 e 100 m de raio. No total foram realizados 8 experimentos, sendo que foram medidos os seguintes parâmetros micrometeorológicos: velocidade do vento ( $V$ ), direção do vento ( $\theta$ ), velocidade convectiva ( $w_*$ ), velocidade de fricção ( $u_*$ ), comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) e altura da camada limite atmosférica ( $h$ ). A Tabela 4.1 mostra os dados meteorológicos do experimento IIT-Delhi (SHARAN; SINGH; YADAV, 1996, SHARAN et al., 1996, SHARAN; YADAV; MODANI, 2002).

Tabela 4.1: Parâmetros meteorológicos observados no experimento IIT-Delhi.

Teste	$V$ ( $ms^{-1}$ )	$\theta$ ( $^\circ$ )	$w_*$ ( $ms^{-1}$ )	$u_*$ ( $ms^{-1}$ )	$L$ ( $m$ )	$h$ ( $m$ )
1	1,36	343	2,37	0,34	-32,78	1570
2	0,74	291	2,26	0,21	-8,70	1240
6	1,40	286	2,04	0,34	-33,25	1070
7	1,54	284	2,28	0,37	-33,54	1240
8	0,89	301	1,09	0,25	-56,63	943
11	1,07	320	1,83	0,25	-19,53	1070
12	1,55	334	2,32	0,35	-25,64	1325
13	1,08	331	1,72	0,21	-8,11	1070

### 4.3.2 Experimento de Copenhagen (Dinamarca)

Os experimentos de dispersão em Copenhagen, descritos nos artigos de (GRYNING, 1981) e (GRYNING; LYCK, 1984) consistiram na liberação do traçador  $SF_6$  (hexafluoreto de enxofre) ao norte de Copenhagen. É um experimento de fonte alta e fortemente convectivo.

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

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

zero). A Tabela 4.2 mostra os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão na CLC de Copenhague a serem utilizados no modelo, onde  $\bar{u}$  é a velocidade do vento médio ( $m/s$ ). Estes dados meteorológicos são médias horárias.

Tabela 4.2: Parâmetros meteorológicos observados no experimento de Copenhague.

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

#### 4.4 Índices estatísticos

Os índices estatísticos são usados para avaliar o desempenho do modelo em representar os dados observados. Avalia-se, respectivamente, os índices estatísticos, desvio quadrático médio normalizado ( $NMSE$ ), coeficiente de correlação ( $COR$ ), fator de dois ( $FAT2$ ), fração de inclinação ( $FB$ ) e desvio fracional padrão ( $FS$ ) (HANNA, 1989).

Nas fórmulas abaixo, os índices  $o$  e  $p$  indicam, respectivamente, as quantidades observadas e previstas,  $c$  a concentração de poluentes e  $\sigma$  o desvio padrão.

O desvio quadrático médio normalizado ( $NMSE$ ) informa sobre todos os desvios entre as concentrações simuladas e as concentrações observadas. Deve ser o menor possível para um bom modelo.

$$NMSE = \frac{1}{n} \frac{\sum (c_o - c_p)^2}{\bar{c}_o \bar{c}_p}, \quad (4.7)$$

sendo  $n$  o número de observações.

O coeficiente de correlação ( $COR$ ) representa o grau de associação entre as variáveis, quanto mais próximo de 1 melhor o seu desempenho:

$$COR = \frac{(\sum c_o c_p) - n \bar{c}_o \bar{c}_p}{\sqrt{(\sum c_o^2 - n \bar{c}_o^2)(\sum c_p^2 - n \bar{c}_p^2)}}. \quad (4.8)$$

O FAT2 é a fração de dados (% normalizados a 1) que estão entre  $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$ . Quanto mais próximo de 1 este valor estiver, maior é a confiabilidade no modelo.

A fração de inclinação informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as

concentrações observadas. O valor ótimo é zero:

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} . \quad (4.9)$$

O valor ótimo do desvio fracional padrão ( $FS$ ) é zero:

$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)} . \quad (4.10)$$

## 4.5 *Updrafts e downdrafts*

Na atmosfera existem condições atmosféricas estáveis, neutras e instáveis. Uma condição de particular interesse é a condição instável, pois é onde estão presentes os movimentos ascendentes (*updrafts*) e descendentes (*downdrafts*). A instabilidade pode ser causada por diversos fatores, entre eles, formação de uma frente fria e forte aquecimento diurno. Nessas situações são observados fortes movimentos ascendentes e descendentes e isso interfere na concentração de poluentes na atmosfera.

É fundamental incorporar essa situação na modelagem da dispersão de poluentes, pois os poluentes lançados na atmosfera seguem o comportamento do fluxo de ar, ou seja, vão seguir o comportamento ascendente e descendente e isso é inserido no presente modelo através do termo  $S_k$ .

Para a parametrização do termo de contragradiante ( $\beta = \frac{S_k \sigma_w T_{Lw}}{2}$ ) é usada a variação da velocidade turbulenta Euleriana conforme descrita em (DEGRAZIA; VELHO; CARVALHO, 1997) e (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001a) e representada por:

$$\sigma_w^2 = 1,06 c_w \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_w^{2/3}} \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2 ,$$

na qual  $h$  a altura da CLC,  $\psi = 1,5 - 1,2(z/h)^{1/3}$  é a taxa de dissipação,  $c_w = 0,36$  e  $w_*$  é a escala da velocidade convectiva.

A escala de tempo Lagrangiana é parametrizada pela seguinte expressão:

$$T_{Lw} = \frac{0,55}{4} \frac{1}{\sigma_w} \frac{z}{(f_m^*)_w} ,$$

em que  $(f_m^*)_w = z/(\lambda_m)_w$  é a frequência normalizada do pico espectral vertical. A expressão utilizada para o valor do pico espectral do comprimento de onda vertical  $(\lambda_m)_w$  foi:

$$(\lambda_m)_w = 1,8h \left[ 1 - e^{-\frac{4z}{h}} - 0,0003e^{\frac{8z}{h}} \right] .$$

## 5 RESULTADOS

Nesta seção, através do modelo representado pela equação (3.72), investigou-se o problema da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente. Para tanto, foram utilizados os dados micrometeorológicos do experimento IIT-Delhi e Copenhagen e as parametrizações apresentadas no capítulo 4. Para a obtenção dos resultados numéricos foram utilizados 30 autovalores na solução em série em  $z$ , 10 autovalores na solução em série em  $y$  e 4 pontos de quadratura Gaussiana para a inversão numérica no tempo. O modelo de dispersão foi escrito na linguagem Fortran e executado no sistema operacional Windows 10.0.

Para analisar a influência do termo de contragradiente na simulação do transporte turbulento utilizou-se diferentes valores para o termo da assimetria ( $S_k = 0,0$  e  $S_k = 0,6$ ) como na referência (BUSKE, 2008). Para analisar a convergência da concentração em função do número de autovalores ( $N$ ) e do tempo, por motivo de simplicidade, vamos considerar  $v = 0$ .

### 5.1 Resultados considerando o experimento de IIT-Delhi

Inicialmente, a Tabela 5.1 e a Figura 5.1 mostram o comportamento dos resultados obtidos pelo modelo, representado pela equação (3.72), como uma função da soma dos autovalores  $N$ , da concentração de poluentes para a distância da fonte de 100 m para o experimento 12 de IIT-Delhi.

Tabela 5.1: Comportamento da concentração de poluente para o experimento 12 do experimento IIT-Delhi, utilizando a equação (3.25), coeficientes de difusão propostos por Degrazia e o perfil de vento potência.

N	$S_k = 0,0$	$S_k = 0,6$
1	31,200662463971930	31,208121717320200
6	131,313671215667600	131,858946534534200
11	190,501622107589000	192,115777111843500
16	218,980327590360400	221,710339303283700
21	227,920462843668500	230,619531571879000
26	230,190168566255500	239,372727598215500
31	231,144511951141100	241,475911819200400
36	231,319738689099600	241,655610716953800
41	231,360735572050900	241,698741254315700
46	231,371835634343900	241,708747192446700
51	231,374881939417100	241,707165784504700
56	231,375373498872900	241,707970352305200
61	231,375629906905400	241,708685227253000
66	231,375703770954600	241,708830903855000
71	231,375713701646500	241,664013649534800
76	231,375726088840500	241,664426140039300
81	231,375726962462100	241,664430337198700
86	231,375727168945400	241,664430810478600
91	231,375727227210800	241,664431118055200
96	231,375727232758200	241,664431131298700
101	231,375727233436400	241,664535064208600

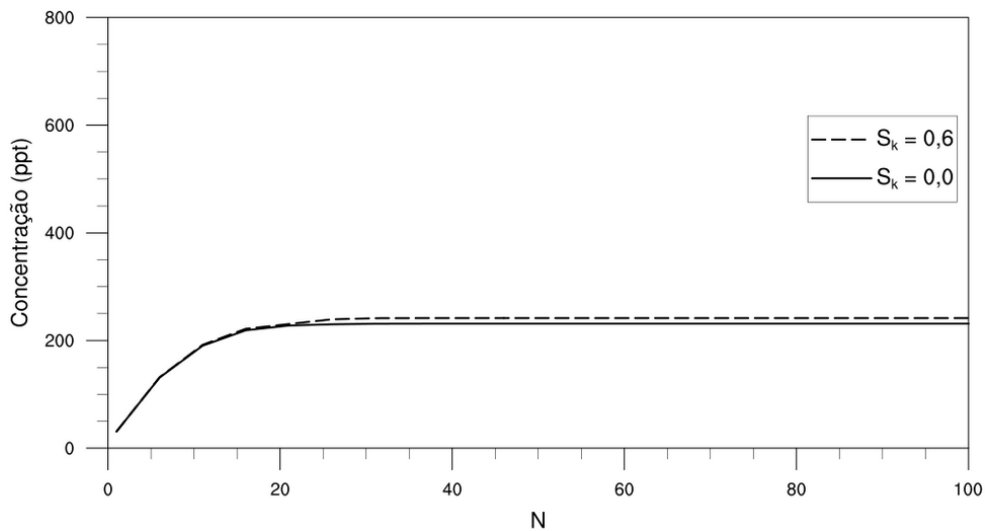


Figura 5.1: Convergência numérica da concentração de poluentes utilizando a equação (3.25), experimento 12 de IIT-Delhi, coeficientes de difusão propostos por Degrazia e perfil de vento potência.

Podemos observar na Figura 5.1, que considerando 30 autovalores ( $N=30$ ) ou mais a convergência numérica do problema está garantida, além disso, a solução apresenta resultados similares, considerando o termo de assimetria ( $S_k = 0,6$ ) e não considerando o termo de assimetria ( $S_k = 0,0$ ).

A Figura 5.2 mostra a convergência da solução em função do número de autovalores, para

duas distâncias da fonte.

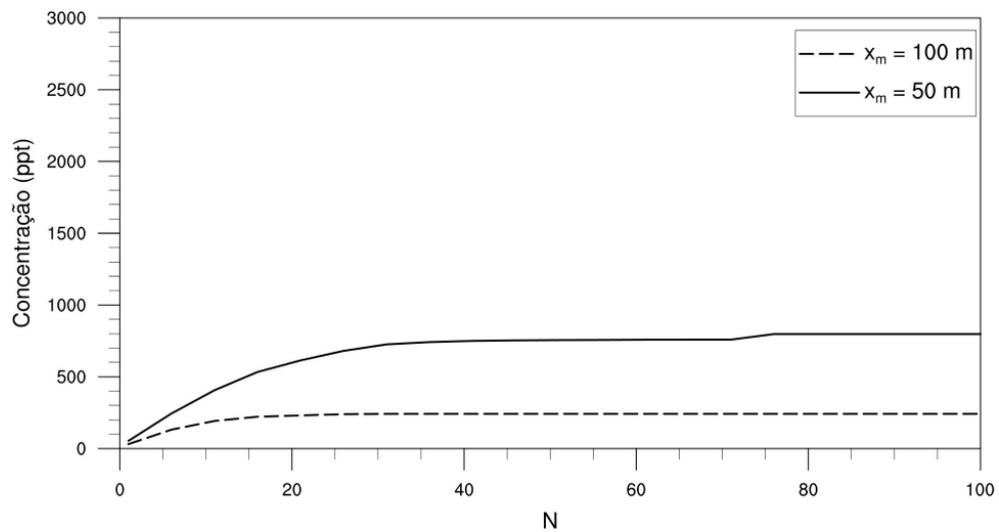


Figura 5.2: Convergência numérica da concentração de poluentes em função do número de autovalores  $N$ , para as distâncias da fonte de  $x_m = 50 m$  e  $x_m = 100 m$  para o experimento 12 de IIT-Delhi

É possível verificar, através dos gráficos, que quanto menor a distância da fonte, maior é a concentração de poluentes. Além disso, nota-se que para distâncias mais próximas da fonte são necessários menos autovalores para a convergência da solução.

A Figura 5.3 mostra a convergência da solução ao longo do tempo. Como podemos observar, a solução apresenta um pico nos instantes iniciais e após um tempo a concentração tende a ficar homogênea.

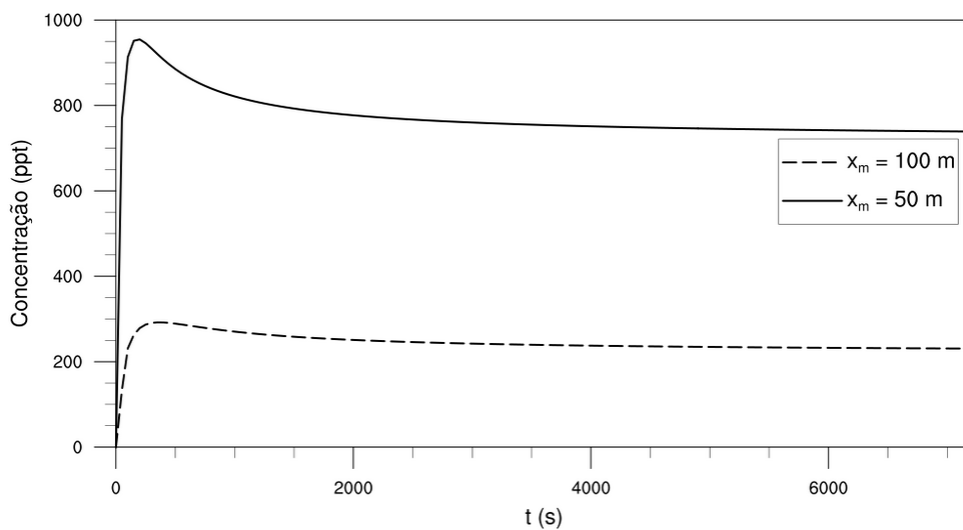


Figura 5.3: Convergência numérica da concentração de poluentes ao longo do tempo para o experimento 12 de IIT-Delhi e distância da fonte de  $x_m = 50 m$  e  $x_m = 100 m$ .

Pelos gráficos, é possível afirmar que para  $t = 2500 s$  a solução já fica homogênea. Nesse

trabalho utilizamos o tempo igual a 3600 s para garantir que a concentração obtida esteja homogênea.

A Tabela 5.2 mostra as concentrações observadas e previstas para o experimento IIT-Delhi considerando  $S_k = 0$  e  $S_k = 0,6$ .

Tabela 5.2: Concentrações observadas e previstas para o experimento IIT-Delhi (ppt).

$c_0$	$c_p(S_k = 0, 0)$ $v = 0$	$c_p(S_k = 0, 6)$ $v = 0$	$c_p(S_k = 0, 0)$ $v \neq 0$	$c_p(S_k = 0, 6)$ $v \neq 0$
832	522,43	523,45	544,92	329,01
345	229,56	230,49	116,08	251,39
1068	858,53	862,18	1355,27	1169,24
460	311,81	313,49	238,60	255,89
1101	437,20	438,36	1009,65	703,53
176	179,48	180,34	134,96	149,03
248	350,75	351,51	267,06	299,80
288	149,79	150,44	362,99	198,40
1282	1365,44	1368,89	2375,71	898,86
345	575,03	577,83	418,42	517,58
616	545,27	547,06	900,41	620,95
162	214,83	215,93	139,99	192,80
759	548,28	549,36	801,10	414,15
222	237,96	238,95	335,44	232,66
1060	926,65	929,44	1345,24	1056,12
215	373,07	374,94	528,30	342,64

Para uma avaliação melhor dos resultados obtidos na Tabela 5.2 é apresentado uma avaliação estatística do presente modelo considerando  $S_k = 0,0$  e  $S_k = 0,6$  para o experimento IIT-Delhi, comparando com o trabalho de (BUSKE, 2008) que usa o método GILTTG, os resultados são apresentados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Desempenho estatístico do modelo para o experimento IIT-Delhi, não considerando ( $S_k = 0$ ) e considerando ( $S_k = 0,6$ ) o termo de assimetria.

Simulação	$NMSE$	$COR$	$FAT2$	$FB$	$FS$
3D-GILTT com $S_k = 0,0$ e $v = 0$	0,18	0,83	0,94	0,16	0,17
3D-GILTT com $S_k = 0,6$ e $v = 0$	0,18	0,83	0,94	0,16	0,17
3D-GILTT com $S_k = 0,0$ e $v \neq 0$	0,28	0,88	0,88	-0,17	-0,44
3D-GILTT com $S_k = 0,6$ e $v \neq 0$	0,18	0,84	0,94	0,18	0,18
GILTTG com $S_k = 0,0$	0,32	0,70	0,81	0,06	-0,13
GILTTG com $S_k = 0,6$	0,28	0,69	0,75	-0,08	-0,09

No modelo 3D-GILTT, quando  $v = 0$ , a solução apresenta uma pequenas diferenças quando são feitas simulações com  $S_k = 0,0$  e  $S_k = 0,6$ . Já para  $v \neq 0$ , considerando o termo de assimetria ( $S_k = 0,6$ ) percebe-se uma melhora nos índices do NMSE, FAT2 e FS, os demais ficaram próximos aos resultados em o termo de assimetria  $S_k = 0,0$ . No modelo GILTTG, quando consideramos o termo de assimetria, em geral, há uma melhora nos índices estatísticos.



A Figura 5.4 mostra o diagrama de espalhamento das concentrações observadas e previstas pelo presente modelo para o experimento IIT-Delhi, considerando o termo de assimetria  $S_k = 0$  e  $S_k = 0,6$  e  $v = 0$ , respectivamente. O resultado corrobora com o apresentado na Tabela 5.3, ressaltando que quando  $v = 0$  pouca diferença é observada nos modelos.

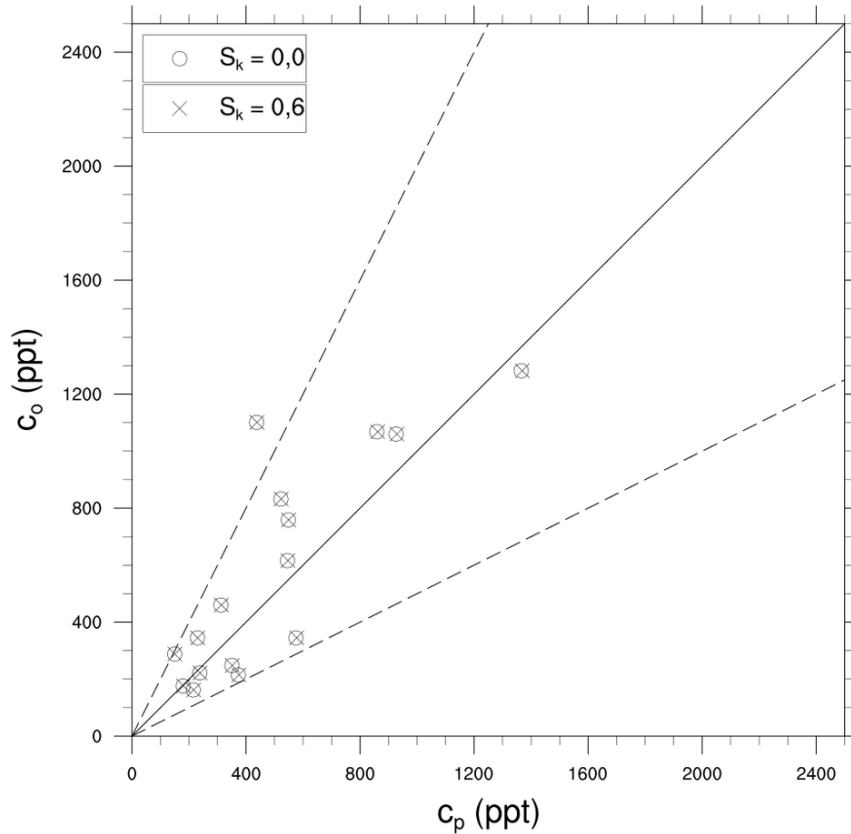


Figura 5.4: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento IIT Delhi para  $S_k = 0,0$  e  $S_k = 0,6$  e  $v = 0$ .

A Figura 5.5 mostra o diagrama de espalhamento das concentrações observadas e previstas pelo presente modelo para o experimento IIT-Delhi, considerando o termo de assimetria  $S_k = 0$  e  $S_k = 0,6$  e  $v \neq 0$ , respectivamente. Diferentemente da Figura 5.4, e de acordo com o resultado apresentado na Tabela 5.3, o modelo apresentou valores mais próximos dos dados experimentais.

Para o termo de assimetria  $S_k = 0$ , resultados similares são obtidos pelo presente modelo e pelo modelo GILTTG. Quando o termo de assimetria é considerado no modelo, melhores resultados são obtidos com o presente modelo, quando comparado com o modelo GILTTG, o que indica o bom desempenho na proposta do presente trabalho. A inclusão do termo que leva em conta a assimetria no modelo contribuiu para a melhora nos resultados.

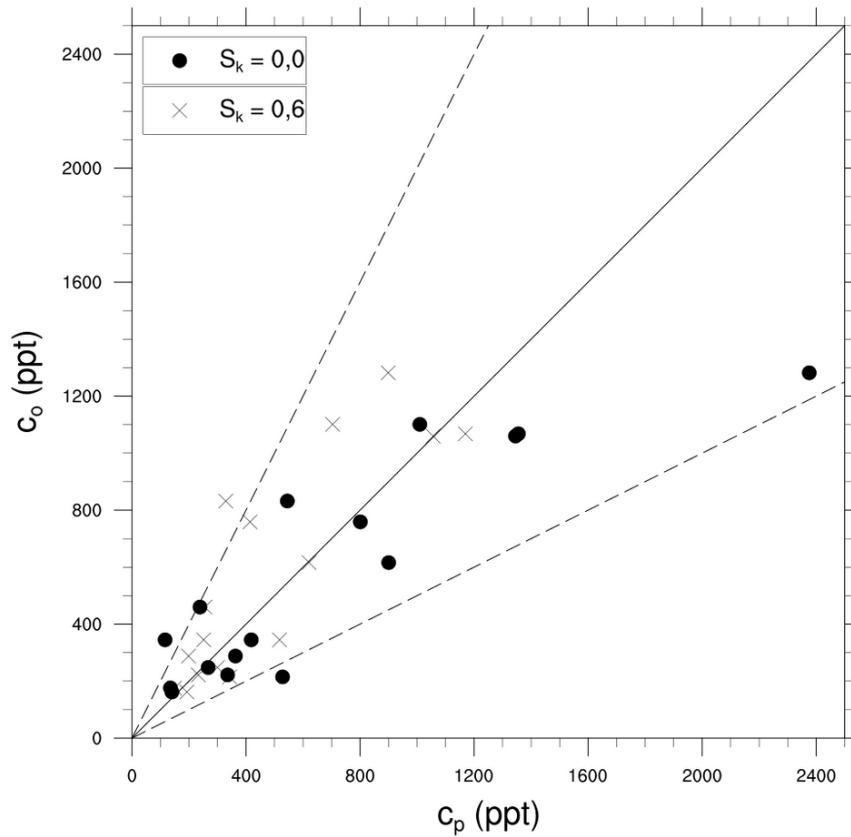


Figura 5.5: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento IIT-Delhi para  $S_k = 0,0$  e  $S_k = 0,6$  e  $v \neq 0$ .

## 5.2 Resultados considerando o experimento de Copenhagen

Inicialmente, na Tabela 5.4 mostra-se o comportamento dos resultados obtidos pelo modelo, representado pela equação (3.72), como uma função da soma dos autovalores  $N$ , da concentração de poluentes para a distância da fonte de  $1900\text{ m}$  para o experimento 1 de Copenhagen.

Tabela 5.4: Comportamento da concentração de poluente para o experimento 1 do experimento de Copenhagen, utilizando a equação (3.25), coeficientes de difusão propostos por Degrazia e o perfil de vento potência.

N	$S_k = 0,0$	$S_k = 0,6$
1	5,407713721811274	5,415549577671271
2	8,079598653486031	8,094241854236911
3	9,515867682907517	9,533113454572325
4	10,114733188218240	10,133058491795190
5	10,298447386935520	10,309989955321340
6	10,371552589582970	10,420741261775930
11	10,377096115138910	10,424786083363880
16	10,377088547934870	10,424716816292780
21	10,377088547914630	10,424716815990180
26	10,377088547914770	10,424520933832930
31	10,377088547913580	10,424520933833850

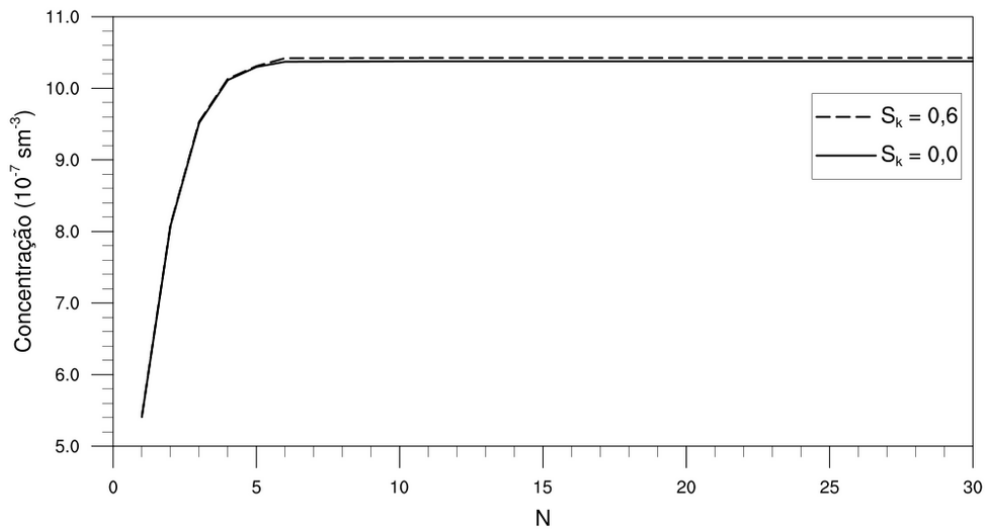


Figura 5.6: Convergência numérica da concentração de poluentes utilizando a equação (3.25), experimento 1 de Copenhagen, coeficientes de difusão propostos por Degrazia e perfil de vento potência.

Podemos observar da Figura 5.6, que para  $N = 30$  autovalores a convergência numérica do problema está garantida, além disso, a solução apresenta resultados similares, considerando o termo de assimetria ( $S_k = 0,6$ ) e não considerando o termo de assimetria ( $S_k = 0,0$ ).

A Figura 5.7 mostra a convergência da solução em função do número de autovalores, para duas distâncias da fonte. Similar ao experimento IIT-Delhi, quanto menor a distância da fonte, maior é a concentração de poluentes.

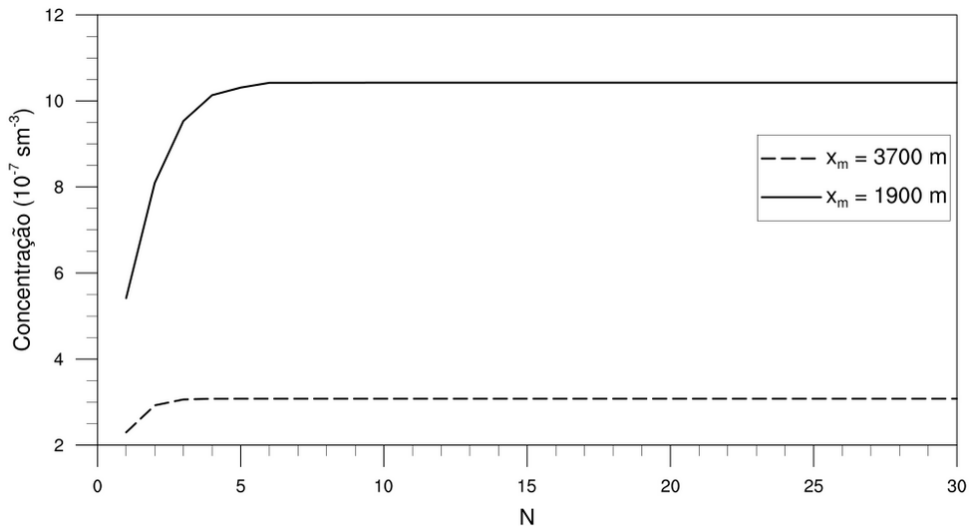


Figura 5.7: Convergência numérica da concentração de poluentes em função do número de autovalores  $N$ , para as distâncias da fonte de  $x_m = 1900\text{ m}$  e  $x_m = 3700\text{ m}$  para o experimento 1 de Copenhagen.

A Figura 5.8 mostra a convergência da solução ao longo do tempo. Como podemos observar, a solução apresenta um pico no começo da solução e depois fica homogênea.

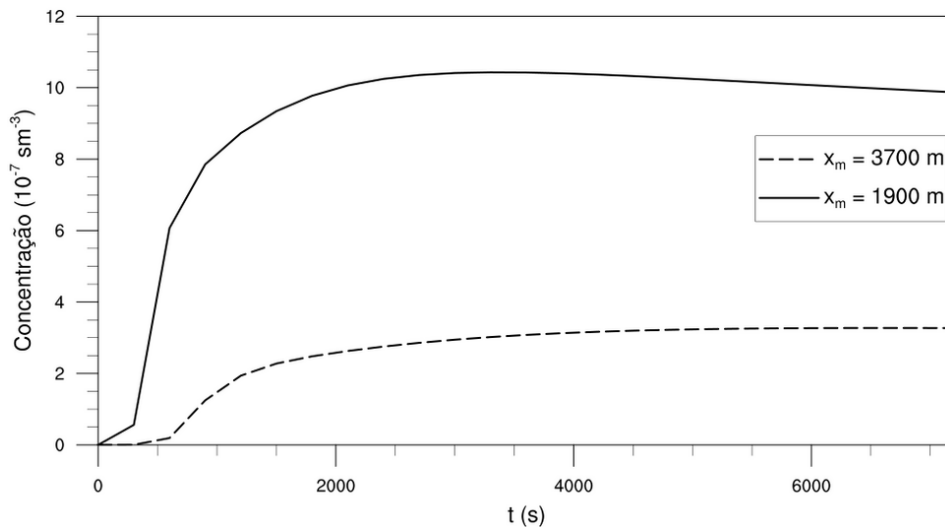


Figura 5.8: Convergência numérica da concentração de poluentes ao longo do tempo para o experimento 1 de Copenhagen e distância da fonte de  $x_m = 1900\text{ m}$  e  $x_m = 3700\text{ m}$ .

Como podemos observar, para  $t = 3600\text{ s}$  a solução já fica homogênea e nesse trabalho utilizamos o tempo igual a  $3600\text{ s}$ .

A Tabela 5.5 mostra as concentrações observadas e previstas para o experimento de Copenhagen para  $S_k = 0$  e  $S_k = 0,6$ .

A avaliação estatística considerando  $S_k = 0,0$  e  $S_k = 0,6$  para o experimento de Copenhagen e comparando com os dados do modelo 3D-GILTT simplificado (BUSKE et al., 2015b)

Tabela 5.5: Concentrações observadas e previstas para o experimento de Copenhagen ( $*10^{-7} sm^{-3}$ ).

$c_0$	$c_p(S_k = 0)$	$c_p(S_k = 0, 6)$
10,50	10,38	10,42
2,14	3,07	3,08
9,85	11,29	11,27
2,83	1,88	1,89
16,33	24,90	24,86
7,95	9,05	9,08
3,76	4,54	4,56
15,71	16,74	16,82
12,11	12,64	12,54
7,24	13,16	13,10
4,75	5,12	5,13
7,44	8,75	8,73
3,37	3,74	3,75
1,74	2,24	2,25
9,48	13,88	13,93
2,62	1,93	1,94
1,15	1,23	1,24
9,76	12,66	12,61
2,64	2,35	2,36
0,98	1,28	1,29
8,52	11,26	11,25
2,66	1,82	1,83
1,98	1,01	1,02

é apresentada na Tabela 5.6.

Tabela 5.6: Desempenho estatístico do modelo para o experimento de Copenhagen, não considerando ( $S_k = 0$ ) e considerando ( $S_k = 0, 6$ ) o termo de assimetria.

Simulação	$NMSE$	$COR$	$FAT2$	$FB$	$FS$
3D-GILTT com $S_k = 0$	0,14	0,96	1,00	0,18	0,31
3D-GILTT com $S_k = 0, 6$	0,14	0,96	1,00	0,18	0,31
3D-GILTT simplificado com $S_k = 0$	0,15	0,91	1,00	0,20	0,17
3D-GILTT simplificado com $S_k = 0, 6$	0,12	0,91	1,00	0,12	0,09

Os dados estatísticos do experimento de Copenhagen mostram que não tivemos uma melhora tão significativa quando consideramos no modelo o termo de assimetria.

A Figura 5.9 mostra o diagrama de espalhamento das concentrações observadas e previstas pelo presente modelo não considerando ( $S_k = 0, 0$ ) e considerando ( $S_k = 0, 6$ ) o termo de assimetria para o experimento de Copenhagen. Podemos observar dessas figuras que resultados similares são obtidos, mesmo quando consideramos o termo de assimetria no modelo. Cabe salientar que no experimento de Copenhagen, diferentemente do IIT-Delhi, os dados para a variável  $v$  do vento não estão disponíveis.

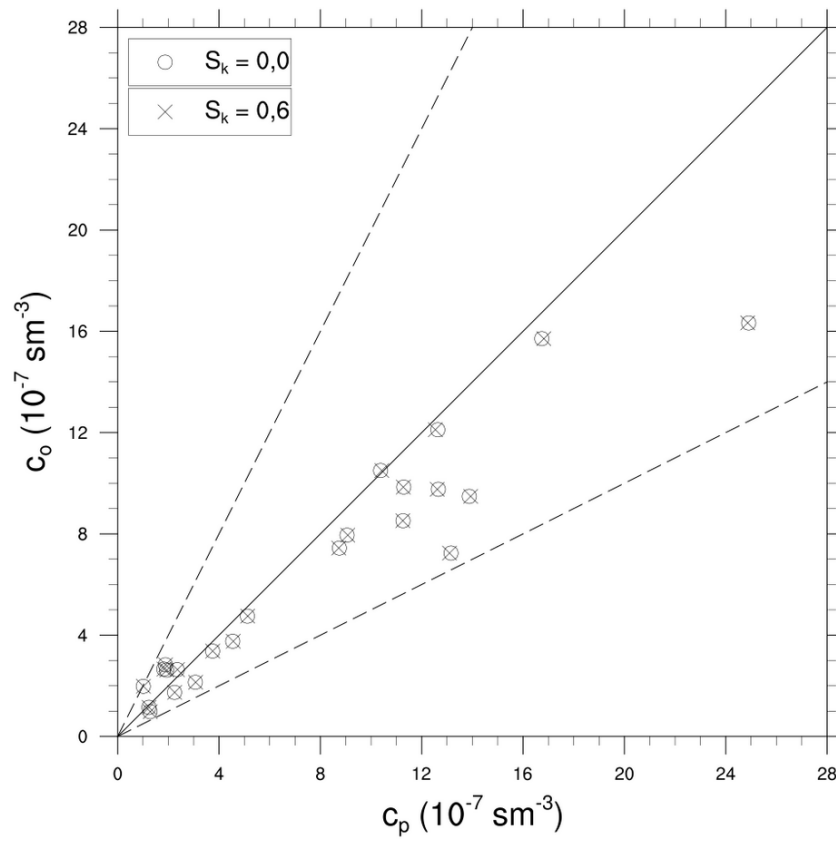


Figura 5.9: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento de Copenhague para  $S_k = 0,0$  e  $S_k = 0,6$ .

## 6 CONCLUSÕES

Os resultados foram obtidos considerando o termo de assimetria  $S_k = 0$  e  $S_k = 0,6$ . A concentração de poluentes é simulada de forma satisfatória através da modelagem proposta nesse trabalho, tanto para o experimento IIT-Delhi como para o experimento de Copenhagen.

A solução apresentada é a mais completa já obtida pelo método GILTT. Na solução são incorporados o termo de contragradiente e a difusão longitudinal, além de ser um modelo dependente do tempo.

Conclui-se que o gráfico da convergência em função do número de autovalores, considerando o termo de assimetria apresenta resultados similares quando não se considera o termo de assimetria.

A solução apresenta um pico no tempo inicial e depois fica homogênea, indicando que não precisamos utilizar um tempo muito grande para realizar as simulações da concentração de poluentes.

Os resultados melhoram pouco quando foram inseridas mais informações no modelo. Um modelo completo como o que apresentamos nesse trabalho não necessariamente vai apresentar melhores resultados, pois além do tempo de simulação, podem aparecer complicações por se ter mais termos e mais física envolvida e ainda pode-se cometer mais erros na modelagem.

## REFERÊNCIAS

- ABATE, J.; VALKÓ, P. P. Multi-precision Laplace transform inversion. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v.60, p.979–993, 2004.
- ALVES, I. P. et al. Derivation of an eddy diffusivity coefficient on source distance for a shear dominated planetary boundary layer. **Physica. A (Print)**, v.1, p.1–10, 2012.
- ANFOSSI, D. **Dispersão lagrangeana na camada limite planetária**. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2005.
- ARYA, P. A review of the theoretical bases of short-range atmospheric dispersion and air quality models. In **Indian National Science Academic**, v.69A, p.709–724, 2003.
- ARYA, S. P. **Air pollution meteorology and dispersion**. New York, USA: Oxford University Press, 1999.
- BLACKADAR, A. K. **Turbulence and diffusion in the atmosphere**: lectures in Environmental Sciences. Heidelberg: Springer-Verlag, 1997.
- BULIGON, L. **Solução da Equação de Difusão Unidimensional Transiente para o Estudo da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. 2004. Mestrado em Matemática Aplicada — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- BULIGON, L.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Uma solução semi-analítica da dispersão de poluentes com a equação do telégrafo e fluxo contra-gradiente. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.21, p.77–85, 2006.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Numerical Analysis**. Canada: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2010. 877p.
- BUSKE, D. **Solução GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana**. 2008. Tese de Doutorado — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- BUSKE, D. et al. Modelo analítico tridimensional de dispersão de poluentes na camada limite atmosférica. **Ciência e Natura**, v.1, p.115–118, 2011.



BUSKE, D. et al. A closed form solution for pollutant dispersion in atmosphere considering nonlocal closure of the turbulent diffusion. **WIT Transactions on Ecology and The Environment**, v.1, p.59–69, 2012.

BUSKE, D. et al. **Pollutant Dispersion in the Atmosphere: A Solution Considering Non-local Closure of Turbulent Diffusion**. Birkhauser, Basel: Integral Methods in Science and Engineering: Theoretical and Computational Advances. Organized by: C.Constanda, A.Kirsch., 2015. p.99–110.

BUSKE, D. et al. **Pollutant Dispersion in the Atmosphere: A Solution Considering Non-local Closure of Turbulent Diffusion**. Birkhauser, Basel: Integral Methods in Science and Engineering: Theoretical and Computational Advances. Organized by: C.Constanda, A.Kirsch., 2015. p.99–110.

BUSKE, D. et al. A new segmented plume approach for pollutant dispersion modelling. **International Journal of Development Research**, v.10, p.42644–42653, 2020.

BUSKE, D.; QUADROS, R.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Simulação analítica da dispersão de poluentes atmosféricos tridimensional. **Ciência e Natura**, v.1, p.29–32, 2009.

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

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; BODMANN, B. **An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; S. Potapenko., 2008. p.27–36.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.41, p.5496–5501, 2007a.

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

BUSKE, D.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. **An Analytical Solution for the Transient Two-dimensional Advective-Diffusion Equation with Non-Fickian Closure in Cartesian Geometry by the General Integral Transform Technique**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; M.E. Pèrez., 2010. v.2, p.33–40.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; SEGATTO, C.; QUADROS, R. **A general analytical solution of the advection-diffusion equation for fickian closure**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanta; P. Harris, 2011. p.25–34.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T. de; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. Analytical Solution for the Transient Two-Dimensional Advection-Diffusion Equation Considering Nonlocal Closure of the Turbulent Diffusion. **Turbulence, Heat and Mass Transfer**, p.1–9, 2006.

BUSKE, D.; VILHENA, M.; TIRABASSI, T.; BODMANN, B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. **Journal of Environmental Protection**, v.3, p.1124–1134, 2012b.

CATALDI, M.; MARGALHO, M.; VELLOSO, M.; PIMENTEL, L. Estudo do transporte de poluentes na região da camada de superfície sob diversas condições de estabilidade atmosférica. **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2000.

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

COSTA, C. **Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**. 2004. Mestrado em Matemática Aplicada Ambiental — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

COSTA, C.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Solução da equação de difusão-advectação com o termo de contra-gradiente no fechamento da turbulência para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera. **Ciência e Natura**, v.1, p.111–114, 2003.

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

COSTA, C. P.; RUI, K. Fechamento Não-Local da Equação de Advecção-Difusão Utilizando Diferentes Métodos de Inversão Numérica para a Transformada de Laplace. **Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics**, v.5, p.1–7, 2017.

COSTA, C. P.; RUI, K.; PÉREZ-FERNÁNDEZ, L. D. Different Numerical Inversion Algorithms of the Laplace Transform for the Solution of the Advection-Diffusion Equation with Non-local Closure in Air Pollution Modeling. **Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional**, v.19, p.43–48, 2018.

- COSTA, C.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. **A closed-form formulation for pollutant dispersion in the atmosphere**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: computational Methods, Organized by: C. Constanda; M.E. Pèrez., 2010. v.2, p.141–150.
- COSTA, C.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M.; MOREIRA, D. A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere. **Journal of Engineering Mathematics**, v.74, p.159–173, 2012.
- COSTA, C.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.40, p.5659–5669, 2006.
- COTTA, R. **Integral transforms in computational heat and fluid flow**. Boca Raton, Flórida: CRC Press, 1993.
- COTTA, R.; BARROS, F. Integral transforms for three-dimensional steady turbulent dispersion in rivers and channels. **Applied Mathematical Modelling**, v.31, p.2719–2732, 2007.
- COTTA, R.; MIKHAYLOV, M. **Heat conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. England: Baffins Lane, Chichester, England: John Wiley & Sons, 1997.
- DEARDOFF, J. M. The countergradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.23, p.503–506, 1966.
- DEARDOFF, J. M. Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.29, p.91–115, 1972.
- DEARDOFF, 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. et al. Comparison between an integral and algebraic formulation for the eddy diffusivity using the Copenhagen experimental dataset. **Il Nuovo Cimento**, v.25C, p.207–218, 2002.
- DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, p.1233–1240, 2001.
- DEGRAZIA, G. et al. Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.34, p.3575–3583, 2000.
- DEGRAZIA, G.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, v.40(7), p.1233–1240, 2001.

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

ERTEL, H. Der vertikale turbulenz-wärmestrom in der atmosphäre. **Meteorologische Zeitschrift**, v.59, p.250–253, 1942.

FAVERO, C. **Efeitos estocásticos do meandro na dispersão de poluentes na dispersão de poluentes na camada limite planetária em condições de vento fraco**. 2020. Mestrado em Modelagem Matemática — Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

FAVERO, C. et al. Modelo de pluma segmento com velocidades estocásticas para dispersão atmosférica em condições de vento fraco. **Ciência e Natura**, v.42, p.e11, 2020.

FERREIRA NETO, P. **Desenvolvimento de um modelo de dispersão de poluentes para o estudo de impacto ambiental em fontes isoladas**. 2003. Mestrado em Engenharia Ambiental — Universidade Luterana do Brasil, Canoas.

FIEDLER, B. H.; MOENG, C. H. A practical integral closure model for mean vertical transport of a scalar in a convective boundary layer. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.42(4), p.359–363, 1985.

GOLUB, G. H.; LOAN, C. F. V. **Matrix computations**. London: The Johns Hopkins University Press, 1996. 694p.

GONCALVES, G.; BUSKE, D.; QUADROS, R.; WEYMAR, G. A new approach to solve the time-dependent three-dimensional advection-diffusion equation applied to model air pollution dispersion in the planetary boundary layer. **International Journal of Development research**, v.8, p.20535–20543, 2018.

GRYNING, S. **Elevated source SF<sub>6</sub> - tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**. Roskilde, Denmark: Risoe National Laboratory, 1981. (RISOE-R-446).

GRYNING, S.; 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.

GUERRERO, J. et al. A unified analytical solution of the steady- state atmospheric diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.55, p.201–212, 2012.

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

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.

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

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

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

MANGIA, C. et al. Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.67–76, 2002.

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

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

MOREIRA, D. et al. 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**, 2004.

MOREIRA, D. et al. Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. **Water, Air and Soil Pollution**, v.177, p.411–439, 2006.

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

MOREIRA, D. M.; ALBUQUERQUE, T. T. A. Solution of the Atmospheric Diffusion Equation with Longitudinal Wind Speed Depending on Source Distance. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.31, p.202–210, 2016.

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

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

- MOREIRA, D.; VILHENA, M.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, p.1–17, 2009.
- MOREIRA, D.; VILHENA, M.; CARVALHO, J.; DEGRAZIA, G. Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion. **Environmental Modelling and Software**, v.20 (10), p.1347–1351, 2004.
- MOREIRA, D.; VILHENA, M.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, C. A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant. **Ecological Modelling**, v.189 (3-4), p.413–424, 2005.
- MOURA, A.; VILHENA, M.; DEGRAZIA, G. Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável. **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 1995.
- OLESEN, H. R.; LARSEN, S. E.; HOJSTRUP, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.29, p.285–312, 1984.
- PANOFSKY, H. A.; DUTTON, J. A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1984.
- PANTOJA, P. H. B. **Uma solução da equação difusão-advecção com o termo contra-gradiente**. 2014. Mestrado em Engenharia Ambiental — Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória.
- PRIESTLY, C. H. B.; SWINBANK, W. C. Vertical transport of heat by turbulence in the atmosphere. **Proceedings of the Royal Society of London**, p.543–561, 1947.
- RIBAS, D. **Simulação da Equação de Advecção-Difusão Estocástica para Simular a Concentração e Deposição de Amônia em Confinamento Bovino**. 2021. Mestrado em Modelagem Matemática — Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.
- RIBEIRO, M.; CATALDI, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Estudo da dispersão de poluentes na atmosfera via transformação integral. **Proceedings do XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2000.
- ROBSON, R. E.; MAYOCCHI, C. L. A simple model of countergradient flow. **Physics of Fluids**, v.6, p.1952–1964, 1994.
- ROODE, S. R. de; JONKER, H. J. J.; DUYNKERKE, P. G.; 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.

- RUI, K. **Influência da Velocidade de Deposição no Solo na Modelagem Multidimensional da Dispersão de Poluentes Atmosféricos**. 2016. Mestrado em Modelagem Matemática — Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.
- SEINFELD, J.; PANDIS, S. **Atmospheric chemistry and physics of air pollution**. New York: John Wiley & Sons, 1997.
- SHARAN, M. et al. A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions. **Atmospheric Environment**, v.30, p.1209–1220, 1996.
- 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, n.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.
- SHENDEA, O. B.; MANI, A. A Nonlocal Extension of Dispersion Analysis for Closures in Reactive Flows. **Physics - Fluid Dynamics**, p.1–8, 2022.
- SILVEIRA, V. C. **Simulação tridimensional da dispersão de poluentes em um modelo Euleriano levando em conta o efeito do meandro do vento**. 2017. Doutorado em Meteorologia — Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria.
- STORCH, R.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo euleriano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos. **Ciência e Natura**, v.1, p.103–106, 2003.
- STROUD, A. H.; SECREST, D. **Gaussian quadrature formulas**. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice Hall Inc., 1966.
- STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht, Holanda: Kluwer Academic Publishers, 1988.
- STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht, Holanda: Kluwer Academic Publishers, 1988.
- TADEO, L. **Simulação transiente unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera considerando o fechamento não local da turbulência**. 2021. Mestrado em Modelagem Matemática — Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.
- TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; MOREIRA, D.; VILHENA, M. A two-dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v.47, p.2096–2104, 2008.

- TIRABASSI, T. et al. Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection-diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.43, p.2221–2227, 2009.
- ULKE, A. G. New turbulent parameterisation for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.34, p.1029–1042, 2000.
- VALKÓ, P. P.; ABATE, J. Comparison of sequence accelerators for the Gaver method of numerical Laplace transform inversion. **Computers and Mathematics with Application**, v.48, p.629–636, 2004.
- VAN DOP, H.; VERVER, G. Countergradient transport revisited. **Journal of Atmospheric Science**, v.58, p.2240–2247, 2001.
- VELLOSO, M.; STORCH, R.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Estudo do transporte de poluentes na camada limite atmosférica a partir de dois modelos algébricos para o coeficiente de difusão turbulenta e transformação integral. **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2004.
- VENZKE, C. **Simulação da dispersão de poluentes considerando o termo de contra-gradiente na CLC**. 2015. Mestrado em Modelagem Matemática — Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.
- VILHENA, M.; BUSKE, D.; DEGRAZIA, G.; QUADROS, R. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. **Physics A: Statistical Mechanics and its Applications**, v.391, p.2576–2584, 2012.
- VILHENA, M.; COSTA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. A semi-analytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Atmospheric Research**, v.90, p.63–69, 2008.
- VILHENA, M. et al. An analytical air pollution model: Development and evaluation. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315–320, 1998.
- WEYMAR, G.; BUSKE, D.; QUADROS, R.; GONCALVES, G. Application of a new approach in an analytical model to simulate the dispersion of a radioactive pollutant. **International Journal of Development Research**, v.8, p.24738–24738, 2018.
- WORTMANN, S.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, p.2171–2178, 2005.
- WYNGAARD, J. C.; BROST, R. A. Top-down bottom-up diffusion of a scalar in the convective boundary layer. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.41, p.102–112, 1984.



WYNGAARD, J. C.; WEIL, J. C. Transport asymmetry in skewed turbulence. **Physics Fluids A**, v.3, p.155–162, 1991.

ZILITINKEVICH, S. S.; GRYANIK, V. M.; LYKOSOV, V. N.; MIRONOV, D. V. Third-order transport and nonlocal turbulence closures for convective boundary layers. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.56, p.3463–3477, 1999.

## ANEXO A CONDIÇÃO DE FONTE

Aplicando o método 3D-GILTT na condição de fonte, substituindo a equação (3.30) na (3.10d) e aplicando o operador da (3.35)

$$\begin{aligned} & \bar{u} \sum_{n=0}^N \bar{c}_n(0, z) \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy \\ &= Q \delta(z - H_s) \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \delta(y - y_o) \zeta_m(y) dy \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Por definição

$$\int_a^b \delta(x - x_o) f(x) dx = f(x_o) \quad (\text{A.2})$$

sendo  $a < x_o < b$ ,  $f(x)$  contínua em  $x_o$ . Portanto

$$\int_0^{L_y} \delta(y - y_o) \zeta_m(y) dy = \zeta_m(y_o) \quad (\text{A.3})$$

Substituindo a equação (3.39) e a equação (A.3) na equação (A.1)

$$\bar{u} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i}(0) \varsigma_i(z) \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy = \frac{Q \zeta_i(y_o)}{N_m^{\frac{1}{2}}} \delta(z - H_s) \quad (\text{A.4})$$

Substituindo a equação (3.35) na equação (A.4)

$$\begin{aligned} & \bar{u} \sum_{i=0}^I \bar{c}_{n,i}(0) \int_0^h \varsigma_i(z) \varsigma_j(z) dz \frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} \zeta_n(y) \zeta_m(y) dy \\ &= \frac{Q \zeta_i(y_o)}{N_m^{\frac{1}{2}}} \int_0^h \delta(z - H_s) \varsigma_j(z) dz \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Da equação (A.2) conclui-se que:

$$\int_0^h \delta(z - H_s) \varsigma_j(z) dz = \varsigma_j(H_s)$$

Com base na equação (A.5) chegamos na seguinte condição de fonte

$$Y(0) = \frac{Q\zeta_i(y_o)\varsigma_j(H_s)}{\bar{u}\sqrt{L_y}h} \quad \text{para } ((i = j) \text{ e } (m = n)) = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$Y(0) = \frac{Q\zeta_i(y_o)\varsigma_j(H_s)}{\bar{u}\sqrt{\frac{L_y}{2} \frac{h}{2}}} \quad \text{para } ((i = j) \text{ e } (m = n)) \neq 0 \quad (\text{A.7})$$

sendo  $Y(0)$  o vetor coluna cujas componentes são  $\{\overline{c_{n,i}}(0)\}$ .

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes considerando o fechamento não local da turbulência**  
– Viliam Cardoso da Silveira



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS**

Instituto de Física e Matemática

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática



Dissertação

**Simulação tridimensional da dispersão de poluentes considerando o fechamento não local da turbulência**

**VILIAM CARDOSO DA SILVEIRA**

Pelotas, 2022