

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Cecilia Perobelli Ferreira

**EMPREGO DE MODELOS EULERIANO NO ESTUDO DA
DISPERSÃO DE CONTAMINANTES NA CAMADA LIMITE
PLANETÁRIA**

Santa Maria, RS
2016

PPGFI's / UFSM, RS

FERRREIRA, C. P.

Doutora

2016

Cecilia Perobelli Ferreira

**EMPREGO DE MODELOS EULERIANO NO ESTUDO DA DISPERSÃO
DE CONTAMINANTES NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Áreas clássicas da fenomenologia e suas aplicações, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Doutora em Física**.

ORIENTADOR: Prof. Gervásio Annes Degrazia

COORIENTADORA: Prof.^a Silvana Maldaner

Santa Maria, RS
2016

Ficha catalográfica elaborada através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Central da UFSM, com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Perobelli Ferreira, Cecilia

Emprego de modelos euleriano no estudo da dispersão de contaminantes na camada limite planetária / Cecilia Perobelli Ferreira.- 2016.

93 p.; 30 cm

Orientador: Gervásio Annes Degrazia

Coorientadora: Silvana Maldaner

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Maria, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Programa de Pós-Graduação em Educação Física, RS, 2016

1. Emprego de um coeficiente de difusão para simular a dispersão de contaminantes a partir de uma solução numérica para a equação de difusão-advecção I. Annes Degrazia, Gervásio II. Maldaner, Silvana III. Título.

©2016

Todos os direitos autorais reservados a Cecilia Perobelli Ferreira. A reprodução de partes ou do todo deste trabalho só poderá ser feita mediante a citação da fonte.

Endereço: General Neto, 551/707

Fone (0xx) (55) 981173043; End. Eletr.: cecilia.perobelliferreira@gmail.com

Cecilia Perobelli Ferreira

**EMPREGO DE MODELOS EULERIANO NO ESTUDO DA DISPERSÃO
DE CONTAMINANTES NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Áreas clássicas da fenomenologia e suas aplicações, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de **Doutora em Física.**

Aprovado em 16 de dezembro de 2016:

Gervásio Annes Degrazia, PhD. (UFSM)
(Presidente/Orientador)

Silvana Maldaner, Dra. (UFSM)
(Coorientadora)

Andréa Ucker Timm, Dra. (FSG)

Virnei Silva Moreira, Dr. (UNIPAMPA/Itaqui)

Cláudio Alberto Teichrieb, Dr. (UFSM)

Luís Gustavo Nogueira Martins, Dr. (UFSM)
Santa Maria, RS

2016

RESUMO

EMPREGO DE MODELOS EULERIANO NO ESTUDO DA DISPERSÃO DE CONTAMINANTES NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

AUTOR: Cecília Perobelli Ferreira
ORIENTADOR: Gervásio Annes Degrazia
COORIENTADORA: Silvana Maldaner

Os modelos de transporte e dispersão de contaminantes na atmosfera são ferramentas matemáticas extremamente úteis na previsão e avaliação da concentração de poluentes emitidos por diferentes fontes poluidoras. Estes modelos devem descrever basicamente a trajetória média de viagem dos contaminantes e a sua difusão provocada pelo efeito da turbulência presente na camada limite planetária (CLP). Neste trabalho é empregado o modelo euleriano para estudar a dispersão de contaminantes. Neste modelo a dispersão de contaminantes será considerada em um ponto fixo no espaço e a sua magnitude será proporcional ao gradiente local da concentração do material disperso. Nesta investigação emprega-se o modelo de difusão estatístico de Taylor e os espectros de energia turbulentos para derivar os coeficientes de difusão turbulentos em diferentes condições de estabilidade da CLP. Estas parametrizações de K são substituídas na equação do modelo Euleriano para simular e reproduzir as concentrações observadas de contaminantes. Os resultados das simulações mostram que o modelo Euleriano, resolvido pela técnica de solução semi-analítica GILTT e aplicado a condições estáveis, nas quais a turbulência é gerada pelo cisalhamento do vento, apresenta concentrações simuladas que reproduzem de um modo satisfatório o campo de concentração de contaminantes observados no experimento Hanford. Adicionalmente, o modelo de difusão- advecção resolvido numericamente empregando o método de diferenças finitas, gerou concentrações que reproduziram razoavelmente bem as concentrações observadas no experimento de Copenhagen.

Palavras-chave: modelo Euleriano, coeficiente de difusão, difusão-advecção

ABSTRACT

EMPLOYING OF EULERIAN MODELS IN THE STUDY OF CONTAMINANTS DISPERSION IN THE BOUNDARY LAYER

AUTHOR: Cecilia Perobelli Ferreira

ADVISOR: Gervásio Annes Degrazia

CO-ADVISOR: Silvana Maldaner

The transport models and dispersion of contaminants in the atmosphere are mathematical tools extremely useful at prediction and evaluation of concentration of pollutants issued by different polluting sources. These models should describe basically the trajectory average travel of contaminants and it is diffusion caused by effect of the turbulence present in the planetary boundary layer. In this work the Eulerian models used to study the dispersion of contaminants. In these models the dispersion of contaminants will be considered in a fixed point in space and its magnitude will be proportional to the local concentration gradient of the dispersed material. In this investigation is employed the Taylor's diffusion model and turbulent energy spectra to derive the turbulent diffusion coefficients in different stability conditions of planetary boundary layer. These parametrizations of K are substituted in equation of the Eulerian model to simulate and reproduce the observed concentrations of pollutants. The results of the simulations show that the Eulerian model, solved by the semi-analytical solution GILLT and applied to stable conditions in which the turbulence is generated by wind shear, presents concentrations that reproduce satisfactorily the concentration of contaminants observed in the Hanford experiment. In addition, the diffusion-advection model solved numerically using the finite difference method, generated concentrations which reproduced reasonably well the concentrations observed in the Copenhagen experiment.

Keywords: Eulerian model, eddy diffusivity, diffusion-advection

SUMÁRIO

1	APRESENTAÇÃO	6
1.1	INTRODUÇÃO	6
1.2	OBJETIVO GERAL	7
1.2.1	Objetivo específico	7
1.3	ESTRUTURA DO TRABALHO	8
1.4	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	10
1.4.1	Camada limite planetária	10
1.4.1.1	<i>Camada limite convectiva</i>	10
1.4.1.2	<i>Camada limite estável</i>	11
1.4.1.3	<i>Camada limite residual</i>	11
1.4.1.4	<i>Camada limite superficial</i>	11
1.4.2	Teoria da similaridade	12
1.4.2.1	<i>A teoria de similaridade de Monin-Obukhov</i>	12
1.4.2.2	<i>A Teoria da similaridade local</i>	12
1.5	REVISÃO TEÓRICA	14
1.5.1	Turbulência e suas características espectrais	14
1.5.2	Espectros de velocidade unidimensionais turbulentos	15
1.5.3	Parâmetro de dispersão para uma camada limite estável dominada por cisalhamento	18
1.5.4	Derivação do coeficiente de difusão turbulenta para a camada limite estável	19
1.5.5	Coeficiente de difusão turbulenta assintótico para a camada limite estável	20
1.5.6	Parâmetro de dispersão para a camada limite convectiva	21
1.5.7	Derivação do coeficiente de difusão turbulenta para a camada limite convectiva	23
1.5.8	Coeficiente de difusão turbulenta assintótico para a camada limite convectiva	24
1.5.9	Modelo Euleriano	25
1.5.10	Índices Estatísticos	27
1.6	METODOLOGIA	28
1.6.1	Artigo (1) – Emprego do coeficiente de difusividade para simular a dispersão de contaminantes para uma camada limite planetária estável dominada por cisalhamento.	28
1.6.2	Artigo (2) - Emprego de um coeficiente de difusão para simular a dispersão de contaminantes a partir de uma solução numérica para a equação de difusão-advecção.	30
2	ARTIGO 1	33
2.1	INTRODUCTION	33
2.1.1	Derivation of eddy diffusivities	34
2.1.2	Test of the proposed parameterization employing the Hanford observed concentration data	35
2.2	CONCLUSION	38
	REFERENCES	39
3	ARTIGO 2	41

3.1	INTRODUÇÃO	41
3.1.1	Derivação do coeficiente de difusão	42
3.1.2	Coeficiente de difusão assintótico	44
3.1.3	Modelo Euleriano	45
3.1.4	Simulação da dispersão de contaminantes empregando uma solução numérica para a equação de advecção-difusão	46
3.1.5	Método tridimensional de passos fracionados	47
3.1.6	Considerações do método LOD	49
3.1.7	Método numérico	49
3.1.8	Validação do modelo de dispersão Euleriano	53
3.1.9	Experimento de dispersão	53
3.1.10	Índices Estatísticos	55
3.2	RESULTADOS E DISCUSSÕES	56
3.3	CONCLUSÃO	59
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	61
4	DISCUSSÃO	64
5	CONCLUSÃO	66
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	68
	APÊNDICE A – PARÂMETRO DE DISPERSÃO PARA UMA CAMADA LIMITE ESTÁVEL DOMINANDA POR CISALHAMENTO	72
	APÊNDICE B – PARÂMETRO DE DIFUSÃO PARA UMA CAMADA LIMITE CONVECTIVA	79
	APÊNDICE C – MÉTODO SPLINE CÚBICO	86
	APÊNDICE D – FILTRO	88
	APÊNDICE E – CRANCK NICOLSON	90

1 APRESENTAÇÃO

1.1 INTRODUÇÃO

Os modelos de transporte e dispersão de contaminantes na atmosfera, são ferramentas matemáticas, extremamente úteis, na predição e avaliação da concentração de poluentes, emitidos por diferentes fontes poluidoras. Estes modelos devem descrever basicamente a trajetória média de viagem dos contaminantes e a sua difusão provocada pelo efeito da turbulência presente na camada limite planetária (CLP). Em geral, os modelos de dispersão são classificados em modelos Eulerianos e Lagrangianos. Nos modelos Eulerianos, considera-se o movimento do fluido em relação a um sistema de referência espacial fixo. Tais modelos são mais adequados para descrever problemas complexos como, por exemplo, a dispersão e o transporte de poluentes não inertes em topografias não homogêneas. Estes modelos Eulerianos são baseados na equação de conservação da massa das diferentes espécies químicas poluentes. Diferente dos modelos Eulerianos, os modelos Lagrangianos adotam um sistema de referência que segue os movimentos das partículas de fluido na atmosfera (DEGRAZIA et al., 2009). Particularmente, os modelos Lagrangianos são baseados na equação de Langevin e na equação de Fokker-Planck (ZANNETTI, 2003).

No presente estudo considera-se um modelo de difusão Euleriano no qual a dispersão de contaminantes será considerada em um ponto fixo no espaço e a sua magnitude será proporcional ao gradiente local da concentração do material disperso. Neste caso, a parametrização dos fluxos turbulentos de concentração, os quais precisam ser conhecidos e que estão presentes na formação da equação principal do modelo, é proporcional a um coeficiente de difusão multiplicado pelo gradiente de concentração. O coeficiente de difusão (K) deve descrever as propriedades difusivas associadas aos turbilhões mais energéticos do campo turbulento e, portanto, deve assumir características físicas diversas para os diferentes tempos de evolução da camada limite planetária. Como consequência dos argumentos expostos acima, os coeficientes de difusão podem ser derivados a partir dos espectros observados de energia turbulenta na Camada Limite Planetária. Estes espectros, escritos em uma formulação analítica que reproduzem os espectros observados, contém as escalas espaciais e temporais dos turbilhões mais energéticos. Adicionalmente, tais espectros turbulentos de energia descrevem de um modo natural o caráter não homogêneo da turbulência atmosférica.

A investigação da dispersão e do transporte de poluentes na camada limite planetária é um fator importante em problemas que envolvem a qualidade do ar. A necessidade de estudar e entender os processos de dispersão atmosférica, no qual é possível prever as consequências de um possível impacto ambiental, tornou-se mais constante no meio aca-

dêmico, seja por vias de soluções numéricas ou analíticas. Sendo assim, admite-se que essa necessidade de reproduzir novas soluções está relacionado ao desenvolvimento de novos modelos, que tem o intuito de aumentar a confiabilidade das simulações, ou seja, diminuir o grau de incerteza dos modelos que já foram desenvolvidos e empregados na literatura. Dessa forma, ao desenvolver modelos novos, sejam analíticos ou numéricos, espera-se que seja possível calcular as incertezas já existentes.

As soluções, a partir de métodos numéricos, permitem-nos obter soluções mais aproximadas das equações de difusão atmosférica, ou seja, com menos restrições que as soluções analíticas. Em geral, para obter essas soluções, aplica-se três outros métodos: método de diferenças finitas, método de elementos finitos e método de elementos de contorno, no qual sabe-se que, para esse emprego, considera-se as condições de contorno e os valores iniciais.

No entanto, a busca por soluções analíticas para problemas de dispersão ainda é uma das principais direções das pesquisas na área de dispersão atmosférica, estas levam em conta explicitamente todos os parâmetros de um problema, de modo que suas influências podem ser facilmente investigadas e assim obtém-se o comportamento assintótico da solução. Uma solução analítica também pode ser usada para checar métodos numéricos.

1.2 OBJETIVO GERAL

O objetivo desse trabalho é compreender o processo de dispersão e o transporte de contaminantes. Para esse estudo será empregado o modelo de difusão estatístico de Taylor e os espectros de energia turbulentos para derivar os coeficientes de difusão turbulentos na camada limite planetária. Estas parametrizações do coeficiente de difusão, K_α , serão empregadas na equação do modelo de dispersão Euleriano, com a finalidade de simular e reproduzir as concentrações observadas de contaminantes em condições estáveis e moderadamente convectivas.

1.2.1 Objetivo específico

A motivação desse trabalho está no desenvolvimento do mesmo que será feito em dois momentos:

No primeiro momento, será utilizado um modelo Euleriano semi-analítico (*GILTT-Generalized Integral Laplace Transform Technique*), no qual, para a validação, será utilizado o experimento clássico de Hanford.

- Derivar o parâmetro de dispersão e o coeficiente de difusividade para a camada limite planetária estável;

- Simular a dispersão de contaminantes em condições estáveis no modelo Euleriano semi-analítico a partir dos dados experimentais observados no experimento de Hanford descrito por Doran e Horst (1985);
- Avaliar o desempenho do modelo Euleriano a partir de uma análise estatística elaborada por Hanna (1989).

No segundo momento, será utilizado um modelo Euleriano numérico (*LOD-Locally One-Dimensional* (Método Localmente unidimensional), no qual será validado com o experimento clássico de Copenhagen.

- Derivar o parâmetro de dispersão e o coeficiente de difusividade para a camada limite planetária convectiva;
- Desenvolver o modelo de dispersão numérico Euleriano, LOD, em uma nova linguagem computacional,
 - Diminuir o tempo computacional das simulações;
 - Tornar acessível o desenvolvimento do método numérico.
- Simular e reproduzir as concentrações observadas do experimento de Copenhagen utilizando o novo modelo de dispersão numérico Euleriano.
- Avaliar o desempenho do modelo Euleriano a partir de uma análise estatística elaborada por Hanna (1989)

1.3 ESTRUTURA DO TRABALHO

Este trabalho está dividido em cinco capítulos e a apresentação dos seus resultados será realizada no formato de artigos.

No capítulo 1 contém uma apresentação. Nesta estão inclusos as seções; de introdução aos assuntos que serão abordados durante o trabalho, a seção dos objetivos do presente trabalho seguido de objetivos específicos, a seção de fundamentação teórica que aborda as principais características da camada limite planetária e dos processos de dispersão de contaminantes na atmosfera e a seção de metodologia que irá descrever brevemente o desenvolvimento dos modelos utilizados no trabalho e que serão retomados posteriormente pelos capítulos 2 e 3.

Nos capítulos 2 e 3 serão apresentados dois resultados relacionados a dispersão atmosférica, para melhor entendimento será apresentado a seguir um breve resumo.

O capítulo 2 (Artigo 1) refere-se à dispersão de contaminantes em condições estáveis. Nesta abordagem, uma nova expressão para o parâmetro de dispersão em uma camada limite planetária dominada por cisalhamento, é derivada. Para esse trabalho emprega-se o modelo de difusão estatístico e o espectro de energia turbulento. Os resultados dessa formulação são descritos em termos da teoria da similaridade local. Essa expressão para o parâmetro de dispersão depende das variáveis meteorológicas que descrevem a camada limite planetária estável. Além disso, é proposto um coeficiente de difusividade para descrever a dispersão na camada limite planetária estável. Este coeficiente de difusão, K_α , será utilizado em um Modelo de Dispersão Euleriano, que é resolvido pela técnicas semi-analítica GILTT-(*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) e aplicado em condições estáveis. Para simular as medidas de concentrações, observadas no modelo Euleriano, serão utilizados os dados do experimento clássico de Hanford descrito por Doran e Horst (1985). A motivação desse estudo está na dificuldade em simular a dispersão de contaminantes em condições estáveis no camada limite planetária. Portanto, para essa simulação, a parametrização para um parâmetro de dispersão e um coeficiente de difusividade para a camada limite planetária estável, são derivados.

No capítulo 3 (Artigo 2) será analisado o desenvolvimento de um modelo numérico de dispersão Euleriano para estudar a dispersão de contaminantes em uma camada limite convectiva. Para essa análise será, empregado o modelo de difusão estatístico de Taylor e o espectro de energia turbulento para derivar os coeficientes de difusão turbulentos em diferentes condições de estabilidade da camada limite planetária. O coeficiente de difusão será empregado na equação do modelo Euleriano e será simulado, e reproduzido as concentrações observadas de contaminantes. O modelo de dispersão numérico Euleriano utilizado nesse momento do trabalho será, o Método tridimensional de passos fracionados.

A técnica geral desse método consiste em separar um conjunto de equações dependentes do tempo, cada uma localmente unidimensional (LOD). Para a solução dessa técnica, é necessário escrever a equação de conservação como uma soma de operadores diferenciais Advectivos-Difusivos e posteriormente a solução numérica do método é dividida em três passos: advecção, filtro e difusão.

A primeira motivação desse estudo encontra-se na necessidade em diminuir o tempo computacional e em tornar acessível o desenvolvimento do método numérico. Para que isso fosse aplicado, foi necessário modificar a linguagem computacional do método. Ele foi adaptado para a linguagem Fortran 90, originalmente o método numérico era acoplado ao LES (*large Eddy Simulation*). Nesse novo método o tempo estimado para as simulações tende a diminuir. As simulações serão realizadas utilizando os dados observados no experimento de Copenhagen (CARVALHO et al., 2002)

A segunda motivação para a realização desse trabalho encontra-se na dificuldade em simular e reproduzir as soluções de maneira satisfatórias, pois existe a presença de movimentos verticais organizados na camada limite que está sendo estudada.

Os resultados dos capítulos 2 e 3, respectivamente Artigo 1 e Artigo 2, são discutidos no capítulo 4, nesta seção são avaliados os resultados das simulações dos modelos Eulerianos: semi-analítico GILTT e numérico Euleriano LOD. No capítulo 5, são apresentados as conclusões deste trabalho.

Os Apêndices A e B, mostram as relações matemáticas para determinar os parâmetros de dispersão para as camadas limites; estável dominada por cisalhamento e convectiva. Nos apêndices C, D e E, são apresentadas algumas relações matemática do modelo Euleriano LOD como: o método spline cúbico, o filtro e o método cranck-nicolson.

1.4 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

1.4.1 Camada limite planetária

A camada limite planetária é a região da atmosfera mais próxima da superfície e é diretamente influenciada pela presença do solo e é diretamente influenciada pelo contorno terrestre e, portanto, sofre uma influência direta dos distintos efeitos superficiais. Esses efeitos, de acordo com Stull (1988), são devidos a evaporação, a transpiração, a transferência de energia na forma de calor e aos fenômenos de troca de quantidades escalares e vetoriais ocorrendo entre a superfície e a atmosfera adjacente.

1.4.1.1 Camada limite convectiva

A camada limite convectiva é uma particular região da camada limite planetária ocorrendo durante períodos diurnos e que apresenta uma escala vertical de alguns poucos quilômetros. A turbulência presente na camada convectiva é gerada por forçantes térmicos e a presença de grandes turbilhões é uma característica marcante deste tipo de camada limite. Nesta particular camada, apenas em regiões verticais próximas a superfície, os forçantes de origem mecânica desempenham algum papel na formação de turbilhões. Em consequência do aquecimento da superfície da Terra, pela incidência de radiação, o solo adquire uma temperatura maior que a da atmosfera adjacente, favorecendo, assim, a troca de energia na forma de calor entre o solo e a atmosfera. Como efeito as camadas de ar menos densas vizinhas a superfície ascendem e as mais densas descendem, gerando movimentos verticais robustos que provocam um grande transporte de propriedades escalares e vetoriais na camada limite convectiva.

1.4.1.2 *Camada limite estável*

No final da tarde, próximo ao por do sol, quando a incidência de radiação solar diminui é possível observar um processo inverso ao da camada limite convectiva. Nesta situação, a superfície terrestre decresce a sua temperatura e o fluxo de calor turbulento inverte a sua direção. Portanto, os níveis inferiores (camadas de ar próximo à superfície) apresentam temperaturas menores que os superiores e os movimentos ascendentes das termas desaparecem pela ação da força de empuxo.

Enquanto na camada limite convectiva, o forçante térmico era fonte de instabilidade e, por consequência, gerava o movimento turbulento, contrariamente, na camada limite estável, as forças de empuxo agem no sentido de suprimir o movimento turbulento. A camada limite estável é determinada por um perfil de temperatura que aumenta com a altura e com a evolução temporal e com a evolução dinâmica dos processos físicos essa estrutura vai se estabelecendo nos níveis mais elevados da camada limite planetária. Desta forma, a turbulência na camada limite estável, de origem mecânica é bem menor do que aquela ocorrendo em situações instáveis e ocorre em regiões próximas a superfície

1.4.1.3 *Camada limite residual*

A camada limite residual se forma após o por do sol e é constituída pelo resíduo de turbulência da camada limite convectiva que persiste nos níveis mais altos da camada limite planetária. A turbulência convectiva nesta camada decai aproximadamente $1h$ e há pouca influência da turbulência gerada na superfície nesta camada.

1.4.1.4 *Camada limite superficial*

Segundo Stull (1988), essa camada pode variar entre milímetros e dezenas de metros e sua espessura é de aproximadamente 10% da camada limite planetária. Nessa camada, os primeiros centímetros, desde o solo, recebem o nome de micro camada ou camada interfacial, na qual o transporte molecular é mais importante do que o transporte turbulento.

1.4.2 Teoria da similaridade

1.4.2.1 A teoria de similaridade de Monin-Obukhov

A presença da turbulência na camada limite planetária não permite que este particular sistema físico seja compreendido completamente a partir dos primeiros princípios. Como consequência, a descrição dos turbilhões presentes nas diferentes alturas da camada limite planetária deve ocorrer pelo emprego de velocidades e comprimentos característicos que expressam as diferentes escalas temporais e espaciais dos turbilhões. Este tipo de abordagem representa uma teoria de similaridade e busca uma descrição universal para as diferentes estruturas geradas pelos forçantes térmicos e convectivos presentes na camada limite planetária. A região vertical superficial, também conhecida como a camada de Prandtl, é formada pelos fluxos turbulentos de calor e de momento. Estes particulares fluxos permitem definir a velocidade de fricção $(u_*)_0$ e o comprimento característico conhecido como o comprimento de Obukhov.

O comprimento de Obukhov é uma escala espacial característica, utilizado na camada limite, que representa os efeitos mecânicos da turbulência gerados pelo cisalhamento do vento. Ele é definido pela seguinte relação

$$L = \frac{(u_*)_0^3}{k(\frac{g}{\theta})(\overline{\omega'\theta'})} \quad (1.1)$$

no qual $(\frac{g}{\theta})$ é o parâmetro de empuxo, $k = 0,40$ é a constante de Von Kármán e $\overline{\omega'\theta'}$, é o fluxo de calor superficial.

A razão entre a altura média z e o comprimento de Obukhov define um parâmetro de estabilidade. Welter (2010), esclarece que para valores grandes e negativos do parâmetro de estabilidade caracterizam uma camada limite convectiva, valores grandes e positivos para o parâmetro de estabilidade caracterizam uma camada limite estável e ainda para valores iguais ou muito próximos a zero caracterizam uma camada limite neutra.

1.4.2.2 A Teoria da similaridade local

Na maioria das vezes a dificuldade em modelar a camada limite estável, ocorrendo em situações de calma de vento, é provocada pelo fato da turbulência não se encontrar em um estado bem desenvolvido. Nesta particular situação, a turbulência pode ocorrer de maneira intermitente e a sua evolução ocorre rapidamente, tornando muito difícil a escolha de parâmetros universais que definem a evolução destes estados complexos. Além do mais, a coexistência de turbulência e movimentos de submeso torna o fenômeno um estado caracterizado por múltiplas escalas, as quais interagem de uma maneira desconhe-

cida com as irregularidades da superfície do solo. Porém em situações de magnitudes fortes e moderadas de vento, ocorrendo na camada limite estável, uma teoria de similaridade local pode ainda descrever alguns aspectos característicos do transporte turbulento presentes nesta camada (NIEUWSTADT, 1984). Nesta teoria, como no caso da teoria de similaridade absoluta, estão presentes a velocidade de fricção, o fluxo de calor turbulento e o comprimento de Obukhov. A diferença fundamental, entre a teoria de similaridade absoluta e aquela local, é o fato de que nesta última a velocidade de fricção, o fluxo de calor turbulento e, como conseqüência, o comprimento de Obukhov passam a ser funções da altura e o termo local significa que todas essas quantidades são determinadas em uma particular altura da camada limite estável. Para que isto ocorra supõem-se que a turbulência existe e é contínua mesmo na presença de um fluxo turbulento de calor negativo. Considerando-se esta última suposição, pode-se escrever as equações da teoria de similaridade local da camada limite estável da seguinte forma

$$\frac{U_*}{u_{*0}} = \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\alpha_1}, \quad (1.2)$$

$$\frac{\overline{w\theta}}{w\theta_0} = \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\alpha_2}, \quad (1.3)$$

$$\frac{\Lambda}{L} = \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\left(\frac{3\alpha_1}{2} - \alpha_2\right)}, \quad (1.4)$$

nas equações (1.2), (1.3) e (1.4), U_* é a velocidade de fricção local, $\overline{w\theta}$ é fluxo turbulento de calor local, Λ é o comprimento de Obukhov local, h é a altura da camada limite turbulenta estável. As constantes α_1 e α_2 , são determinadas ajustando-se o modelo aos diferentes dados experimentais. De acordo com Degrazia e Moraes (1992), estas hipóteses são aplicadas em um regime estável, em terrenos homogêneos na qual a turbulência é contínua e não ocorre a presença de ondas gravitacionais.

Nieuwstadt (1984) apresenta a derivação de uma análise de correlação de segunda ordem, que em casos de turbulência estacionária com taxa de resfriamento constante são $\alpha_1 = \frac{3}{2}$ e $\alpha_2 = 1$. Estas medidas foram feitas no experimento de Cabauw, sob condições estacionárias, algumas horas após o entardecer. No entanto, nas observações realizadas em Minnesota, medidas feitas após o entardecer, diante de um processo não estacionário evolutivo, os valores sugeridos são $\alpha_1 = 2$ e $\alpha_2 = 3$. Para Degrazia e Moraes (1992), isso significa que a teoria da similaridade local não é universal e dependente das condições do experimento.

1.5 REVISÃO TEÓRICA

Nessa seção será apresentado, brevemente, alguns tópicos que são necessários para o desenvolvimento do restante do trabalho. Inicialmente será exposto um esclarecimento sobre o espectro de energia para a turbulência bem desenvolvida. A seguir será mostrado a derivação dos coeficientes de difusão, e, finalmente uma breve discussão sobre o Modelo Euleriano que será utilizado para simular e reproduzir as concentrações de contaminantes observadas em condições estáveis e moderadamente convectivas na camada limite planetária.

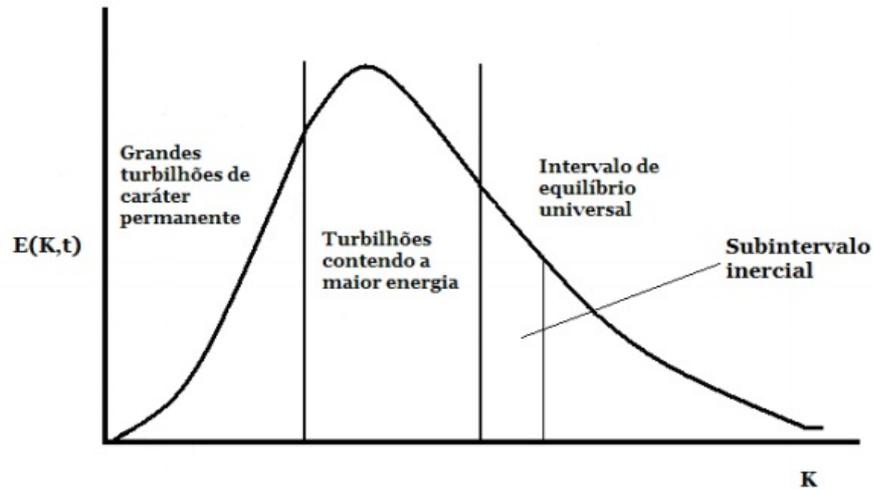
1.5.1 Turbulência e suas características espectrais

Um campo turbulento consiste em um superposição de turbilhões cujas escalas espaciais e temporais podem ser descritas em termos das suas frequências ou dos seus números de onda. Estes turbilhões interagem continuamente com os mecanismos de forçante turbulentos, a partir dos quais extraem a sua energia e também interagem entre si. Do ponto de vista estatístico o transporte turbulento de quantidade escalares e vetoriais é principalmente realizado pelos turbilhões contendo a energia principal do escoamento turbulento. Os forçantes turbulentos são de origem mecânica e térmica, e todo o balanço dinâmico de energia cinética turbulenta pode ser descrito por uma equação de conservação. Para uma turbulência bem desenvolvida a forma da função espectro de energia descrita em termos do número de onda pode ser representada pela Figura (1.1).

Na Figura (1.1), pode-se observar a forma geral do espectro de energia turbulenta. Nesta figura são identificadas várias janelas de números de onda que organizam e identificam a funcionalidade dos diferentes turbilhões em um campo turbulento bem desenvolvido.

- *Turbilhões maiores de caráter permanente* : São os maiores turbilhões, apresentando uma escala de tempo muito grande, mas que não possuem a maior parcela da energia turbulenta total.
- *Turbilhões contendo a energia principal*: São os turbilhões que do ponto de vista estatístico apresentam o maior conteúdo de energia. Como consequência, eles são os responsáveis pelo transporte turbulento de quantidades escalares e vetoriais.
- *Subintervalo inercial*: Neste particular intervalo, a energia dos turbilhões não muda significativamente, porém, o escoamento de energia transferido através dos turbilhões é muito grande. Da mesma forma, a dissipação de energia turbulenta na forma

Figura 1.1 – Forma do espectro de energia para uma turbulência bem desenvolvida. Figura extraída de Gonsalves (2010).



Fonte: (GONSALVES, 2010)

de calor é desprezível em comparação com o escoamento de energia ocorrendo entre os distintos números de ondas e provocados por efeitos inerciais.

- *Intervalo de equilíbrio universal:* O caráter da turbulência, nesses números de onda é inteiramente determinado pelo fluxo de energia e pela razão de dissipação ε (é a dissipação média de energia por unidade de tempo por unidade de massa do fluido. O fluxo de energia mais a dissipação é igual à energia total fornecida para este intervalo. Pela forma do espectro observa-se que essa energia é proveniente dos turbilhões que possuem o maior conteúdo de energia. Dessa forma, embora a dissipação seja provocada pela viscosidade, a ordem de magnitude de ε pode ser determinada apenas por aquelas quantidades que caracterizam os turbilhões mais energéticos” (DEGRAZIA, 2005).

1.5.2 Espectros de velocidade unidimensionais turbulentos

Os espectros de velocidade unidimensionais turbulentos na camada limite planetária apresentam uma forma simples. Isto significa, que o intervalo de frequências que associado ao movimento turbulento pode ser freqüentemente bem representado por uma curva suave com um único máximo (quando expresso na representação $(\log nS(n) \text{ versus } \log n)$). Esta afirmação é válida para todas as componentes de velocidades em condições

turbulentas dominadas por cisalhamento do vento (OLESEN; LARSEN; HØJSTRUP, 1984).

Olesen, Larsen e Højstrup (1984) deriva uma expressão geral para descrever os espectros de velocidade unidimensionais na camada limite planetária superficial

$$\frac{nS_i^E}{(u_*)_0^2} = \frac{Af^\gamma}{(1 + Bf^\alpha)^\beta} \quad (1.5)$$

Na expressão acima (equação (1.5)) n é a frequência em ciclos/segundos ou hertz, S_i^E é o espectro de velocidade unidimensional em função da frequência, $f = \frac{nz}{U}$ é a frequência reduzida, U é a componente da velocidade média do vento, A , B , α , β e γ , são constantes, dependendo, portanto, das condições atmosféricas. Espectros que apresentam essa forma, são caracterizados por uma inclinação nas baixas frequências dada γ quando plotados no formato *logversoslog*, e, por uma inclinação nas altas frequências dadas por $\gamma - \alpha\beta$. Os espectros são mais ou menos pontiagudos dependendo dos valores de α , β e γ , ou seja α , β e γ , que determinam a forma do espectro. As constantes A e B não influenciam a forma do espectro, mas, somente a sua posição. Quando construímos um modelo com o formato da expressão (1.5), somos livres para escolher um certo número de critérios diferentes, de modo a determinar os coeficientes desconhecidos envolvidos. Primeiramente, um modelo espectral deve ser consistente com a lei do subintervalo inercial de Kolmogorov, expressa por

$$E_i(k) = \alpha_i \alpha_u \varepsilon^{\frac{2}{3}} k^{-\frac{5}{3}}, \quad (1.6)$$

onde $E_i(k)$ é um espectro de velocidade turbulento unidimensional no subintervalo inercial escrito em função do número de onda, ε é a taxa de dissipação média da energia cinética turbulenta, $\kappa = \frac{2n\pi}{U}$ é o número de onda e $\alpha_u = 0.5 \pm 0.05$ (CHAMPAGNE et al., 1977) e α_i são constantes. Usando a relação entre o número de onda e a frequência, a equação 1.6 pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{2n\pi}{U} \frac{1}{(u_*)_0^2} E_i\left(\frac{2n\pi}{U}\right) = \alpha_i(0,5 \pm 0,05) \left(\frac{\varepsilon kz}{(u_*)_0^3}\right)^{\frac{2}{3}} \left(\frac{2n\pi z}{U}\right)^{-\frac{2}{3}} \kappa^{-\frac{2}{3}} \quad (1.7)$$

Os termos do lado esquerdo nas expressões (1.5) e (1.7) correspondem ao espectro unidimensional normalizado, assim podemos escrever para o subintervalo inercial

$$\frac{nS_i^E(n)}{(u_*)_0^2} = \alpha_i(0,5 \pm 0,05) (2\pi k)^{-\frac{2}{3}} \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} f^{-\frac{2}{3}} \quad (1.8)$$

e finalmente

$$\frac{nS_i^E(n)}{(u_*)_0^2} = c_i \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} f^{-\frac{2}{3}} \quad (1.9)$$

onde $\phi_\varepsilon = \frac{\varepsilon kz}{(u_*)_0^3}$ é a taxa de dissipação adimensional na camada superficial e $c_i =$

$\alpha_i(0,5 \pm 0,05)(2\phi k)^{\frac{-2}{3}}$ com $\alpha_i = 1; \frac{4}{3}; \frac{4}{3}$ (condição de isotropia) para as componentes u , v e w respectivamente, implicando que $c_u = 0.27$ (para o espectro da componente u) $c_v = c_w = 0.36$ (para os espectro das componentes v e w).

Para as grandes frequências, a expressão (1.5) terá a forma

$$\frac{nS_i^E(n)}{(u_*)_0^2} = Af^{\gamma-\alpha\beta}B^{-\beta} \quad (1.10)$$

das equações (1.8) e (1.10) resultam

$$\gamma - \alpha\beta = \frac{-2}{3} \quad (1.11)$$

e

$$A = c_i B^\beta \Phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} \quad (1.12)$$

se a posição da frequência de pico espectral mecânico, f_{m_i} , está concordando com o máximo de expressão (1.12), resulta

$$\frac{d}{df}[Af^\gamma(1+Bf^\alpha)^{-\beta}]|_{f=(f_m)_i} = 0, \quad (1.13)$$

$$\gamma + (-\beta)(1+Bf^\alpha)^{-1}\alpha Bf^\alpha = 0, \quad (1.14)$$

$$\gamma + Bf^\alpha(\gamma - \alpha\beta) = 0, \quad (1.15)$$

de acordo com a equação (1.10)

$$B = \frac{1.5\gamma}{[(f_m)_i]^\alpha} \quad (1.16)$$

Substituindo as equações (1.12) e (1.16) na equação (1.10) encontra-se a formulação para o espectro turbulento mecânico, S_i^E , normalizado em que agora, u_* é a velocidade de atrito local

$$\frac{nS_i^E}{u_*^2} = \frac{c_i \Phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} (1.5\gamma)^\beta f^\gamma}{\left[1 + \frac{(1.5\gamma)f^\alpha}{[(f_m)_i]^\alpha}\right]^\beta \left\{[(f_m)_i]^\alpha\right\}^\beta} \quad (1.17)$$

de acordo com Olesen, Larsen e Højstrup (1984), substitui-se $\gamma = 1$, $\alpha = \frac{5}{3}$, $\beta = 1$, na equação (1.17) que é a expressão adimensional para o espectro de energia cinética turbulenta gerada pelo forçante mecânico.

1.5.3 Parâmetro de dispersão para uma camada limite estável dominada por cisalhamento

Segundo Degrazia et al. (2000) e seguindo a teoria da similaridade para a camada limite estável apresentada por Nieuwstadt (1984), para condições em que a turbulência pode ser considerada contínua, define-se na camada limite estável, o comprimento e as escalas de velocidades locais

$$\frac{\Lambda}{L} = \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\left(\frac{3\alpha_1}{2} - \alpha_2\right)}, \quad (1.18)$$

$$u_* = (u_*)_0 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{3}{4}}, \quad (1.19)$$

Degrazia e Moraes (1992) e Degrazia et al. (2000), apresentam uma componente para o espectro de velocidade turbulenta Euleriano adimensional para as condições neutra e estável definida pela seguinte expressão

$$\frac{nS_i^E(n)}{u_*^2} = \frac{1.5c_i f \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}}}{[(f_m)_i]^{\frac{5}{3}} \left[1 + \frac{1.5f^{\frac{5}{3}}}{[(f_m)_i]^{\frac{5}{3}}}\right]} \quad (1.20)$$

onde $c_i = \alpha_i(0.5 \pm 0.05)(2\pi k)^{\frac{-2}{3}}$ com $\alpha_i = 1; \frac{4}{3}; \frac{4}{3}$ respectivamente para as componentes u , v e w , u_* é velocidade de fricção local, h é a altura da camada limite estável turbulenta, ϕ_ε é a taxa de dissipação, f é a frequência reduzida, $f = \frac{nz}{U}$, z é a altura acima da superfície, k é a constante de Von Karman, $k = 0,4$ e $(f_m)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral. Degrazia et al. (2000) define

$$(f_m)_i = (f_m)_{0i} \left[1 + 3.7 \frac{z}{h} \frac{\frac{h}{L}}{\left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\left(\frac{3\alpha_i}{2} - \alpha_2\right)}}\right] \quad (1.21)$$

onde $\alpha_1 = \frac{3}{2}$ e $\alpha_2 = 1$

A variância da velocidade é obtida a partir da seguinte equação:

$$\sigma_i^2 = \int_0^\infty S_i^E(n) dn \quad (1.22)$$

Substituindo a equação (1.20) na equação (1.22) e, integrando analiticamente, encontra-se a equação da variância da velocidade para a camada limite estável (descrito no Apêndice A)

$$\sigma_i^2 = \frac{2.32c_i \phi_\varepsilon^{2/3} u_*^2}{(f_m)_i^{2/3}} \quad (1.23)$$

Para determinar o parâmetro de dispersão para uma camada limite estável domi-

nada por cisalhamento, parte-se da expressão geral de Pasquill (1974) definido por:

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \left[\frac{\sin^2\left(\frac{\pi n t}{\beta}\right)}{n^2} \right] dn \quad (1.24)$$

onde $\alpha = x, y$ e z , $i = u, v$ e w , $F_i^E(n)$ é o valor do espectro Euleriano de energia normalizado pela variância da velocidade Euleriana, β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriano, σ_i^2 é a variância da velocidade turbulenta, n é a frequência e t é o tempo de viagem da partícula. De acordo com Wandel e Kofoed-Hansen (1962), β_i pode ser escrito como:

$$\beta_i = \left(\frac{\pi U_2}{16 \sigma_i^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.25)$$

em que β_i está em função da velocidade média do vento U e da intensidade turbulenta (desvio padrão σ_i) no qual possui um valor variável. Entretanto, para determinar o parâmetro de dispersão, parte-se da expressão geral de Pasquill (1974), equação (1.24), para o espectro mecânico. Para essa solução, é necessário normalizar a expressão do espectro, equação (1.20), pela variância de velocidade, equação 1.23, no qual será encontrado o espectro normalizado Euleriano (descrito no Apêndice A):

$$F_i(n) = \frac{n S_i^E}{\sigma_i^2} \quad (1.26)$$

Retornando a equação de Pasquill (1974), equação (1.24), e fazendo as devidas substituições algébricas, obtém-se a equação para o parâmetro de dispersão para a camada limite estável dominada por cisalhamento (as manipulações algébricas estão descritas detalhadamente no Apêndice A)

$$\frac{\sigma_\alpha^2}{h^2} = \left(\frac{0.016 \frac{z^2}{h^2}}{(f_m)_i^2} \right) \int_0^\infty \frac{\sin^2 \left[\frac{X' 8.47 c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} (f_m)_i^{\frac{2}{3}} n'}{\left(\frac{z}{h}\right)} \right]}{(1 + n'^{\frac{5}{3}}) n'^2} \quad (1.27)$$

Observa-se que o parâmetro de dispersão depende diretamente do fator $\frac{z}{h}$ e da distância adimensional da fonte (DEGRAZIA; MORAES, 1992).

1.5.4 Derivação do coeficiente de difusão turbulenta para a camada limite estável

Degrazia et al. (2015) derivou um coeficiente de difusão turbulenta para uma camada limite estável dominada por cisalhamento. Para essa derivação, foram empregados a teoria da similaridade local e o espectro de velocidade turbulenta na teoria da difusão estatística de Taylor. Esse coeficiente de difusão turbulenta será empregado em um modelo de dispersão Euleriano, a expressão pode ser escrita a partir de Batchelor (1949)

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt} \quad (1.28)$$

Emprega-se, então, a equação do parâmetro de dispersão, σ_α^2 , na equação (1.28) e obtém-se uma expressão geral para o coeficiente de difusão turbulento

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\sin(\frac{2n\pi t}{\beta_i})}{n} dn \quad (1.29)$$

com $\alpha = x, y$ e z e $i = u, v$ e w onde $F_i^E(n)$ é o valor do espectro Euleriano de energia normalizado pela variância da velocidade Euleriana, β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriano, n é a frequência e t é o tempo de viagem da partícula. De acordo com Wandel e Kofoed-Hansen (1962), β_i pode ser escrito como

$$\beta_i = \left(\frac{\pi U^2}{16 \sigma_i^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.30)$$

Substituindo na equação (1.29) as expressões (1.20), (1.21), (1.23), (1.25), (1.26), a velocidade de fricção local, $u_* = (u_*)_0 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{3}{4}}$, e fazendo as devidas manipulações algébricas obtém-se a parametrização para o coeficiente de difusividade em uma camada limite estável dominada por cisalhamento (os detalhes dessa manipulação algébrica são demonstrados no Apêndice A)

$$\frac{K_\alpha}{u_* h} = \frac{0.07 \sqrt{c_i} (1-z/h)^{3/4} z/h}{(fm)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin[(18.24(1-z/h)^{3/4} X') f(m)_i^{2/3} \frac{h}{z} n']}{(1+n'^{5/3}) n'} dn' \quad (1.31)$$

onde $n' = \frac{1.5z}{(fm)_i U} n'$, $X' = \frac{x u_*}{h U}$. Para $\alpha = z$ na equação anterior resulta:

$$\frac{K_z}{u_* h} = \frac{0.04(1-z/h)^{3/4} z/h}{(fm)_w^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin[(18.24(1-z/h)^{3/4} X') (fm)_w^{2/3} \frac{h}{z} n']}{(1+n'^{5/3}) n'} dn' \quad (1.32)$$

1.5.5 Coeficiente de difusão turbulenta assintótico para a camada limite estável

De acordo com Degrazia et al. (2000), o coeficiente de difusão assintótico pode ser determinado da seguinte forma:

$$\frac{d\overline{X^2}}{dt} = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4}, \quad (1.33)$$

$$T_{Li} = \frac{\beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4} \quad (1.34)$$

onde $F_i^E(n \rightarrow 0)$ é definido por

$$F_i^E(n \rightarrow 0) = \frac{0.64z}{U(f_m)_i} \quad (1.35)$$

Assim, fazendo as devidas substituições das expressões (1.23), (1.35) na expressão (1.34) e executando as manipulações algébricas é possível obter a seguinte expressão para a escala de tempo de decorrelação Lagrangiana

$$T_{Li} = \frac{0.088z}{\sigma_i(f_m)_i} \quad (1.36)$$

Para derivar o coeficiente de difusão turbulenta assintótico para uma turbulência gerada por efeitos mecânicos, no qual é desconsiderada a dependência da distância da fonte de contaminantes, emprega-se o produto

$$K_\alpha = \sigma_i^2 T_{Li} \quad (1.37)$$

ou seja,

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4} \quad (1.38)$$

Substituindo as equações (1.23), (1.36) na equação (1.37) encontra-se:

$$K_\alpha = \left(\frac{2.32c_i \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} u_*^2}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \right) \left(\frac{0.088z \sigma_i}{(f_m)_i} \right) \quad (1.39)$$

e

$$K_\alpha = \frac{0.134z c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} u_*}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}} \quad (1.40)$$

no coeficiente de difusão derivado na equação (1.40) a expressão para a frequência normalizada do pico espectral é definida pela equação (1.21). Assim, o coeficiente de difusão assintótico é definido por

$$K_\alpha = \frac{0,134z c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} (u_*)_0 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{3}{4}}}{\left[(f_m)_{0i} \left(1 + 3,7 \frac{z}{L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{5}{4}}}\right) \right]_i^{\frac{4}{3}}} \quad (1.41)$$

1.5.6 Parâmetro de dispersão para a camada limite convectiva

De acordo com Degrazia e Anfossi (1998), a equação para o espectro de velocidade turbulento da camada limite convectiva pode ser expresso da seguinte forma

$$\frac{nS_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1,06c_i f \left(\psi \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{5/3} \left[1 + 1,5 \frac{f}{(f_m)_i}\right]^{5/3}} \quad (1.42)$$

onde $i = u, v$ e w em que $c_v = c_w = 0,36$ e $c_u = 0,27$, a frequência reduzida é expressa por $f = \frac{nz}{U}$, z é a altura acima da superfície, z_i é a altura da camada convectiva, $(f_m)_i$ é a normalização da frequência do pico espectral, w_* é a escala da velocidade convectiva, $\psi = \frac{\varepsilon z_i}{w_*^3}$ é a função taxa de dissipação onde ε é a taxa de dissipação de energia cinética por unidade de tempo e unidade de massa do fluido. Integrando-se analiticamente a expressão do espectro apresentada na equação (1.42) sob todo o domínio de frequência, obtém-se a expressão para a variância de velocidade para a camada limite convectiva. Para isso emprega-se a seguinte equação

$$\sigma_i^2 = \int_0^\infty S_i^E(n) dn, \quad (1.43)$$

substituindo a equação (1.42) na equação (1.43) encontra-se:

$$\sigma_i^2 = \int_0^\infty \frac{1,06c_i f \left(\psi \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} w_*^2}{\left[(f_m)_i^{\frac{5}{3}}\right] \left[1 + 1,5 \frac{f}{(f_m)_i}\right]^{\frac{5}{3}}} dn \quad (1.44)$$

E conseqüentemente a variância da velocidade turbulenta na camada limite convectiva será expressa pela seguinte equação (descrito no Apêndice B)

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06c_i \psi^{\frac{2}{3}} w_*^2 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \quad (1.45)$$

onde a frequência normalizada associada ao máximo do espectro convectivo é definida por $f_m = \frac{z}{\lambda_m}$.

Para determinar o parâmetro de dispersão convectivo, parte-se da expressão geral de Pasquill (1974) definida pela equação (1.24) β_i em acordo Wandel e Kofoed-Hansen (1962) é definido pela equação (1.25) a razão entre as escalas de tempo lagrangeana e Euleriana está em função da velocidade média do vento, U e da intensidade turbulenta, no qual possui um valor variável. Entretanto, é necessário normalizar a expressão do espectro de velocidade turbulenta, equação (1.42), pela variância de velocidade turbulenta, equação (1.45), no qual será encontrado o espectro normalizado Euleriano, e, se obterá:

$$F_i^E(n) = \frac{z}{U(f_m)_i} \left[1 + 1,5 \frac{f}{(f_m)_i}\right]^{\frac{-5}{3}} \quad (1.46)$$

Retornando a equação de Pasquill (1974), equação (1.24) e fazendo as devidas substituições algébricas, obtém-se o parâmetro de dispersão definido pela seguinte expressão

$$\sigma_\alpha^2 = 0,07z_i^2 \int_0^\infty \frac{\sin^2(1,92z_iX)}{[1+n']n'^2} dn' \quad (1.47)$$

1.5.7 Derivação do coeficiente de difusão turbulenta para a camada limite convectiva

Degrazia et al. (2000), derivou um coeficiente de difusão turbulenta para uma camada limite convectiva com dependência da fonte e uma turbulência não-homogênea. Para a derivação dos parâmetros de dispersão foram empregados a teoria estatística de difusão de Taylor, as propriedades do espectro observado e as características observadas da energia contidas nos vórtices. Esse coeficiente de difusão será empregado em um modelo de dispersão Euleriano, no qual pretende-se analisar a concentração média de contaminantes na camada limite planetária. Para determinar esse coeficiente de difusão, a expressão será escrita a partir de Batchelor (1949),

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt} \quad (1.48)$$

no qual é possível obter a expressão geral para o coeficiente de difusão a partir da equação do parâmetro de dispersão

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin\left(\frac{2n\pi t}{\beta_i}\right)}{n} dn \quad (1.49)$$

com $\alpha = x, y$ e z e $i = u, v$ e w , onde $F_i^E(n)$ é o valor do Espectro Euleriano de energia normalizado pela variância da velocidade turbulenta, n é a frequência, β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriano, σ_i^2 é variância da velocidade turbulenta e t é o tempo de viagem. De acordo com Wandel e Kofoed-Hansen (1962), é sugerido que seja definido como β_i

$$\beta_i = d\left(\frac{U}{\sigma_i}\right) \quad (1.50)$$

onde U é a velocidade média do vento d é uma constante cujo valor numérico é determinado por ambos trabalhos realizados, teóricos e experimentais. Degrazia e Anfossi (1998), estimaram $d = 0,55$.

$$\frac{K_\alpha}{w_* h} = \frac{0,09c_i^{\frac{1}{2}}\psi^{\frac{1}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{4}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}} \int_0^\infty \frac{\sin\left[7,84c_i^{\frac{1}{2}}\psi^{\frac{1}{3}}(f_m)_i^{\frac{2}{3}}Xn\left(\frac{z}{z_i}\right)\right]}{(1+n')^{\frac{5}{3}}} \frac{dn'}{n'} \quad (1.51)$$

Na equação (1.51) é apresentado o coeficiente de difusão integral generalizado, como uma função da distância da fonte.(O desenvolvimento completo para determinar o

coeficiente de difusão será descrito no Apêndice B).

1.5.8 Coeficiente de difusão turbulenta assintótico para a camada limite convectiva

(revisar as contas) De acordo com Degrazia e Anfossi (1998), a partir do modelo para o espectro de energia cinética turbulenta, é possível derivar a formulação para a escala de tempo de decorrelação Lagrangiana

$$T_{Li} = \frac{\beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4} \quad (1.52)$$

onde $F_i^E(n \rightarrow 0)$ é definido por

$$F_i^E(n \rightarrow 0) = \frac{z}{U(f_m)_i} \quad (1.53)$$

Assim, fazendo as devidas substituições das expressões (1.50) e (1.53) na expressão (1.52) e, executando as manipulações algébricas, é possível obter a seguinte expressão para a escala de tempo de decorrelação Lagrangiana

$$T_{Li} = \frac{0,13z^{\frac{2}{3}}z_i^{\frac{1}{3}}}{c_i^{\frac{1}{2}}\psi^{\frac{1}{3}}(f_m)_i^{\frac{2}{3}}w_*} \quad (1.54)$$

sendo β_i definido por Wandel e Kofoed-Hansen (1962).

Para derivar o coeficiente de difusão turbulenta assintótico para uma turbulência considerando as condições convectivas, no qual é desconsiderado a dependência da distância da fonte de contaminantes. Considera-se que a derivada do espectro de energia cinética terá a seguinte frequência $n \rightarrow 0$. Sendo assim a expressão para derivar o coeficiente de difusão é definido por

$$K_\alpha = \sigma_i^2 T_{Li} \quad (1.55)$$

ou seja,

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4} \quad (1.56)$$

substituindo as equações (1.45), (1.54) na equação (1.55) encontra-se

$$K_\alpha = \left(\frac{1,06c_i\psi^{\frac{2}{3}}w_*^2\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \right) \left(\frac{0,13z^{\frac{2}{3}}z_i^{\frac{1}{3}}}{c_i^{\frac{1}{2}}\psi^{\frac{1}{3}}(f_m)_i^{\frac{2}{3}}w_*} \right) \quad (1.57)$$

e

$$K_\alpha = \frac{0,137c_i^{\frac{1}{2}}\psi^{\frac{1}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{4}{3}}w_*z_i}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}} \quad (1.58)$$

no coeficiente de difusão derivado na equação (1.58), a expressão para a frequência normalizada do pico espectral convectivo é definida por

$$(f_m)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i} = 0,55\left(\frac{z}{z_i}\right)\left[1 - \exp\left(\frac{-4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]^{-1} \quad (1.59)$$

Finalmente o coeficiente de difusão descrito em termos dos turbilhões contendo a energia principal do campo turbulento, para o comportamento assintótico em função da frequência normalizada do pico espectral convectivo é definida a partir das equações (1.58) e (1.59)

$$\frac{K_\alpha}{w_*z_i} = 0,16\psi^{\frac{1}{3}}\left[1 - \exp\left(\frac{-4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]^{\frac{4}{3}} \quad (1.60)$$

1.5.9 Modelo Euleriano

O modelo de difusão Euleriano, que será usado neste estudo é matematicamente representado pela equação de difusão-advecção (BLACKADAR, 1997), (BUSKE, 2008)

$$\left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial t}\right) + (\bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}) + (\bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y}) + (\bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z}) = \left(\frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z}\right) + S \quad (1.61)$$

onde \bar{c} é a concentração média de um contaminante passivo, u , v e w são, respectivamente, as componentes médias do vento nas direções x , y e z . Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam, respectivamente, os fluxos turbulentos de contaminantes nas direções longitudinal, lateral e vertical. É importante notar que a equação (1.61) possui variáveis desconhecidas (os fluxos e a concentração), nos quais não é possível resolvê-la diretamente, levando-nos ao problema de fechamento em turbulência. Como consequência, um dos fechamentos mais usados para a equação (1.61), é baseado na hipótese do transporte pelo gradiente (ou teoria K), o qual, em analogia com a lei de Fick da difusão molecular, assume que a turbulência causa um movimento de partículas de fluido no sentido da diminuição do gradiente de concentração da espécie transportada, a uma taxa, que é proporcional à magnitude do gradiente:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}, \quad (1.62)$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}, \quad (1.63)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (1.64)$$

nas equações (1.62), (1.63) e (1.64) K_x , K_y e K_z são, respectivamente, os coeficientes de difusividade turbulenta nas direções longitudinal, lateral e vertical. Em tal fechamento de primeira ordem, toda a informação que diz respeito a complexidade do campo turbulento está contida nas difusividades turbulentas. A equação (1.62), (1.63) e (1.64) substituídas na equação (1.61) resulta:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (1.65)$$

A simplicidade do fechamento matemático, usado na representação, faz do modelo Euleriano, como dado pela equação (1.65), uma aproximação usada com muita frequência em problemas que envolvem o cálculo da concentração de contaminantes liberados na atmosfera. Todavia, diferente da difusão molecular a difusão turbulenta é dependente da escala da dimensão da nuvem de poluentes. Isto significa que a razão de difusão da pluma de contaminantes depende da sua dimensão. À medida que a pluma cresce, o efeito dos turbilhões maiores é incorporado no processo de expansão da pluma de contaminantes.

A flexibilidade do modelo euleriano está relacionada ao fato do coeficiente poder ser especificado como uma função, não somente da estabilidade, mas também, da rugosidade da superfície, do tempo e do espaço. Vários coeficientes já foram propostos e seu desempenho é determinado pela parametrização utilizada pelos autores na sua dedução.

A vantagem do modelo é que, em condições reais, com variações tridimensionais dos campos do vento e difusividade, podem ser simuladas e que simplificações podem ser realizadas desprezando um ou mais termos. A desvantagem é que o modelo não reconhece um aumento de K_z com o tempo de viagem da pluma, em virtude do aumento do tamanho da pluma. Assim, perto da fonte de dispersão ele é superestimado, embora, sob condições estáveis, isto é, minimizado devido ao pequeno tamanho dos turbilhões. A equação de difusão-advecção, na qual os fluxos turbulentos de matéria são parametrizados como proporcional aos gradientes de concentração, o modelo é uma aproximação frequentemente usada no estudo de transporte de difusão turbulenta de poluentes na atmosfera (DEGRAZIA; MORAES, 1989).

1.5.10 Índices Estatísticos

A avaliação do desempenho dos modelos geralmente é realizada através do emprego de índices estatísticos, o qual tem como objetivo, comparar os resultados observados e previstos pelo modelo. Para verificar o desempenho do modelo Euleriano utilizado nesse trabalho, utilizou-se o modelo estatístico de Hanna (1989). O modelo elaborado por Hanna (1989), para a análise estatística, faz uma comparação entre os valores das concentrações simulados e observados a partir do conceito de: coeficiente de correlação, erro quadrático médio normalizado, fator de dois, desvio fracional padrão e fração de inclinação. As notações utilizadas para demonstrar os índices *obs* e *pre* indicam, respectivamente, as quantidades observadas e previstas, C é a concentração do poluente e σ é o desvio padrão.

- Coeficiente de correlação (*COR-Correlation Coefficient*)

O coeficiente de correlação estabelece o nível de relação entre duas variáveis. Para um bom desempenho do modelo, o seu valor deve ser 1. Este parâmetro é definido como

$$COR = \frac{\overline{(C_{obs} - C_{pre})(C_{obs} - C_{pre})}}{\sigma_{obs}\sigma_{pre}} \quad (1.66)$$

- Erro quadrático médio normalizado (*NMSE -Normalized Mean Square Error*)

O erro quadrático médio normalizado está associado aos desvios entre concentração prevista e observada. É uma estatística adimensional, o seu valor deve ser menos possível para um desempenho do modelo.

$$NMSE = \frac{\overline{((C_{obs}) - (C_{pre}))^2}}{C_{obs}C_{pre}} \quad (1.67)$$

- Fator de dois (*FA2-Factor 2*)

O fator de dois é a fração de dados (% normalizado a 1) que estão entre $0,5 \leq \frac{C_{pre}}{C_{obs}} \geq 2$. Quanto mais próximo a 1 este valor estiver, maior é a confiabilidade no modelo.

- Fração de inclinação (*FB-Fractional Bias*)

A fração de inclinação informa a tendência do modelo superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

$$FB = \frac{(\overline{C_{obs}} - \overline{C_{pre}})}{0,5(\overline{C_{obs}} + \overline{C_{pre}})} \quad (1.68)$$

- Desvio fracional padrão (FS)

O desvio fracional padrão informa o quanto o modelo consegue simular a dispersão do contaminante quando comparado os valores observados e previstos pelo modelo. O valor ótimo é zero.

$$FS = \frac{2(\sigma_{obs} - \sigma_{pre})}{(\sigma_{obs} + \sigma_{pre})} \quad (1.69)$$

1.6 METODOLOGIA

1.6.1 Artigo (1) – Emprego do coeficiente de difusividade para simular a dispersão de contaminantes para uma camada limite planetária estável dominada por cisalhamento.

Nesse artigo foram parametrizados o coeficiente de difusividade para a camada limite estável dominada por cisalhamento. Na derivação do coeficiente de difusão empregase a teoria da similaridade local, a teoria de difusão estastística de Taylor e os espectros de energia turbulentos. Para simular e reproduzir a concentração observada de contaminantes, o coeficiente de difusividade será empregado em um modelo de dispersão Euleriano onde será utilizado o experimento de difusão de Hanford. O estudo do transporte e dispersão de contaminantes, na camada limite planetária, é descrita através da equação de difusão-advecção, no qual foi obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos, na equação da continuidade, utilizando o modelo de transporte de gradiente ou Teoria-K.

O modelo Euleriano utilizado para a reprodução desse experimento é a técnica de solução semi-analítica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Wortmann, Moura e Vilhena (2000), e, Buske (2008), descrevem GILTT como sendo um sistema de equações diferenciais ordinárias resultante da aplicação de GITT (*Generalized Integral Transform Technique* - uma técnica no qual apresenta uma solução numérica do problema transformado), que foi resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização.

A solução de GILTT é explicada resumidamente por Buske (2008), da seguinte forma:

A equação de difusão-advecção bidimensional é resolvida aplicando a transformada de Laplace na variável temporal e a solução do problema estacionário resultante pelo método GILTT.

Os passos de GILTT compreendem: construção de um problema auxiliar de Sturm-Liouville associado ao problema estacionário, determinação da técnica da transformada integral em uma série truncada usando como base as autofunções do problema de Sturm-

Liouville, substituição desta expansão no problema original. Tomando momentos, obtém-se a equação transformada de GILTT, que consiste de uma equação diferencial ordinária matricial que é resolvido analiticamente pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização. Finalmente, a concentração dependente do tempo é obtida invertendo-se numericamente a solução do problema estacionário.

Nesse estudo foram empregados para a simulação do modelo Euleriano os dados experimento de difusão de Hanford, esse experimento foi realizado em Washington (DORAN; HORST, 1985). O traçador utilizado foi o SF6 que foi liberado a uma altura de $2m$ nas distâncias de 100, 200, 800, e 3200metros da fonte. A velocidade do vento u e o comprimento de Monin-Obukov L , são medidas determinadas por um anemômetro sônico (DORAN; HORST, 1985). A altura da camada limite foi terminada pela seguinte formulação (NIEUWSTADT, 1984)

$$h = 0,4 \left(\frac{u_* L}{f} \right) \quad (1.70)$$

A expressão utilizada para calcular o vento médio é a seguinte relação

$$\frac{\bar{u}_z}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (1.71)$$

onde u e u_1 são as medias das velocidades do vento para as alturas z e z_1 , enquanto é um expoente que relaciona a intensidade da turbulência, no qual para cisalhamento do vento $n = 0,1$ (IRWIN, 1979). A Tabela 1.1 mostra as condições meteorológicas durante o experimento de Hanford (DORAN; HORST, 1985).

Tabela 1.1 – Meteorological parameters measured during the Hanford stable experiment.

Run	Data	$h(m)$	$L(m)$	u_*
11	18 maio, 1983	325	166	0.40
12	26 maio, 1983	135	44	0.26
13	05 junho, 1983	182	77	0.27
14	12 junho, 1983	104	34	0.20
15	24 junho, 1983	157	59	0.26
16	27 junho, 1983	185	71	0.30

Fonte: (DORAN; HORST, 1985)

1.6.2 Artigo (2) - Emprego de um coeficiente de difusão para simular a dispersão de contaminantes a partir de uma solução numérica para a equação de difusão-advecção

Para esse artigo foram parametrizados um coeficiente de difusão turbulenta para uma camada limite convectiva considerando diferentes condições de estabilidade e uma turbulência não-homogênea. Para a derivação dos parâmetros de dispersão, foram empregados a teoria estatística de difusão de Taylor, as propriedades do espectro observado e as características observadas contidas nos vórtices. Para simular e reproduzir as concentrações observadas de contaminantes os coeficientes de difusividades serão empregados em um modelo numérico Euleriano onde será utilizado o experimento de Copenhagen.

O modelo Euleriano utilizado para reproduzir o campo de concentração de contaminante é o método numérico tridimensional de passos fracionados baseado na técnica *splitting*. A técnica descreve a equação de conservação (difusão-advecção) como uma soma dos operadores diferenciais. Em um entendimento mais prático, a técnica consiste em dividir o problema bi ou tridimensional em uma série de problemas unidimensionais (*LOD-Locally one dimensional*) com o intuito de diminuir o esforço e a capacidade computacional necessários para a solução numérica. O método introduzido por Marchuk e Yanenko (1966), é baseado na separação de operadores (*operator splitting methods*).

A solução do problema baseia-se na separação de cada intervalo de tempo em três passos:

- Termos advectivos: é computado com a utilização de um método quase lagrangeano *cubic spline*.
- Termos filtros: após cada passo advectivo é necessária uma operação filtro que é aplicado nesse campo intermediário para remover algumas concentrações negativas produzidas pela advecção.
- Termos difusivos: é computado por meio de um esquema implícito *Crank-Nicholson*.

Essa separação permite diminuir a capacidade computacional necessária, se comparada a uma solução conjunta, ou seja, todos os termos da equação governante.

Um experimento de dispersão sob condições convectivas foi utilizado para simular e reproduzir as concentrações observadas do contaminante. O experimento de Copenhagen foi simulado para testar o algoritmo que será descrito, matematicamente, posteriormente. Para a evolução da simulação foram consideradas todas as informações referentes ao experimento de Copenhagen.

O experimento de dispersão descrito em Carvalho et al. (2002), consiste da liberação de um traçador SF₆ na região norte de Copenhagen. É um experimento convectivo e de fonte elevada.

O traçador foi liberado sem empuxo, a partir de uma torre à uma altura de $115m$, e coletado ao nível do solo. O experimento foi realizado em um local considerado residencial, com rugosidade de $0,6m$.

Na Tabela 1.2, U é a velocidade do vento médio em m/s , u_* representa a velocidade de fricção em m/s , L é o comprimento de Monin-Obukhov em m , h é a altura da camada limite convectiva em m , Q é a taxa de emissão em g/s , C_{obs} é a concentração observada do experimento de Copenhagen em μgm^{-2} .

Tabela 1.2 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen caso convectivo.

Run	$-L(m)$	$h(m)$	$u_*(ms^{-1})$	$U_{115m}(ms^{-1})$	$Q(g s^{-1})$	$Dist.Amos(m)$	$C_{obs}(\mu gm^{-2})$
1	37	1980	0.36	3.4	3.2	1900	2074
1	37	1980	0.36	3.4	3.2	3700	739
2	292	1920	0.73	10.6	3.2	2100	1722
2	292	1920	0.73	10.6	3.2	4200	944
3	71	1120	0.38	5.0	3.2	1900	2624
3	71	1120	0.38	5.0	3.2	3700	1990
3	71	1120	0.38	5.0	3.2	5400	1376
4	133	390	0.38	4.6	2.3	4000	2682
5	444	820	0.45	6.7	3.2	2100	2150
5	444	820	0.45	6.7	3.2	4200	1869
5	444	820	0.45	6.7	3.2	6100	1590
6	432	1300	1.05	13.2	3.1	2000	1228
6	432	1300	1.05	13.2	3.1	4200	688
6	432	1300	1.05	13.2	3.1	5900	567
7	104	1850	0.64	7.6	2.4	2000	1608
7	104	1850	0.64	7.6	2.4	4100	780
7	104	1850	0.64	7.6	2.4	5300	535
8	56	810	0.69	9.4	3.0	1900	1248
8	56	810	0.69	9.4	3.0	3600	606
8	56	810	0.69	9.4	3.0	5300	456
9	289	2090	0.75	10.5	3.3	2100	1511
9	289	2090	0.75	10.5	3.3	4200	1026
9	289	2090	0.75	10.5	3.3	6000	855

Fonte: (CARVALHO et al., 2002)

Os escoamentos turbulentos na camada limite convectiva são caracterizados por movimentos descendentes (*downdrafts*) e por estruturas assimétricas, compostas de pequenas regiões, com intenso movimento vertical ascendente (*updrafts*). Os *updrafts*, são os responsáveis pelo transporte de constituintes atmosféricos da região adjacente à superfície, para as camadas superiores da camada limite atmosférica. Sendo assim, na simulação do experimento, é necessário acomodar os vários *updrafts* em um determinado momento, e, para isso, foram realizados cálculos em um domínio retangular arranjado. As dimensões do box foram 7x7km nas direções horizontais e 2km na direção vertical. A escala de velocidade convectiva foi determinada a partir da seguinte expressão

$$w_* = u_* \left(\frac{h}{kL} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.72)$$

onde u_* representa a velocidade de fricção, L é o comprimento de Monin-Obukhov, h é a altura em metros e k é a constante de Von Karman $k = 0,40$.

O perfil exponencial do vento foi calculado a partir das observações de velocidade do vento na altura de 115m e parametrizado seguindo a teoria de similaridade de Monin-Obukhov (BERKOWICZ; OLESEN; TORP, 1986):

$$U(z) = c \left\{ \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) + \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \right\} \quad (1.73)$$

se $z > z_b$, onde $z_b = \min[|L|, 0, 1h]$ e Ψ_m é a função estabilidade dada por Paulson (1970)

2 ARTIGO 1

EMPLOYING EDDY DIFFUSIVITIES TO SIMULATE THE CONTAMINANTS DISPERSION FOR A SHEAR DOMINATED-STABLE BOUNDARY LAYER

G.A. Degrazia¹, S. Maldaner¹, C.P. Ferreira¹, V.C. Silveira¹, U.Rizza², V.S. Moreira³, D. Buske⁴

¹Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, BR;

²Institute of Atmospheric Sciences and Climate (ISAC) of the Italian National Research Council (CNR).

³Universidade Federal do Pampa, Itaqui, RS, Brasil.

⁴ Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, Brasil.

cecilia.perobelliferreira@gmail.com, silvana.maldaner@gmail.com,
gevasiodegrazia@gmail.com, viliamcardoso@gmail.com u.rizza@isac.cnr.it,
virneimoreira@gmail.com, daniela.buske@ufpel.edu.br

2.1 INTRODUCTION

For the convective planetary boundary layer there are a large number of mathematical models to describe the transport and the dispersion of contaminants. Generally, the turbulent parameterizations that are utilized in such models are well-known and statistical quantities as eddy diffusivities, dispersion parameters, velocity variances and time scales are represented by a convective similarity theory originated from a physical system in a state of quasi-equilibrium. Differently, in comparison with the convective boundary layer, the number of turbulent parameterizations employed in a dispersion model for a shear dominated stable boundary layer (SBL) is quite reduced. One of the major problems concerning to the shear dominated SBL is the determination of its height. This particular vertical depth is a relevant quantity to describe the processes that govern the SBL development. It is important to note that the SBL height has a significant influence on the mixing properties (STEENEVELD; HOLTSLAG, 2009). Furthermore, the inhomogeneous character associated to the turbulence in the SBL becomes difficult the derivation of eddy diffusivities and dispersion parameters. Nonetheless, the local similarity theory (LST) allied to the spectral Taylor statistical diffusion theory allows to construct local expressions for the turbulence parameters in a shear-dominated SBL. Therefore, in the present study we employ the LST and the turbulent velocity spectra, in the Taylor statistical diffusion

theory to derive eddy diffusivities for a shear dominated SBL. This new formulation is used in a bidimensional Eulerian dispersion model to simulate the observed contaminant concentrations in the classical Hanford experiment (DORAN; HORST, 1985).

2.1.1 Derivation of eddy diffusivities

An expression for the eddy diffusivities in the planetary boundary layer can be written as ((BATCHELOR, 1949),(PASQUILL, 1974),(DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2001))

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin(2\pi t/\beta_i)}{n} dn \quad (2.1)$$

with $\alpha = x, y, z$ and $i = u, v, w$, where $F_i^E(n)$ is the Eulerian spectrum of energy normalized by the velocity variance, n is the frequency, β_i is the ratio of the Lagrangian to the Eulerian integral time scales, σ_i^2 is the turbulent velocity variance and t is the travel time. According to (WANDEL; KOFOED-HANSEN, 1962), β_i can be described by

$$\beta_i = \left(\frac{\pi U^2}{16\sigma_i^2}\right)^{1/2} \quad (2.2)$$

where U is the mean wind speed.

The velocity spectra for a shear-dominated stable boundary layer can be expressed as (DEGRAZIA et al., 2000)

$$\frac{S_i(n)}{U_*^2} = \frac{1.5c_i z/U\phi^{2/3}}{(fm)_i^{5/3}(1+1.5\frac{f^{5/3}}{(fm)_i^{5/3}})} \quad (2.3)$$

where $c_i = \alpha_i(0.5 \pm 0.05)(2\pi k)^{-2/3}$ with $\alpha_i = 1, 4/3$ and $4/3$ for u, v and w components respectively, U_* is the local friction velocity ($U_* = (1 - z/h)^{3/4}u_*$), h is the turbulent SBL height, ϕ_ε is the dissipation rate, f is the reduced frequency ($f = nz/U$), z is the height above the surface, $k = 0.4$ is the von Karman constant and $(fm)_i$ is the normalized frequency of the spectral peak described as

$$(fm)_i = (fm)_{0i}(1 + 3.7\frac{z}{\Lambda}) \quad (2.4)$$

where $(fm)_{0i}$ is the frequency of the spectral peak in the surface for neutral conditions and Λ is the local Monin-Obukhov length:

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

where L is the Monin-Obukhov length. By integrating $S_i(n)$ (equation 2.3) over the whole frequency range, one obtains the following variance (DEGRAZIA et al., 2000)

$$\sigma_i^2 = \frac{2.32c_i\phi^{2/3}U_*^2}{(fm)_i^{2/3}} \quad (2.5)$$

Eq. (2.1) together with the equations (2.3), (2.2) and (2.4) lead to the following parameterization for the eddy diffusivities in a shear dominated SBL:

$$\frac{K_\alpha}{u_*h} = \frac{0.07\sqrt{c_i}(1-z/h)^{3/4}z/h}{(fm)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin[(18.24(1-z/h)^{3/4}X')f(m)_i^{2/3}\frac{h}{z}n']}{(1+n'^{5/3})n'} dn' \quad (2.6)$$

where $n' = \frac{1.5z}{(fm)_i U} n'$, $X' = \frac{xu_*}{hU}$. For $\alpha = z$ in equation (2.6) result:

$$\frac{K_z}{u_*h} = \frac{0.04(1-z/h)^{3/4}z/h}{(fm)_w^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin[(18.24(1-z/h)^{3/4}X')(fm)_w^{2/3}\frac{h}{z}n']}{(1+n'^{5/3})n'} dn' \quad (2.7)$$

2.1.2 Test of the proposed parameterization employing the Hanford observed concentration data

The eddy diffusivities are used in a Eulerian dispersion model to simulate the observed contaminant concentrations in the classical Hanford experiment. The study of transport and dispersion of contaminants in the planetary boundary layer is described by the advection-diffusion equation, which is obtained parameterizing the turbulent fluxes in the continuity equation utilizing the gradient transport model or K-theory. For a cartesian coordinate system in which the x direction coincides with that one of the wind speed magnitude, the steady state advection-diffusion equation is written as

$$U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}) \quad (2.8)$$

where \bar{c} is the average concentration of a contaminant, U is the wind speed magnitude in x direction and K_x , K_y and K_z are the eddy diffusivities. Neglecting the longitudinal diffusion respect to wind advection the cross-wind integration of the equation(2.8) leads to:

$$U \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} (K_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial z}) \quad (2.9)$$

where \bar{c}_y is the average cross-wind integrated concentration in the vertical region $0 < z < z_i$ and for $X > 0$, considering the following boundary conditions and emission rate Q :

$$K_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial z} = 0 \quad (2.10)$$

at $z = 0, h$ (zero concentration flux at the surface and CBL top) and

$$\bar{u}\bar{c}_y(0, z) = Q(z - H_s) \quad (2.11)$$

(emission rate at source height H_s).

In the present study, the solution for the problem defined by the equations (2.9),(2.10) and (2.11) is obtained by the GILTT method (BUSKE et al., 2011),(MOREIRA et al., 2009). This general method to simulate pollutants dispersion in a planetary boundary layer is described in a detailed form in the following works (BUSKE et al., 2011),(MOREIRA et al., 2009). The vertical eddy diffusivity as given by equation (2.7) is introduced in equation (2.9) and solved with the GILTT method with the aim of evaluating the performance of this new parameterization in reproducing the observed ground-level concentrations. To accomplish this task, observed concentration data from the Hanford dispersion experiment were simulated. The Hanford diffusion experiments were accomplished in Washington region (DORAN; HORST, 1985). The tracer SF6 was released at a height of $2m$ and sampled in arcs of 100, 200, 800, 1600 and 3200m from the source. The u_* and L were determined by measurements obtained from sonic anemometer (DORAN; HORST, 1985). The height of the stable layer was determined by the following formulation (NIEUWSTADT, 1984):

$$h = 0.4\left(\frac{u_*L}{f}\right)^{1/2}$$

The wind speed profile employed in the simulations is expressed by a power law provided by the following relation (ALVES, 2012)

$$\frac{\overline{u_z}}{u_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^n$$

where $\overline{u_1}$ and $\overline{u_z}$ are the mean horizontal wind speeds at heights z and z_1 , while n is an exponent that is related to the intensity of turbulence. For shear forcing conditions $n = 0.1$ (IRWIN, 1979). Table 2.1 shows a summary of the meteorological conditions during the Hanford stable experiments (DORAN; HORST, 1985).

Tabela 2.1 – Meteorological parameters measured during the Hanford stable experiment.

Run	Data	$h(m)$	$L(m)$	u_*
11	May 18, 1983	325	166	0.40
12	May 26, 1983	135	44	0.26
13	June 5, 1983	182	77	0.27
14	June 12, 1983	104	34	0.20
15	June 24, 1983	157	59	0.26
16	June 27, 1983	185	71	0.30

The performance of the GILTT method employing the vertical eddy diffusivity as

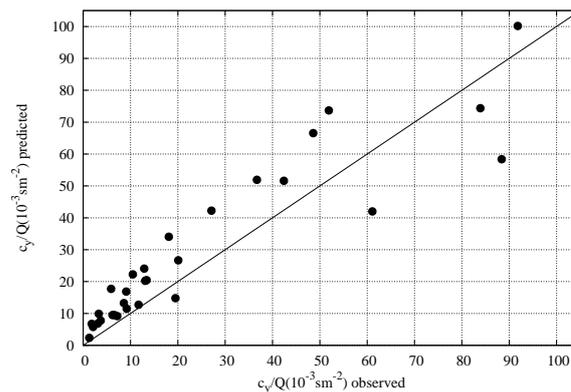
given by equation (2.7) is shown in Table 2.2 and Figure 2.1.

Tabela 2.2 – Statistical indices of the model performance for the Hanford stable diffusion experiments.

Normalized Mean Square Error (<i>NMSE</i>)	0.18
Correlation coefficient (<i>COR</i>)	0.92
Fractional bias (<i>FB</i>)	0.06
Fractional Standard deviation (<i>FS</i>)	-0.18
Factor 2 (<i>FA2</i>)	0.77

Table 2.2 exhibits the statistical analysis that allows to compare observed and simulated magnitudes of the ground-level crosswind integrated concentration \bar{c}_y/Q . The statistical indices to evaluate the performance of the new vertical eddy diffusivity were proposed by (HANNA, 1989). The *NMSE* is the normalized mean square error, *FA2* is Factor 2, *COR* is the correlation coefficient, *FB* is the fractional bias and *FS* is the fractional standard deviations. The meaning of these indices is discussed and explained in a detailed form in (MOREIRA et al., 2011) and (MALDANER et al., 2013). The statistical indices *NMSE*, *FB* and *FS* represent good results when they approach zero, whereas *COR* and *FA2* are optimized at the value 1. Therefore, analyzing the magnitude of the statistical indices in Table 1.2 and observing the scatter diagram in Figure 3.1, it is possible to conclude that the advection-diffusion equation (2.9), solved by GILTT method, employing the vertical eddy diffusivity for a shear dominated SBL obtained from Taylor statistical diffusion and local similarity theory, reproduces very well the observed crosswind integrated concentration from the Hanford stable experiment.

Figura 2.1 – Scatter diagram between observed and predicted c_y/Q .



2.2 CONCLUSION

Eddy diffusivities for a shear dominated stable planetary boundary layer turbulence are derived. The model is based upon Taylor statistical diffusion and local similarity theory. These eddy diffusivities can be applied to parameterize turbulent dispersion in the near, the intermediate and far field of an elevated continuous point source. The present development allows to construct a vertical eddy diffusivity expressed in terms of the source distance for an inhomogeneous turbulent field in a stable PBL. In this aspect K_z is dependent on the nondimensional distance X , on the stability parameter z/Λ and of the adimensional height z/h . To evaluate the new vertical eddy diffusivity (equation 2.7) in a Eulerian dispersion model, we employ equation (2.7) in the advection-diffusion equation (2.9) to simulate the Hanford observed ground-level crosswind integrated concentrations. The results show that there is a good agreement between simulated and observed concentrations. Therefore, the new eddy diffusivity applied to a shear dominated SBL, expressed by the equation (2.7), depending on source distance and describing an inhomogeneous turbulence, can be applied in regulatory air pollution modeling.

Acknowledgments

The authors thank CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) and FAPERGS (Fundação de Apoio a Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul) for partial financial support of this work.

REFERENCES

- Alves, I. P., Degrazia, G. A., Buske, D., Vilhena, M. T., Moraes, O. L. L., Acevedo, O. C.: Derivation of an eddy diffusivity coefficient depending on source distance for a shear dominated planetary boundary layer. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, 6577-6586, 391, 2012.
- Batchelor, G. K.: Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis. **Australian Journal of Scientific Research** 437-450, 2, 1949.
- Buske, D., Vilhena, M.T., Segatto, C.F., Quadros, R.S.: A general analytical solution of the advection-diffusion equation for Fickian closure, in: **Integral Methods in Science and Engineering: Computational and Analytic Aspects**, Birkhauser, Boston, 25-34, 2011.
- 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** 1233-1240, 40, 2001.
- Degrazia, G. A., Anfossi, D., Carvalho, J. C., Mangia, C., Tirabassi, T., Campos Velho, H. F.: Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment** 3575-3583, 34, 2000.
- Doran, J.C., Horst, T.W.: An evaluation of Gaussian plume-depletion models with dual-tracer field measurements, **Atmospheric Environment**, 939-951, 19, 1985.
- Hanna, S. R.: Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, 1385-1398, 23, 1989.
- Irvin, J.S.: A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment** 191-184, 13, 1979.
- Maldaner, S., Degrazia, G. A., Rizza, U., Moreira, V. S., Puhales, F. S., Acevedo, O. C., da Costa Carvalho, J.: Derivation of third-order vertical velocity turbulence moment in the convective boundary layer from large eddy simulation data: an application to the dispersion modeling. **Atmospheric Pollution Research**, 191-198, 4, 2013.
- Moreira, V. S., Degrazia, G. A., Roberti, D. R., Timm, A. U., da Costa Carvalho, J.: Employing a Lagrangian stochastic dispersion model and classical diffusion experiments to evaluate two turbulence parameterization schemes. **Atmospheric Pollution Research**, 384-393, 2, 2011.
- Moreira, D. M., Vilhena M. T., Buske, D., Tirabassi T.: The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere, **Atmospheric Research**, 1-17, 92, 2009.
- Nieuwstadt, F. T.M.: The turbulent structure of the stable, nocturnal boundary layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, 2202-2216, 41, 1984.
- Pasquill, F., Smith, F. B. **Atmospheric diffusion: Study of the dispersion of wind-borne material from industrial and other sources.**, John Wiley Sons, 605 third ave., New York, 94-104, 1983.

Steenefeld, G.J. and Holtslag, A.A.M.: Meteorological Aspects of Air Quality, in: **Air Quality in the 21st Century**, Eds: G.C. Romano, and A.G. Conti, 67-114, 2009.

Wandel, C. F., Kofoed-Hansen, O.: On the Eulerian-Lagrangian transform in the statistical theory of turbulence. **Journal of Geophysical Research**, 3089-3093, 67, 1962.

3 ARTIGO 2

EMPREGO DE UM COEFICIENTE DE DIFUSÃO PARA SIMULAR A DISPERSÃO DE CONTAMINANTES A PARTIR DE UMA SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA A EQUAÇÃO DE DIFUSÃO-ADVECÇÃO

3.1 INTRODUÇÃO

Em função do aumento no número de fontes poluidoras, a busca por entendimento sobre os mecanismos responsáveis pela dispersão de poluentes na atmosfera tem se tornado um grande interesse na comunidade científica. Essa investigação, basicamente, tenta simular, avaliar e prever as possíveis consequências do impacto ambiental nos mais variados ecossistemas. Nesse sentido, a construção de ferramentas matemáticas são extremamente úteis nessa investigação, pois esses modelos são capazes de descrever a trajetória média de viagem dos contaminantes e a sua difusão provocada pelo efeito da turbulência presente na camada limite planetária. Uma das alternativas para tais estudos está na modelagem numérica, que considera que os experimentos realizados na atmosfera são operacionalmente difíceis e possuem um custo elevado para serem executados. Dessa forma, o aperfeiçoamento dos modelos numéricos tornou-se indispensável para o estudo e controle da qualidade do ar.

Devido à estrutura complexa da camada limite planetária, onde as características de não homogeneidade e não estacionaridade dos campos de vento e de turbulência são predominantes, a aplicação de modelos numéricos para a dispersão de poluentes é uma tarefa que encontra inúmeras dificuldades. No entanto, sabe-se que os modelos Eulerianos são mais adaptados para problemas complexos, como a dispersão de contaminantes sobre topografia complexa ou difusão de poluente não-inerte (TIRABASSI, 2005). Considera-se, no modelo Euleriano, o movimento das partículas em relação a um sistema de referência espacial fixo. Esses modelos baseiam-se numa resolução numérica, sobre uma grade espaço-temporal fixa, da equação da conservação da massa da espécie do poluente.

Esse trabalho tem como proposta inicial desenvolver o modelo de dispersão Euleriano, para reproduzir o campo de concentração de contaminante, visando diminuir o esforço computacional. Esse modelo será escrito na linguagem computacional Fortran90, no qual considera-se o tempo médio para a realização das simulações. O modelo Euleriano que será desenvolvido baseia-se na equação de advecção-difusão, e será empregado no método numérico tridimensional (LOD) (RIZZA et al., 2003), os coeficientes de difusão empregados no modelo serão derivados a partir do modelo de difusão espectral estatístico

de Taylor. O método numérico tridimensional, de passos fracionados, baseia-se na técnica *splitting*. A técnica descreve a equação de conservação da massa (difusão-advecção) como uma soma dos operadores diferenciais. Em um entendimento mais prático, a técnica consiste em dividir o problema bi ou tridimensional em uma série de problemas unidimensionais (LOD-*Locally one dimensional*), com o intuito de diminuir (MARCHUK; YANENKO, 1966) o esforço e a capacidade computacional necessários para a solução numérica. O método é baseado na separação de operadores (*operator splitting methods*).

Originalmente, o modelo de dispersão Euleriano desenvolvido por RIZZA et al. (2003), utilizava a técnica LES (*Large Eddy Simulation*) para determinar a dispersão Euleriana de contaminantes. Essa técnica estava acoplada ao método numérico Euleriano LOD. Na simulação numérica original, a técnica LES fornecia os campos de velocidade e turbulência, no qual era possível computar o transporte e a dispersão de contaminantes. Na simulação de RIZZA et al. (2003) o vento era considerado constante e foi obtido integrando-se o campo de vento LES sobre os pontos de grade no cubo.

Na nova formulação, será dispensado o uso da técnica LES. Nessa nova técnica os métodos serão desacoplados, e será utilizado apenas a técnica geral para o método tridimensional de passos fracionados, descrita posteriormente, onde as escalas de velocidade convectiva e o perfil exponencial do vento serão calculados a partir dos dados fornecidos pelo experimento de Copenhagen para a altura de 115m e parametrizados de acordo com a teoria de similaridade de Monin-Obukohv (BERKOWICZ; OLESEN; TORP, 1986).

A validação desse modelo será realizada a partir dos índices estatísticos e serão aplicados com o objetivo de avaliar os resultados da solução. Essa validação será através da comparação dos dados de concentração observados do experimento de Copenhagen ($C_{obs(gm-2)}$), com os dados que serão medidos ($C_{pre(gm-2)}$) a partir das simulação do campo de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais na camada limite atmosférica.

O objetivo principal desse trabalho, é desenvolver o modelo de dispersão Euleriano e a partir da nova formulação, observar uma diminuição no esforço computacional do modelo, calcular e simular os campos de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais contínuas. Para essa simulação será reproduzido e empregado o parâmetro de dispersão, como o coeficiente de difusividade assintótico para a camada limite convectiva.

3.1.1 Derivação do coeficiente de difusão

Na modelagem da dispersão de poluentes é fundamental fazer uma escolha adequada da parametrização, pois estamos idealizando o fenômeno de transporte turbulento. Nesse sentido, ao parametrizarmos os processo de trocas turbulentas são incorporadas relações matemáticas que, a partir de equações, descrevem as leis de conservação. Sendo

assim, são inseridos nos modelos de dispersão relações aproximadas para substituir termos que possam representar um processo natural. Segundo Degrazia (2005), a confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados ao entendimento da camada limite planetária.

A expressão para os coeficientes de difusão turbulentos podem ser escritos de acordo com Batchelor (1949). Esses coeficientes estão relacionados com o parâmetro de dispersão definido por e Degrazia et al. (2000)

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt} \quad (3.1)$$

e

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin\left(\frac{2n\pi t}{\beta_i}\right)}{n} dn \quad (3.2)$$

onde $\alpha = x, y$ e z , $i = u, v$ e w , $F_i^E(n)$ é o valor do Espectro Euleriano de energia normalizado pela variância da velocidade Euleriana, β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriano, σ_i^2 é a variância da velocidade turbulenta, n é a frequência e t é o tempo de viagem da partícula. De acordo com Wandel e Kofoed-Hansen (1962), β_i pode ser escrito como

$$\beta_i = d \left(\frac{U}{\sigma_i} \right) \quad (3.3)$$

onde $d = 0,55$, Degrazia e Anfossi (1998) e U é a velocidade média do vento.

O espectro de velocidade turbulentas da camada limite convectiva é definida por (DEGRAZIA et al., 2000)

$$\frac{n S_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1,06 c_i f \left(\psi \frac{z}{z_i} \right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{5/3} \left[1 + 1,5 \frac{f}{(f_m)_i} \right]^{5/3}} \quad (3.4)$$

onde $i = u, v$ e w em que $c_v = c_w = 0,36$ e $c_u = 0,27$, a frequência reduzida é expressa por $f = \frac{nz}{U}$, z é a altura acima da superfície, z_i é a altura da camada convectiva, $(f_m)_i$ é a normalização da frequência do pico espectral, w_* é a escala da velocidade convectiva, $\psi = \frac{\varepsilon z_i}{w_*^3}$ é a função taxa de dissipação onde ε é a taxa de dissipação de energia cinética por unidade de tempo e unidade de massa do fluido.

Integrando-se analiticamente a equação (3.4) sobre todos os domínios de frequência resulta na seguinte expressão para a variância de velocidade

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06 c_i \psi^{\frac{2}{3}} w_*^2 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \quad (3.5)$$

onde a frequência normalizada, associada ao máximo do espectro convectivo, é definida

por $f_m = \frac{z}{\lambda_m} = \frac{z}{1,5z_i}$.

Substituindo a expressão da variância, equação (3.5), na expressão sugerida por Wandel e Kofoed-Hansen (1962), é possível obter as seguintes expressões matemáticas

$$\frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} = \frac{0,09 U c_i^{\frac{1}{2}} w^* \Psi^{\frac{1}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.6)$$

e

$$\frac{2\pi t}{\beta_i} = a = \frac{11,76 c_i^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{2}}}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{z_i}{U} X \quad (3.7)$$

onde podemos considerar que $t = \frac{X}{U}$ e $X = \frac{xw_*}{Uz_i}$.

O espectro Euleriano normalizado é definido pela razão do espectro de velocidade turbulenta pela variância da velocidade turbulenta

$$F_i^E(n) = \frac{z}{U(f_m)_i} \left[1 + 1,5 \frac{f}{(f_m)_i}\right]^{\frac{5}{3}} \quad (3.8)$$

Substituindo na expressão para o coeficiente de difusão definida por Batchelor (1949), equação (3.2), as equações (3.3), (3.5), (3.6), (3.7) e (3.8) obtemos

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = \frac{0,09 c_i^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{4}{3}} w_*}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}} \int_0^\infty \frac{\sin\left(\frac{7,84 c_i^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{3}} (f_m)_i^{\frac{2}{3}} X n'}{\left(\frac{z}{z_i}\right)}\right)}{[1 + n']^{\frac{5}{3}}} \frac{dn'}{n'} \quad (3.9)$$

3.1.2 Coeficiente de difusão assintótico

Degrazia e Anfossi (1998), a partir do modelo para o espectro de energia cinética turbulenta, deriva a formulação para a escala de decorrelação Lagrangeana

$$T_{Li} = \frac{\beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4} \quad (3.10)$$

definindo $\beta_i = 0,55 \frac{U}{\sigma_i}$ e $F_i^E(n \rightarrow 0)$ (DEGRAZIA et al., 2000),

$$F_i^E(n \rightarrow 0) = \frac{z}{U(f_m)_i} \quad (3.11)$$

e retornando a equação (3.10), a escala de decorrelação Lagrangeana é definida por

$$T_{Li} = \frac{0,13z^{\frac{2}{3}}z_i^{\frac{1}{3}}}{c^{\frac{1}{2}}\Psi^{\frac{1}{3}}(f_m)_i^{\frac{2}{3}}w_*} \quad (3.12)$$

A expressão para derivar o coeficiente de difusão assintótico é dada por

$$K_\alpha = \sigma_i^2 T_{Li} \quad (3.13)$$

e

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4} \quad (3.14)$$

Substituindo as equações (3.5) e (3.12) na equação (3.13), resulta

$$K_\alpha = \left(\frac{1,06c_i \Psi^{\frac{2}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \right) \left(\frac{0,13z^{\frac{2}{3}}z_i^{\frac{1}{3}}}{c^{\frac{1}{2}}\Psi^{\frac{1}{3}}(f_m)_i^{\frac{2}{3}}w_*z_i} \right) \quad (3.15)$$

e

$$K_\alpha = \frac{0,137c^{\frac{1}{2}}\Psi^{\frac{1}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)w_*z_i}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}} \quad (3.16)$$

No coeficiente de difusão derivado na equação (3.16), a expressão para a frequência normalizada para o pico espectral é definida por

$$(f_m)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i} = 0,55\left(\frac{z}{z_i}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right]^{-1} \quad (3.17)$$

Assim, a expressão para o comportamento assintótico em função da frequência normalizada do pico espectral convectivo é definida da seguinte forma

$$\frac{K_\alpha}{w_*z_i} = 0,16\Psi^1/3 \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right]^{4/3} \quad (3.18)$$

3.1.3 Modelo Euleriano

O modelo de difusão Euleriano, que será usado neste estudo é matematicamente representado pela equação de difusão-advecção (BLACKADAR, 1997) e (BUSKE, 2008)

$$\left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial t}\right) + (\bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}) + (\bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y}) + (\bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z}) = \left(\frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x}\right) + \left(\frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z}\right) + S \quad (3.19)$$

onde \bar{c} é a concentração média de um contaminante passivo, u , v e w são, respectivamente, as componentes médias do vento nas direções x , y e z . Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ represen-

tam, respectivamente, os fluxos turbulentos de contaminantes nas direções longitudinal, lateral e vertical. É importante notar que a equação (3.19) possui variáveis desconhecidas (os fluxos e a concentração), nos quais não é possível resolvê-la diretamente levando-nos ao problema de fechamento em turbulência. Como consequência, um dos fechamentos mais usados para a equação (3.19) é baseado na hipótese do transporte pelo gradiente (ou teoria K), o qual, em analogia com a lei de Fick, da difusão molecular, assume que a turbulência causa um movimento de partículas de fluido no sentido da diminuição do gradiente de concentração da espécie transportada a uma taxa que é proporcional à magnitude do gradiente:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}, \quad (3.20)$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}, \quad (3.21)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (3.22)$$

nas equações (3.20), (3.21) e (3.22) K_x , K_y e K_z são, respectivamente, os coeficientes de difusividade turbulenta nas direções longitudinal, lateral e vertical. Em tal fechamento de primeira ordem, toda a informação que diz respeito a complexidade do campo turbulento está contida nas difusividades turbulentas. As equações (3.20), (3.21) e (3.22) substituída na equação (3.19) resulta:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (3.23)$$

A simplicidade do fechamento matemático, usado na representação, faz do modelo Euleriano, como dado pela equação (3.23), uma aproximação usada com muita frequência em problemas que envolvem o cálculo da concentração de contaminantes liberados na atmosfera. Todavia, diferente da difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente da escala da dimensão da nuvem de poluentes. Isto significa que a razão de difusão da pluma de contaminantes depende da sua dimensão. à medida que a pluma cresce, o efeito dos turbilhões maiores é incorporado no processo de expansão da pluma de contaminantes.

3.1.4 Simulação da dispersão de contaminantes empregando uma solução numérica para a equação de advecção-difusão

A descrição e o entendimento da turbulência na camada limite planetária, às vezes, requer a utilização de modelos numéricos. Para auxiliar nessa compreensão, o

presente estudo utilizará o modelo de dispersão Euleriano, juntamente com um método tridimensional de passos fracionados. Esse auxiliará em um melhor entendimento do mecanismo da dispersão de poluente na camada limite planetária.

Geralmente, o estudo da dispersão atmosférica está associado aos modelos de simulações Eulerianos e Lagrangeanos. O modelo Lagrangeano, normalmente é bem sucedido na descrição da dispersão turbulenta dos contaminantes passivos. Isso é devido a sua capacidade de considerar os aspectos essenciais da turbulência, mesmo que essas estejam limitadas a um pequeno conjunto de reações de espécies. No entanto, o modelo Euleriano, por outro lado, pode incorporar as numerosas equações, cinético-químicas, de segunda ordem e ordens superiores necessárias para descrever o desenvolvimento de uma pluma química, ou nuvem de poluente (RIZZA et al., 2003).

No modelo numérico Euleriano que será utilizado nesse estudo será empregado o modelo de difusão estatístico de Taylor e o espectro de energia turbulento, que auxiliarão na derivação do coeficiente de difusão turbulento, (K_α). Essa parametrização de (K_α) será empregada na equação do modelo Euleriano para reproduzir as condições observadas do contaminante.

3.1.5 Método tridimensional de passos fracionados

A solução da equação de advecção-difusão é utilizada para representar o modelo Euleriano, como segue

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (3.24)$$

Para o emprego do método numérico é necessário separar essa solução dentro de um conjunto de equações dependente do tempo, cada uma localmente uni-dimensional (LOD), no qual é necessário reescrever a equação (3.24) como a soma de um operador diferencial de advecção-difusão, obtém-se

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = A_x \bar{c} + A_y \bar{c} + A_z \bar{c} + D_x \bar{c} + D_y \bar{c} + D_z \bar{c} \quad (3.25)$$

ou equivalência

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \Lambda_x \bar{c} + \Lambda_y \bar{c} + \Lambda_z \bar{c} \quad (3.26)$$

onde

$$\begin{aligned}
\Lambda_x &= A_x + D_x = -\bar{u} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (K_m \frac{\partial}{\partial x}) \\
\Lambda_y &= A_y + D_y = -\bar{v} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} (K_m \frac{\partial}{\partial y}) \\
\Lambda_z &= A_z + D_z = -\bar{w} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (K_m \frac{\partial}{\partial z})
\end{aligned} \tag{3.27}$$

McRae, Goodin e Seinfeld (1982) descreve a aproximação localmente uni-dimensional utilizando a integração temporal Cranck-Nicolson como segue

$$\bar{c}^{n+1} = \prod_{j=1}^3 \left[I - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_j \right]^{-1} \left[I - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_j \right] \bar{c}^n \tag{3.28}$$

que pode ser reescrito como

$$\bar{c}^{n+1} = \prod_{j=1}^3 T_j^n \bar{c}^n = T^n \bar{c}^n \tag{3.29}$$

Para obter a acurácia temporal de segunda ordem na equação (3.29) é necessário considerar a sequência

$$\bar{c}^n = \prod_{j=1}^n T_j^n \bar{c}^1 = T^n \bar{c}^1 \tag{3.30}$$

e

$$\bar{c}^{n+1} = \prod_{j=3}^1 T_j^n \bar{c}^n \tag{3.31}$$

Segundo Andren et al. (1994), o esquema de segunda ordem de acurácia temporal pode ser apresentada na seguinte forma, segundo os operadores citados anteriormente. Nas seguintes operações um termo filtro é utilizado após cada passo advectivo,

$$\bar{c}^n = [A_x F D_x][A_y F D_y][A_z F D_z] \bar{c}^{n-1} \tag{3.32}$$

$$\bar{c}^{n+1} = [D_z F A_z][D_y F A_y][D_x F A_x] \bar{c}^n \tag{3.33}$$

o esquema foi descrito em detalhe por Yanenko (1971) e revisado por McRae, Goodin e Seinfeld (1982).

3.1.6 Considerações do método LOD

O algoritmo de diferenças finitas referente as equações (3.32) e (3.33) contém três subpassos, uma para cada direção, que serão demonstrados posteriormente, e para cada direção serão empregados as suas respectivas condições de contorno. No desenvolvimento do método foi utilizado a seguinte notação $j \in [1, N_x]$, $k \in [1, N_y]$, $i \in [1, N_z]$, respectivamente, para cada incremento ao longo das direções x , y e z

$$\begin{aligned}x_j &= x_0 + j\Delta x, \\y_k &= y_0 + k\Delta y, \\z_i &= z_0 + i\Delta z,\end{aligned}\tag{3.34}$$

onde Δx , Δy e Δz representam o tamanho da grade e N_x , N_y e N_z representam o número dos pontos da grade ao longo das direções x , y e z , respectivamente. Para cada direção as equações (3.32) e (3.33), possuem três outros subpassos:

- a. A parte advectiva
- b. A produção do filtro
- c. A parte difusiva

3.1.7 Método numérico

- Direção Longitudinal Λ_x

- a. Advectivo

Nesse primeiro passo a equação de advecção (*operador* A_x) é computada utilizando o método *Cubic Spline* (MAHRER; PIELKE, 1978). O operador A_x será expresso da seguinte forma:

$$\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} = S^h(x_j - \alpha\Delta x)\tag{3.35}$$

com $\alpha = u_{j,k,i}^h \frac{\Delta t}{\Delta x}$ (o valor absoluto de $u_{j,k,i}^h$ será desprezado, pois é sempre positivo), o sobrescrito h indica os passos de tempo fictícios intermediários entre n e $n+1$. A função de interpolação (*Cubic Spline*) S (descrito no Apêndice C) pode ser expressa nos termos de uma derivada spline

$$P_j^h = \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}\right)_{j,k,i}^h\tag{3.36}$$

a equação spline $S(x)$ é

$$S^h(x) = P_{j-1}^h \frac{(x_j - x)^2(x - x_{j-1})}{h_j^2} - P_j^h \frac{(x - x_{j-1})^2(x_j - x)}{h_j^2} \quad (3.37)$$

$$+ \bar{c}_{j-1}^h \frac{(x_j - x)^2[2(x - x_{j-1}) + h_j]}{h_j^3} + \bar{c}_j^h \frac{(x - x_{j-1})^2[2(x_j - x) + h_j]}{h_j}$$

onde $h_j = x_j - x_{j-1}$

Nesse momento são determinadas as derivadas spline a partir de um sistema algébrico tridiagonal (PRICE; MACPHERSON, 1973)(Esse sistema está descrito no Apêndice C)

$$\frac{1}{2}P_{j-1}^h + 2P_j^h + \frac{1}{2}P_{j+1}^h = \frac{3}{2\Delta x}(\bar{c}_j^h - \bar{c}_{j-1}^h) + \frac{3}{2\Delta x}(\bar{c}_{j+1}^h - \bar{c}_j^h) \quad (3.38)$$

Ao resolver o sistema, a derivada P_j^h é empregada na equação (3.38). No esquema para o termo advectivo na equação (3.33), deve-se trocar $x_j - \alpha\Delta x = x_j - \alpha h$ para x na equação (3.38), onde obtém-se

$$\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} = \bar{c}_{j,k,i}^h - P_j^h h_j \alpha + [P_{j-1}^h + 2P_j^h h_j + 3(\bar{c}_{j-1,k,i}^h - \bar{c}_{j,k,i}^h)]\alpha^2 \quad (3.39)$$

$$- [P_{j-1}^h + P_j^h + 2(\bar{c}_{j-1,k,i}^h - \bar{c}_{j,k,i}^h)]\alpha^3$$

b. Filtro

Após a definição de cada passo advectivo, surge a necessidade de empregar um operador filtro (demonstrado como operador F). Esse operador é aplicado para que esse campo intermediário remova qualquer concentração negativa que é comumente produzida pela advecção (descrito no Apêndice D),

$$\bar{c}_{j,k,i}^h = F(\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2}) \quad (3.40)$$

c. Difusivo

O termo difusivo é calculado a partir do esquema implícito Crank-Nicolson (demonstrado como o operado D_x)

$$\frac{\bar{c}_{j,k,i}^{h+1} + \bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2}}{\Delta t} = \frac{1}{2S_c} \left[\frac{K'_{m(x)}(\bar{c}_{j+1,k,i}^{h+1/2} - \bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2}) - K''_{m(x)}(\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} - \bar{c}_{j-1,k,i}^{h+1/2})}{(\Delta x)^2} \right] \quad (3.41)$$

$$+ \frac{1}{2S_c} \left[\frac{K'_{m(x)}(\bar{c}_{j+1,k,i}^{h+1} - \bar{c}_{j,k,i}^{h+1}) - K''_{m(x)}(\bar{c}_{j,k,i}^{h+1} - \bar{c}_{j-1,k,i}^{h+1})}{(\Delta x)^2} \right]$$

com as seguintes considerações

$$\alpha_x = \frac{\Delta t}{2S_c(\Delta x)^2}, \quad (3.42)$$

$$K'_{m(x)} = K_m(j + 1/2, k, i), \quad (3.43)$$

$$K''_{m(x)} = K_m(j - 1/2, k, i), \quad (3.44)$$

então,

$$\begin{aligned} & -\alpha_x K''_{m(x)} \bar{c}_{j-1,k,i}^{h+1} + (1 + \alpha_x K'_m(x) + \alpha_x K''_{m(x)}) \bar{c}_{j,k,i}^{h+1} - \alpha_x K'_{m(x)} \bar{c}_{j+1,k,i}^{h+1} \\ & \alpha_x K'_{m(x)} \bar{c}_{j+1,k,i}^{h+1/2} + (1 - \alpha_x K'_m(x) + \alpha_x K''_{m(x)}) \bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} - \alpha_x K''_{m(x)} \bar{c}_{j-1,k,i}^{h+1/2} \end{aligned} \quad (3.45)$$

Esse esquema também representa um sistema tridiagonal.

- Direções Lateral Λ_y e Vertical Λ_z

Será demonstrado o esquema numérico para a direção lateral, por conveniência.

a. Advectivo

O termo advectivo é calcula a partir do método *cubic spline* demonstrado por A_y

$$|\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2}| = \begin{cases} S^h(y_k - \alpha \Delta y), & \text{se } v_{j,k,i}^h \geq 0 \\ S^h(y_k + \alpha \Delta y), & \text{se } v_{j,k,i}^h \leq 0. \end{cases}$$

onde $\alpha = |v_{j,k,i}^h| \frac{\Delta t}{\Delta y}$, sendo S^h uma função interpolação em termos de derivada spline,

$$P_k^h = \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right)_{j,k,i}^h, \quad (3.46)$$

que é calculado por um sistema tridiagonal,

$$\frac{1}{2} P_{k-1}^h + 2P_k^h + \frac{1}{2} P_{k+1}^h = \frac{3}{2\Delta y} (\bar{c}_k^h - \bar{c}_{k-1}^h) + \frac{3}{2\Delta y} (\bar{c}_k^h). \quad (3.47)$$

Ao resolver o sistema, aplica-se o esquema de advecção, e para a situação $v_{j,k,i}^h \geq 0$ utiliza-se o termo $y_k - \alpha \Delta y = y_k - \alpha h_k$, para y na equação de interpolação que é escrita considerando o intervalo $[y_{k-1}, y_k]$

$$\begin{aligned} S^h(y) &= P_{k-1}^h \frac{(y_k - y)^2 (y - y_{k-1})}{h_k^2} - P_k^h \frac{(y - y_{k-1})^2 (y_k - y)}{h_k^2} \\ &+ \bar{c}_{k-1}^h \frac{(y_k - y)^2 [2(y - y_{k-1}) + h_k]}{h_k^3} + \bar{c}_k^h \frac{(y - y_{k-1})^2 [2(y_k - y) + h_k]}{h_k^3} \end{aligned} \quad (3.48)$$

onde $h_k = y_k - y_{k+1}$.

Para a situação $v_{j,k,i}^h \leq 0$ utiliza-se o termo $y_k + \alpha \Delta y = y_k + \alpha h_k$, para y na equação de interpolação que é escrita considerando o intervalo $[y_k, y_{k+1}]$

$$S^h(y) = P_k^h \frac{(y_{k+1} - y)^2 (y - y_k)}{h_{k+1}^2} - P_{k+1}^h \frac{(y - y_k)^2 (y_{k+1} - y)}{h_{k+1}^2} \quad (3.49)$$

$$+ \bar{c}_k^h \frac{(y_{k+1} - y)^2 [2(y - y_k) + h_{k+1}]}{h_{k+1}^3} + \bar{c}_k^h \frac{(y - y_k)^2 [2(y_{k+1} - y) + h_{k+1}]}{h_{k+1}^3}$$

onde $h_{k+1} = y_{k+1} - y_k$.

A equação de advecção torna-se se $v_{j,k,i}^h \geq 0$

$$\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} = \bar{c}_{j,k,i}^h - P_k^h h_k \alpha + [P_{k-1}^h h_k + 2P_k^h h_k + 3(\bar{c}_{j,k+1,i}^h - \bar{c}_{j,k,i}^h)] \alpha^2 - \quad (3.50)$$

$$- [P_{k-1}^h h_k + P_k^h h_k + 2(\bar{c}_{j,k+1,i}^h - \bar{c}_{j,k,i}^h)] \alpha^3$$

ou se $v_{j,k,i}^h \leq 0$

$$\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} = \bar{c}_{j,k,i}^h + P_k^h h_{k+1} \alpha + [P_{k+1}^h h_{k+1} + 2P_k^h h_{k+1} + 1 + 3(\bar{c}_{j,k+1,i}^h - \bar{c}_{j,k,i}^h)] \alpha^2 - \quad (3.51)$$

$$+ [P_{k+1}^h h_{k+1} + P_k^h h_{k+1} + 2(\bar{c}_{j,k,i}^h - \bar{c}_{j,k+1,i}^h)] \alpha^3$$

b. Filtro

$$\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} = F(\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2}) \quad (3.52)$$

c. Difusivo

O termo difusivo é calculado a partir do esquema implícito Crank-Nicolson (demonstrado como o operador D_y e D_z)

$$\frac{\bar{c}_{j,k,i}^{h+1} + \bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2}}{\Delta t} = \frac{1}{2S_c} \left[\frac{K'_{m(y)} (\bar{c}_{j,k+1,i}^{h+1/2} - \bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2}) - K''_{m(y)} (\bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} - \bar{c}_{j,k-1,i}^{h+1/2})}{(\Delta y)^2} \right] \quad (3.53)$$

$$+ \frac{1}{2S_c} \left[\frac{K'_{m(y)} (\bar{c}_{j,k+1,i}^{h+1} - \bar{c}_{j,k,i}^{h+1}) - K''_{m(y)} (\bar{c}_{j,k,i}^{h+1} - \bar{c}_{j,k-1,i}^{h+1})}{(\Delta y)^2} \right]$$

ou equivalente,

$$-\alpha_y K''_{m(y)} \bar{c}_{j,k+1,i}^{h+1} + (1 - \alpha_y K'_{m(y)} + \alpha_y K''_{m(y)}) \bar{c}_{j,k,i}^{h+1} - \alpha_y K'_{m(y)} \bar{c}_{j,k,i}^{h+1} = \quad (3.54)$$

$$\alpha_y K'_{m(y)} \bar{c}_{j,k+1,i}^{h+1/2} + (1 - \alpha_y K'_{m(y)} + \alpha_y K''_{m(y)}) \bar{c}_{j,k,i}^{h+1/2} - \alpha_y K''_{m(y)} \bar{c}_{j,k-1,i}^{h+1/2}$$

Considerando,

$$\alpha_y = \frac{\Delta t}{2S_c(\Delta y)^2}, \quad (3.55)$$

$$K'_{m(y)} = K_m(j, k + 1/2, i) \quad (3.56)$$

e

$$K''_{m(y)} = K_m(j, k - 1/2, i), \quad (3.57)$$

3.1.8 Validação do modelo de dispersão Euleriano

Segundo Tirabassi (2005), quando são utilizados os modelos de dispersão deve-se considerar que estes modelos são capazes de representar adequadamente situações reais. Na maioria dos casos, verifica-se a confiabilidade dos modelos confrontando-se as concentrações observadas com aquelas simuladas, ao utilizar de maneira correta os modelos, aqueles que são capazes de simular a dispersão de contaminantes, deve-se considerar que esses modelos são capazes de representar corretamente situações reais. Dadas as condições, verifica-se a confiabilidade desse modelo a partir dos dados observados, com os cenários topográficos e meteorológicos da área de seu emprego.

3.1.9 Experimento de dispersão

Nos estudos de dispersão atmosférica a quantidade mais importante estudada é a concentração do poluente próximo do solo. Neste sentido, será avaliado o modelo numérico Euleriano desenvolvido no presente estudo onde serão utilizados os dados do experimento de Copenhagen (CARVALHO et al., 2002) para simular o campo de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais contínuas na camada limite planetária.

O experimento de Copenhagen foi realizado na parte norte da cidade de Copenhagen (Dinamarca) em condições neutras e instáveis. O traçador utilizado no experimento foi o SF_6 (Hexafluoreto de enxofre). Ele foi liberado sem empuxo a partir de uma torre de 115m e coletado ao nível do solo, por amostradores de concentração em três distâncias, na direção preferencial do vento (entre 2 e 6km a partir da fonte). O tempo médio da realização do experimento foi de 1 hora (GRYNING et al., 1987). O local onde o experimento foi realizado era considerado residencial, com um comprimento de rugosidade de 0,6m. Os resultados de 23 experimentos convectivos são apresentados na Tabela 3.1 (CARVALHO et al., 2002). Os dados avaliados na Tabela 3.1 foram empregados no modelo numérico

Euleriano para simular a concentração observada do contaminante. Na Tabela 3.1, U é a velocidade do vento médio em m/s , u_* representa a velocidade de fricção em m/s , L é o comprimento de Monin-Obukhov em m , h é a altura em da camada limite convectiva em m , Q é a taxa de emissão em g/s , C_{obs} é a concentração observada do experimento de Copenhagen em $\mu g m^{-2}$.

A escala de velocidade convectiva foi determinada a partir da seguinte expressão

$$w_* = u_* \left(\frac{h}{kL} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.58)$$

O perfil exponencial do vento foi calculado a partir das observações de velocidade do vento na altura de $115m$ e parametrizado seguindo a teoria de similaridade de Monin-Obukhov (BERKOWICZ; OLESEN; TORP, 1986):

$$U(z) = c \left\{ \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) + \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \right\} \quad (3.59)$$

se $z > z_b$, onde $z_b = \min[|L|, 0, 1h]$ e Ψ_m é a função estabilidade dada por Paulsen (1975).

Tabela 3.1 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen caso convectivo. Dados extraídos de Carvalho et al. (2002)

Run	$-L(m)$	$h(m)$	$u_*(ms^{-1})$	$U_{115m}(ms^{-1})$	$Q_{(gs^{-1})}$	$Dist.Amos(m)$	$C_{obs}(\mu gm^{-2})$
1	37	1980	0.36	3.4	3.2	1900	2074
1	37	1980	0.36	3.4	3.2	3700	739
2	292	1920	0.73	10.6	3.2	2100	1722
2	292	1920	0.73	10.6	3.2	4200	944
3	71	1120	0.38	5.0	3.2	1900	2624
3	71	1120	0.38	5.0	3.2	3700	1990
3	71	1120	0.38	5.0	3.2	5400	1376
4	133	390	0.38	4.6	2.3	4000	2682
5	444	820	0.45	6.7	3.2	2100	2150
5	444	820	0.45	6.7	3.2	4200	1869
5	444	820	0.45	6.7	3.2	6100	1590
6	432	1300	1.05	13.2	3.1	2000	1228
6	432	1300	1.05	13.2	3.1	4200	688
6	432	1300	1.05	13.2	3.1	5900	567
7	104	1850	0.64	7.6	2.4	2000	1608
7	104	1850	0.64	7.6	2.4	4100	780
7	104	1850	0.64	7.6	2.4	5300	535
8	56	810	0.69	9.4	3.0	1900	1248
8	56	810	0.69	9.4	3.0	3600	606
8	56	810	0.69	9.4	3.0	5300	456
9	289	2090	0.75	10.5	3.3	2100	1511
9	289	2090	0.75	10.5	3.3	4200	1026
9	289	2090	0.75	10.5	3.3	6000	855

Fonte: (CARVALHO et al., 2002)

3.1.10 Índices Estatísticos

Geralmente, avaliação do desempenho dos modelos é realizada através do emprego de índices estatísticos, exibidos na Tabela 3.2, os quais têm o objetivo de comparar os

resultados observados C_{obs} e previstos C_{pre} pelo modelo. Para verificar o desempenho do modelo Euleriano utilizado no presente trabalho, foram utilizados os índices propostos estatístico propostos por Hanna (1989). Na tabela 3.2, estão expressos os valores dos índices estatísticos que são esperados para uma situação na qual resultados simulados e observados estão em concordância.

Tabela 3.2 – Índices estatísticos

Erro quadrático médio normalizado ($NMSE$)	$\frac{((C_{obs})-(C_{pre}))^2}{C_{obs}C_{pre}}$	$NMSE \approx 0$
Coefficiente de correlação (COR)	$\frac{(C_{obs}-C_{pre})(C_{obs}-C_{pre})}{\sigma_{obs}\sigma_{pre}}$	$COR \approx 1$
Fração de inclinação (FB)	$\frac{(C_{obs}-C_{pre})}{0,5(C_{obs}+C_{pre})}$	$FB \approx 0$
Desvio fracional padrão (FS)	$\frac{2(\sigma_{obs}-\sigma_{pre})}{(\sigma_{obs}+\sigma_{pre})}$	$FS \approx 0$

Fonte: (HANNA, 1989)

3.2 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os processos que governam o transporte e a difusão de contaminantes na atmosfera são numerosos, e envolvem complexidades que tornariam impossível descrevê-las sem o uso de modelos matemáticos. Tais modelos constituem um instrumento técnico indispensável no estudo da qualidade do ar. Existe um número muito grande de diversos modelos matemáticos, que podem ser usados para avaliar o transporte e a difusão de contaminantes na atmosfera. Portanto, o fenômeno de difusão turbulenta na camada limite planetária, não apresenta uma única formulação. Isso significa que, atualmente, nenhuma aproximação matemáticas e física é capaz de explicar todos os fenômenos envolvidos na advecção e no transporte turbulento de contaminantes. Como consequência, no presente trabalho emprega-se um modelo no qual os fluxos turbulentos desconhecidos de concentração são parametrizados pelo emprego de coeficientes de difusão derivados a partir do modelo de difusão espectral de Taylor.

Com a finalidade de avaliar o modelo numérico Euleriano, descrito na seção 3.1.3, as concentrações simuladas serão comparadas com as concentrações observadas no experimento de Copenhagen. Para a realização das simulações foi empregado um domínio retangular arranjado. As dimensões do *box* grande são 7000x7000x2000 e do *box* pequeno são 40x40x25. O código do modelo LOD foi escrito em Fortran90. As simulações empregaram os parâmetros meteorológicos indicados na Tabela 3.1 Os dados observacionais

apresentados na tabela demonstrativa, Tabela 3.1, estão apresentados os dados meteorológicos do experimento de Copenhagen, na qual na coluna $C_{obs(\mu gm^{-2})}$ estão os dados observacionais do experimento de Copenhagen (CARVALHO et al., 2002). Na Tabela 3.3, na coluna $C_{obs(gm^{-2})}$, são apresentados os dados do experimento de dispersão de Copenhagen (CARVALHO et al., 2002) normalizados pela taxa de emissão $C_{obs(gm^{-2})}/Q_{(gs^{-1})}$, e na coluna $C_{pre(gm^{-2})}$ são apresentados os dados da simulação empregando o modelo Euleriano. Os dados meteorológicos dispostos na Tabela 3.1 foram utilizados para criar os arquivos de entrada para as simulações. Os resultados dos 23 experimentos foram realizados sob condições de convecção moderada e fraca ($-z_i/L < 10$).

As velocidades do vento, medidas em 115 metros, foram utilizadas para calcular os perfis logarítmicos do vento da seguinte forma:

$$U(z) = c \left\{ \frac{u_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_o}\right) - \Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) + \Psi_m\left(\frac{z_o}{L}\right) \right] \right\} \quad (3.60)$$

se $z > z_b$, onde $z_b = \min[|L|, 0, 1h]$ e Ψ_m é a função estabilidade dada por Paulsen (1975)

Os resultados da avaliação do modelo numérico Euleriano são apresentados nas Tabelas 3.3, 3.4 e na Figura 3.1. Por outro lado a Tabela 3.4 mostra os valores dos índices estatísticos originados da comparação entre os valores observados e previstos de concentração integrada perpendicular à direção do vento ao nível da superfície (C_y).

A Figura 3.1 mostra o diagrama de espalhamento para o confronto entre concentrações observadas e previstas pelo modelo numérico Euleriano. Pode ser observar desta figura que existe um certo espalhamento em relação a reta de perfeita concordância. Porém, percebe-se que os pontos se alinham em relação a esta reta, demonstrando que o modelo reproduz razoavelmente bem as concentrações experimentais observadas. Esta boa concordância é expressa pelos índices estatísticos da Tabela 3.4 que mostra valores pequenos para as quantidades $NMSE$, FB e FS e apresenta um valor próximo a 1 para COR

Tabela 3.3 – Resultados simulados a partir do emprego do modelo numérico Euleriano para a condição convectiva

Run	$Dist.Amos(m)$	$C_{obs}(gm^{-2})$	$C_{pre}(gm^{-2})$
1	1900	6,48	6,58
1	3700	2,30	5,75
2	2100	5,38	3,20
2	4200	2,95	6,21
3	1900	8,20	9,20
3	3700	6,21	6,21
3	5400	4,30	4,30
4	4000	11,66	11,42
5	2100	6,71	5,95
5	4200	5,84	5,71
5	6100	4,56	4,27
6	2000	3,96	2,33
6	4200	2,22	2,25
6	5900	1,82	1,67
7	2000	6,70	3,96
7	4100	3,25	3,07
7	5300	2,23	3,07
8	1900	4,16	4,17
8	3600	2,02	4,06
8	5300	1,52	3,49
9	2100	4,58	4,01
9	4200	3,11	3,60
9	6000	2,59	2,70

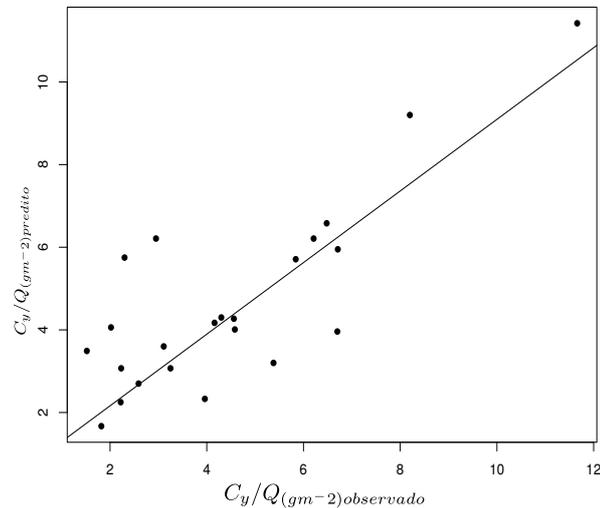
Fonte: (FERREIRA, 2016)

Tabela 3.4 – Índices estatísticos da performance do modelo numérico Euleriano para o experimento de difusão de Copenhagen.

Erro quadrático médio normalizado(<i>NMSE</i>)	0,0684
Coefficiente de correlação (<i>COR</i>)	0,84
Fração de inclinação (<i>FB</i>)	-0,004
Desvio fracional padrão (<i>FS</i>)	0,075

Fonte: (FERREIRA, 2016)

Figura 3.1 – Diagrama de espalhamento entre as concentrações observadas e previstas c_y/Q .



Fonte: (FERREIRA, 2016)

3.3 CONCLUSÃO

Em trabalhos anteriores, a dispersão atmosférica em uma camada limite convectiva, é descrita a partir do estudo de suas principais características. Essas são demonstradas através de predições numéricas por Lamb (1981) e RIZZA et al. (2003), observações de campo por Nieuwstadt (1980), e, de modo mais detalhado, por meio de experimentos em laboratórios por Willis e Deardorff (1976). Esses estudos mostram que a dispersão, geralmente, está relacionada a altura da fonte z_s e são classificados em duas condições: fontes superficiais ($z_s/h < 0,1$) e fontes elevadas ($0,1 < z_s/h < 1$).

O presente trabalho apresenta o desenvolvimento de uma solução numérica aplicada a um modelo de difusão Euleriano. O estudo tem como proposição simular e reproduzir o campo de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais contínuas na

camada limite planetária. A solução tem como ponto de partida o desenvolvimento de um modelo baseado na equação de advecção-difusão. A parametrização empregada nessa solução é derivada da teoria de difusão estatística de Taylor.

A avaliação dos resultados simulados pelo novo modelo numérico Euleriano é realizada comparando-se os dados de concentração observada do experimento de Copenhague com as concentrações simuladas pelo modelo numérico Euleriano. Os resultados mostram que o modelo numérico Euleriano reproduz razoavelmente bem as concentrações observadas a partir do experimento de Copenhague. A comparação entre as concentrações simuladas com aquelas observadas apresenta um espalhamento razoável, porém o diagrama de espalhamento (Figura 3.1) mostra que, em geral, os pontos seguem a reta idealizada de concordância. Adicionalmente, os índices estatísticos apresentados na Tabela 3.4 demonstram claramente que o modelo reproduz de forma satisfatória os dados das concentrações observadas. Com base na análise apresentada acima, pode-se concluir que o novo modelo Euleriano numérico de dispersão é adequado para simular o campo de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais contínuas e elevadas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AHLBERG, J. H.; NILSON, E. N.; WALSH, J. L.: **The theory of splines and their application**. Academic Press, 1967.

ANADREN, A. BROWN, A. R.; MASON, P. J.; GRAF, J.; SCHUMANN, U.; MOENG, C. H.; NIEUWSTADT, F. T. M.: Large-eddy simulation of a neutrally stratified boundary layer: A comparison of four computer codes. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society** , Wiley Online Library, v. 120, n. 520, p. 1457-1484, 1994.

BATCHELOR, G.: Diffusion in a field of homogeneous turbulence. I. Eulerian analysis. **Australian Journal of Chemistry**, CSIRO, v. 2, n. 4, p. 437-450, 1949.

BERKOWICZ, R.; OLESEN, H.; TORP, U.: The danish gaussian air pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. Springer, p. 453-481, 1986.

BLACKADAR, A. K.: Turbulence and diffusion in the atmosphere. **Turbulence and diffusion in the atmosphere**, Publisher: Berlin: Springer, 1997 Lectures in environmental sciences, ISBN: 3540614060, 1997.

BUSKE, D.: **Solução GILTT bidimensional em geometria cartesiana: Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera**. 2008. Tese (Doutorado)- Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, 2008.

CARVALHO, J. C.; DEGRAZIA, G. A.; ANFOSSI, D.; CAMPOS, C. R. J.; ROBERTI, D. R., KERR, A. S.: Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. **Meteorologische Zeitschrift**, v 11, p. 89-97, 2002.

DEGRAZIA, G. A.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J. C.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. F.: Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment** v34 p. 3575-3583, 2000.

DEGRAZIA, G. A.; CAMPOS VELHO, H. F.; CARVALHO, J. C.: Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contributions to Atmospheric Physics** Vieweg v. 70, n. 1, p. 57-64, 1997

DEGRAZIA, G. A., MALDANER, S., FERREIRA, C. P., SILVEIRA, V.C., RIZZA, U. MOREIRA, V.S., BUSKE, D.: Employing Eddy Diffusivities to Simulate the Contaminants Dispersion for a Shear Dominated-Stable Boundary Layer. Springer, p. 155-161, 2015

DEGRAZIA, G., MORAES, O. L.: A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology** , Springer, v. 58, n. 3, p. 205-214, 1992.

DEGRAZIA, G. A.; MORAES, O. L.: Simulação numérica da dispersão de poluentes em camadas limites planetárias convectiva e estável. *Revista Brasileira de Meteorologia* , v. 4, n. 1, p. 275-287, 1989.

DEGRAZIA, G. A.; MORAES, O. L.; OLIVEIRA, A. P. An analytical method to evaluate mixing length scales for the planetary boundary layer. **Journal of Applied Meteorology** , v. 35, n. 6, p. 974-977, 1996.

FORESTER, C.: Higher order monotonic convective difference schemes. **Journal of Computational Physics** , Elsevier, v. 23, n. 1, p. 122, 1977.

GRYNING, S.; HOLTSLAG, A. A. M; IRWIN, J. S.; SIVERTSEN, B.: Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment (1967)** , Elsevier, v. 21, n. 1, p. 79-89, 1987.

HANNA, S. R.: Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment (1967)** , Elsevier, v. 23, n. 6, p. 1385-1398, 1989.

IRWIN, J. S.: A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment (1967)** , Elsevier, v. 13, n. 1, p. 191-194, 1979.

LAMB, R. G. A numerical investigation of tetraoan versus fluid particle dispersion in the convective planetary boundary layer. **Journal of Applied Meteorology** , v. 20, n. 4, p. 391-403, 1981.

MAHRER, Y.; PIELKE, R. A. A test of an upstream spline interpolation technique for the advective terms in a numerical mesoscale model. **Monthly weather review** , v. 106, n. 6, p. 818-830, 1978

MARCHUK, G.; YANENKO, N.: The application of the splitting-up method (fractional steps) to problems of mathematical physics. *Some Problems of Numerical And Applied Mathematics* , 1966.

MCRAE, G. J.; GOODIN, W. R.; SEINFELD, J. H.: Numerical solution of the atmospheric diffusion equation for chemically reacting flows. **Journal of Computational Physics** , Elsevier, v. 45, n. 1, p. 1-42, 1982.

NIEUWSTADT, F. T.: The turbulent structure of the stable, nocturnal boundary layer. **Journal of the atmospheric sciences** , v. 41, n. 14, p. 2202-2216, 1984.

OLESEN, H. R.; LARSEN, S. E.; HOJSTRUP, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology** , Springer, v. 29, n. 3, p. 285-312, 1984.

PASQUILL, F.: **Atmospheric diffusion: the dispersion of wind borne material from industrial and other sources**. Ellis Horwood, 1974

PASQUILL, F.; SMITH, F.: **Atmospheric diffusion.: Study of the dispersion of windborne material from industrial and other sources**. 1983.

PAULSON, C. A.: The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in the unstable atmospheric surface layer. **Journal of Applied Meteorology** , v. 9, n. 6, p. 857-861, 1970.

PRICE, G.; MACPHERSON, A.: A numerical weather forecasting method using cubic splines on a variable mesh. **Journal of applied meteorology**, v. 12, n. 7, p. 1102-1113, 1973.

RIZZA, U.; GIOIA, G.; MANGIA, C.; MARRA, G. P.: Development of a grid-dispersion model in a large eddy simulation generated planetary boundary layer. **Il Nuovo cimento della Società italiana di fisica. C. Geophysics and space physics** , Società italiana di fisica, v. 26, n. 3, p. 297-309, 2003.

SORBJAN, Z. Local similarity of spectral and cospectral characteristics in the stable continuous boundary layer. **Boundary Layer Meteorology**, Springer, v. 35, n. 3, p. 257-275, 1986.

TIRABASSI, T.: Dispersão euleriana na camada limite planetária. **Moreira, D. M., Carvalho, J. C., Vilhena, M. T.: Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária. Porto Alegre: UFRGS, p. 59-78, 2005.**

VILHENA, M.; CARVALHO, J. C.; MOREIRA, D.: Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária. 2005.

WANDEL, C.; KOFOED-HANSEN, O.: On the Eulerian-Lagrangian transform in the statistical theory of turbulence. **J. Geophys. Res**, v. 67, n. 8, p. 3089-3093, 1962.

WILLIS, G.; DEARDORFF, J.: A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, Wiley Online Library**, v. 102, n. 432, p. 427-445, 1976.

YANENKO, N. N. **The method of fractional steps**, Springer, 1971.

4 DISCUSSÃO

Nas seções (2.1.2) e (3.2) são mostrados os resultados das simulações dos modelos Eulerianos: semi-analítico GILTT e numérico Euleriano LOD. Os métodos utilizados neste trabalho investigaram os problemas de modelagem da dispersão de poluente na atmosfera em diferentes condições, estável e moderadamente convectiva. Em ambos os métodos são consideradas parametrizações turbulentas aplicadas a estas condições de estabilidade que permitam a modelagem. O desempenho dos modelos empregou comparações entre concentrações observadas e simuladas e fez uso de um conjunto de índices estatísticos que permitiu avaliar os modelos de dispersão. Este conjunto de índices são capazes de nos dar as seguintes informações sobre as simulações:

- NMSE: Está associado aos desvios entre concentrações previstas e observadas.
- FB: Informa a tendência do modelo em superestimar ou subestimar as concentrações observadas
- FS: Informa o quanto o modelo consegue simular a dispersão do contaminante quando comparado os valores observados e previstos pelo modelo.
- FA2: Informa a confiabilidade do modelo.
- COR: Estabelece o nível de relação entre duas variáveis

Para avaliar o modelo semi-analítico GILTT, Artigo 1, empregou-se o coeficiente de difusão vertical para uma camada limite estável expresso pela equação 2.7 e os dados do experimento de Hanford. Os resultados da simulação são avaliados e mostrados na Tabela 2.2 e na Figura 2.1. A avaliação da performance do modelo é feita a partir da análise estatística proposta por Hanna (1989), que compararam as magnitudes observadas e simuladas da concentração integrada ao nível do solo. Os índices *NMSE*, *FB* e *FS* representam bons resultados quando os seus resultados estão próximos a zero, enquanto, *FA2* e *COR* são considerados bons resultados para valores próximos a um. Entretanto, na análise da magnitude dos índices estatísticos, juntamente com diagrama de espalhamento, Figura 2.1, pode-se concluir que a solução apresentada pelo modelo semi-analítico GILTT reproduz de maneira satisfatória as concentrações observadas no experimento de Hanford.

Para avaliar o modelo numérico Euleriano LOD, Artigo 2, empregou-se um coeficiente de difusão assintótico para uma camada limite convectiva expresso pela equação 3.16 e os dados do experimento de Compenhagen. O desempenho do modelo, bem como, os resultados da simulação são avaliados a partir da análise estatística proposta por Hanna (1989), no qual compararam as magnitudes observadas e preditas. Esses índices, descritos anteriormente, avaliam estatisticamente o modelo de dispersão Euleriano. Contudo,

é possível observar que da mesma forma que no modelo GILTT os índices *NMSE*, *FB* e *FS* apresentam seus resultados próximos a zero, enquanto que o índice *COR* apresenta seu resultado com um valor próximo a 1. Os resultados dos índices estatísticos relacionados ao novo modelo mostram que a simulação numérica reproduziu razoavelmente bem as concentrações observadas a partir das condições meteorológicas do experimento de Compenhagen.

As duas soluções apresentam desenvolvimentos particulares, para cada desempenho são considerados e empregados diferentes condições meteorológicas, cada um de acordo com o experimento de validação utilizado. Entretanto, para o modelo semi-analítico GILTT, foram considerados e empregados, a altura da camada limite e um perfil da velocidade do vento e para o modelo de dispersão numérico Euleriano LOD, foram determinadas as escalas de velocidade a partir da expressão 3.58 e os perfis logarítmicos do vento foi utilizado a expressão 3.59.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho emprega-se a equação de difusão-advecção e os coeficientes de difusão turbulentos. Para calcular o campo de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais em condições estáveis e moderadamente convectivas.

No Artigo 1, apresentou-se a solução para a técnica semi-analítica GILTT. O modelo euleriano semi-analítico é aplicado a condições estáveis, nas quais a turbulência é gerada pelo cisalhamento do vento. Para obter as soluções do modelo foram empregados o coeficiente de difusão vertical. Para a derivação desse coeficiente foi necessário basear-se no modelo de difusão estatística de Taylor e na teoria de similaridade local. Estas parametrizações foram empregadas no modelo semi-analítico GILTT, este baseia-se na equação de difusão-advecção. O coeficiente de difusão vertical foi empregado na equação de difusão-advecção para simular as novas concentrações observadas do experimento de Hanford ao nível do solo. Os resultados das simulações mostraram que as concentrações simuladas reproduziram de maneira satisfatória o campo de concentração de contaminantes observados no experimento de Hanford.

No Artigo 2, apresenta-se o desenvolvimento de uma solução numérica Euleriana para a equação de difusão-advecção a partir do método LOD (métodos de diferenças finitas). Neste estudo simulou-se e reproduziu-se o campo de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais contínuas na camada limite atmosférica. As soluções foram determinadas a partir do emprego do coeficiente de difusão assintótico para uma camada limite turbulenta moderadamente convectiva. Este coeficiente foi derivado a partir das considerações do modelo de difusão estatístico de Taylor. O coeficiente foi empregado no modelo numérico Euleriano, método numérico LOD, que baseia-se na técnica *splitting*. O método numérico LOD é uma técnica de resolução para a equação de difusão-advecção, no qual é descrita a partir de uma soma de operadores diferenças. Os resultados simulados pelo modelo numérico Euleriano foram comparados com os dados de concentração observado do experimento de Copenhague. Em uma avaliação crítica, observou-se que os resultados mostrados pelo modelo numérico reproduziu razoavelmente bem as concentrações observadas do experimento de Copenhague. As observações realizadas a partir do diagrama de espalhamento, (Figura 3,1), mostra que, em geral, os pontos apresentam um espalhamento razoável e seguem a reta idealizada de concordância. Juntamente a isso, na Tabela 3.4, observou-se que os índices estatísticos apresentados, mostram que o modelo reproduz de modo satisfatório os dados de concentrações observados do experimento de Copenhague. Sendo assim, conclui-se que o modelo numérico Euleriano de dispersão simula adequadamente o campo de concentração de contaminantes liberados por fontes pontuais contínuas e elevadas.

Percebe-se que ambos os modelos apresentam resultados no qual existe uma boa

acordância entre as concentrações observadas e as simuladas. Essa observação é possível a partir dos resultados da análise estatística proposta por Hanna (1989). A partir dos índices estatísticos apresentados nas Tabelas 2.2 e 3.3 foi possível aferir que os modelos apresentam desempenho *COR* e confiabilidade *FA2* satisfatórios, pois esses índices devem estar dentro de um intervalo característico e que são encontrados em diferentes modelos para aplicação na dispersão de contaminates. Sendo assim, é possível também ressaltar que os resultados dessas simulações, e o bom desempenho dos modelos podem servir de alternativas para novos experimentos fornecendo dados de dispersão no qual outros modelos de dispersão poderão ser testados, podendo ser utilizados para a aplicação no controle de qualidade do ar.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AHLBERG, J. H.; NILSON, E. N.; WALSH, J. L. The theory of splines and their application. Academic Press, 1967.

ALVES, I. P. **Derivação de coeficientes de difusão turbulenta em condições de vento norte: Aplicação de um modelo analítico euleriano de dispersão de poluentes**. 2012. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Maria, 2012.

ANDREN, A. et al. Large-eddy simulation of a neutrally stratified boundary layer: A comparison of four computer codes. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, Wiley Online Library, v. 120, n. 520, p. 1457–1484, 1994.

BATCHELOR, G. Diffusion in a field of homogeneous turbulence. I. Eulerian analysis. **Australian Journal of Chemistry**, CSIRO, v. 2, n. 4, p. 437–450, 1949.

BERKOWICZ, R.; OLESEN, H.; TORP, U. The Danish Gaussian air pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. Springer, p. 453–481, 1986.

BLACKADAR, A. K. Turbulence and diffusion in the atmosphere. **Turbulence and diffusion in the atmosphere, Publisher: Berlin: Springer, 1997 Lectures in environmental sciences, ISBN: 3540614060**, 1997.

BUSKE, D. **Solução GILTT bidimensional em geometria cartesiana: Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera**. 2008. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, 2008.

BUSKE, D. et al. A general analytical solution of the advection–diffusion equation for fickian closure. Springer, p. 25–34, 2011.

CARVALHO, J. D. C. et al. Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. **Meteorologische Zeitschrift**, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, v. 11, n. 2, p. 89–97, 2002.

CHAMPAGNE, F. et al. Flux measurements, flux estimation techniques, and fine-scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 34, n. 3, p. 515–530, 1977.

DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D. Estimation of the Kolmogorov constant C_0 from classical statistical diffusion theory. **Atmospheric Environment**, Elsevier, v. 32, n. 20, p. 3611–3614, 1998.

DEGRAZIA, G. et al. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. Springer, p. 745–746, 2000.

DEGRAZIA, G.; Campos Velho, H.; CARVALHO, J. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contributions to Atmospheric Physics**, Vieweg, v. 70, n. 1, p. 57–64, 1997.

DEGRAZIA, G. et al. Turbulence and dispersion of contaminants in the planetary boundary layer. CRC Press, p. 33–68, 2009.

_____. Employing Eddy Diffusivities to Simulate the Contaminants Dispersion for a Shear Dominated-Stable Boundary Layer. Springer, p. 155–161, 2015.

DEGRAZIA, G.; MORAES, O. L. A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, Springer, v. 58, n. 3, p. 205–214, 1992.

DEGRAZIA, G. A. **Tópicos em turbulência e modelagem da dispersão de poluentes na camada limite planetária**. [S.l.: s.n.], 2005.

DEGRAZIA, G. A.; MORAES, O. L. Simulação numérica da dispersão de poluentes em camadas limites planetárias convectiva e estável. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 4, n. 1, p. 275–287, 1989.

DEGRAZIA, G. A.; MORAES, O. L.; OLIVEIRA, A. P. An analytical method to evaluate mixing length scales for the planetary boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, v. 35, n. 6, p. 974–977, 1996.

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**, v. 40, n. 7, p. 1233–1240, 2001.

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

GONSALVES, J. B. **Emprego de um modelo de dispersão turbulento no estudo da universalidade da taxa de dissipação da energia**. 2010. Tese (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Maria, 2010.

GRYNING, S.-E. et al. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment (1967)**, Elsevier, v. 21, n. 1, p. 79–89, 1987.

HANNA, S. R. Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmospheric Environment (1967)**, Elsevier, v. 23, n. 6, p. 1385–1398, 1989.

IRWIN, J. S. A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment (1967)**, Elsevier, v. 13, n. 1, p. 191–194, 1979.

LAMB, R. G. A numerical investigation of tetraon versus fluid particle dispersion in the convective planetary boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, v. 20, n. 4, p. 391–403, 1981.

MAHRER, Y.; PIELKE, R. A. A test of an upstream spline interpolation technique for the advective terms in a numerical mesoscale model. **Monthly weather review**, v. 106, n. 6, p. 818–830, 1978.

MALDANER, S. et al. Derivation of third-order vertical velocity turbulence moment in the convective boundary layer from large eddy simulation data: An application to the dispersion modeling. **Atmospheric Pollution Research**, Elsevier, v. 4, n. 2, p. 191–198, 2013.

MARCHUK, G.; YANENKO, N. The application of the splitting-up method (fractional steps) to problems of mathematical physics. **Some Problems of Numerical And Applied Mathematics**, 1966.

MCRAE, G. J.; GOODIN, W. R.; SEINFELD, J. H. Numerical solution of the atmospheric diffusion equation for chemically reacting flows. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 45, n. 1, p. 1–42, 1982.

MOREIRA, D. et al. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, Elsevier, v. 92, n. 1, p. 1–17, 2009.

MOREIRA, V. S. et al. Employing a Lagrangian stochastic dispersion model and classical diffusion experiments to evaluate two turbulence parameterization schemes. **Atmospheric Pollution Research**, Elsevier, v. 2, n. 3, p. 384–393, 2011.

NIEUWSTADT, F. An analytic solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment (1967)**, Elsevier, v. 14, n. 12, p. 1361–1364, 1980.

NIEUWSTADT, F. T. The turbulent structure of the stable, nocturnal boundary layer. **Journal of the atmospheric sciences**, v. 41, n. 14, p. 2202–2216, 1984.

OLESEN, H. R.; LARSEN, S. E.; HØJSTRUP, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, Springer, v. 29, n. 3, p. 285–312, 1984.

PASQUILL, F. **Atmospheric diffusion: the dispersion of wind borne material from industrial and othe sources**. [S.l.]: Ellis Horwood, 1974.

PAULSON, C. A. The mathematical representation of wind speed and temperature profiles in the unstable atmospheric surface layer. **Journal of Applied Meteorology**, v. 9, n. 6, p. 857–861, 1970.

PRICE, G.; MACPHERSON, A. A numerical weather forecasting method using cubic splines on a variable mesh. **Journal of applied meteorology**, v. 12, n. 7, p. 1102–1113, 1973.

RIZZA, U. et al. Development of a grid-dispersion model in a large-eddy-simulation-generated planetary boundary layer. **Il Nuovo cimento della Società italiana di fisica. C. Geophysics and space physics**, Società italiana di fisica, v. 26, n. 3, p. 297–309, 2003.

SORBJAN, Z. Local similarity of spectral and cospectral characteristics in the stable-continuous boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, Springer, v. 35, n. 3, p. 257–275, 1986.

STEENEVELD, G.; HOLTSLAG, A. Meteorological Aspects of Air Quality, in Air Quality in the 21st Century. **G.C. Romano, and A.G. Conti**, Elsevier, p. 67–114, 2009.

STULL, R. B. **An introduction to Boundary meteorology**. [S.l.]: Kluwer Academic Publishers Dordrecht, 1988.

TIRABASSI, T. Dispersão euleriana na camada limite planetária. **MOREIRA, Davidson Martins; CARVALHO, Jonas da Costa; VILHENA, Marco Túlio. Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária. Porto Alegre: UFRGS**, p. 59–78, 2005.

WANDEL, C.; KOFOED-HANSEN, O. On the Eulerian-Lagrangian transform in the statistical theory of turbulence. **J. Geophys. Res**, v. 67, n. 8, p. 3089–3093, 1962.

WELTER, G. S. **Leis de escala e análise do fenômeno de intermitência em turbulência bem desenvolvida**. 2010. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Maria, 2010.

WILLIS, G.; DEARDORFF, J. A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, Wiley Online Library, v. 102, n. 432, p. 427–445, 1976.

WORTMANN, S.; MOURA, A.; VILHENA, M. Solução Analítica para o problema unidimensional transiente de dispersão de poluentes com coeficiente de difusão variável. **Anais ENCIT**, 2000.

YANENKO, N. N. **The method of fractional steps**. [S.l.]: Springer, 1971.

ZANNETTI, P. **Air Quality Modeling**. [S.l.: s.n.], 2003.

APÊNDICE A – PARÂMETRO DE DISPERSÃO PARA UMA CAMADA LIMITE ESTÁVEL DOMINANDA POR CISALHAMENTO

A componente para o espectro de velocidade turbulenta euleriano adimensional para a condição estável é definida por Degrazia e Moraes (1992) e Degrazia et al. (2000)

$$\frac{nS_i^E(n)}{U_*^2} = \frac{1,5c_i f \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}}}{[(f_m)_i]^{\frac{5}{3}} \left\{ 1 + \frac{1,5f^{\frac{5}{3}}}{[(f_m)_i]^{\frac{5}{3}}} \right\}} \quad (\text{A.1})$$

onde $c_i = \alpha_i(0,5 \pm 0,005)(2\pi k)^{\frac{-2}{3}}$ com $\alpha = 1, \frac{4}{3}$ e $\frac{4}{3}$ respectivamente para as componentes u, v e w , U_* é velocidade de fricção local, $u_* = (u_*)_0(1 - \frac{z}{h})^{\frac{3}{4}}$, h é a altura da camada limite estável ϕ_ε é a taxa de dissipação, f é a frequência reduzida $f = \frac{nz}{U}$, é a altura acima da superfície, k é a constante de Von Karman $k = 0,40$ e $(f_m)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral, definida por

$$(f_m)_i = (f_m)_{i0} \left[1 + 3,7 \frac{z}{h} \frac{\frac{h}{L}}{(1 - \frac{z}{h})^{(\frac{3\alpha_1}{2} - \alpha_2)}} \right] \quad (\text{A.2})$$

onde $\alpha_1 = \frac{3}{2}$ e $\alpha_2 = 1$.

Para reproduzir o parâmetro de dispersão segundo Degrazia et al. (2000) emprega-se a teoria da similaridade para camada limite estável apresentada por Sorbjan (1986), considera-se que a turbulência é contínua, logo define-se na camada limite estável o comprimento e as escalas de velocidades locais

$$\frac{\Lambda}{L} = (1 - \frac{z}{h})^{(\frac{3\alpha_1}{2} - 2)} \quad (\text{A.3})$$

e

$$t_* = T_* (1 - \frac{z}{h})^{(\alpha_2 - \frac{\alpha_1}{2})} \quad (\text{A.4})$$

Definidas essas expressões integra-se analiticamente o espectro de velocidade turbulenta sob todos os domínios de frequência e obtém-se um expressão para a variância da velocidade na camada limite estável

$$\sigma_i^2 = \int_0^\infty S_i(n) dn \quad (\text{A.5})$$

sendo assim, resolve-se a seguinte integral

$$\sigma_i^2 = U_*^2 1,5c_i \frac{z}{U} \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} \int_0^\infty \frac{1}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}} \left[1 + 1,5 \frac{(\frac{z}{U})^{\frac{5}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}}} n^{\frac{5}{3}} \right]} dn \quad (\text{A.6})$$

reconhecendo

$$\begin{aligned}
 &= \int_0^{\infty} \frac{dn}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}} + 1, 5 \left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}} n^{\frac{5}{3}}} \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{dx}{a + bx^p}
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

com $a = (f_m)_i^{\frac{5}{3}}, 1, 5 \left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}}$ e $p = \frac{5}{3}$.

Fazendo as mudanças de variáveis

$$\begin{aligned}
 x &= \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{1}{p}} z \\
 x^p &= \frac{a}{b} z^p
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

$$dx = \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{1}{p}} dz \tag{A.9}$$

retornando à integral

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{1}{p}} \int_0^{\infty} \frac{dz}{a + b\left(\frac{a}{b}\right)z^p} &= \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{1}{p}} \int_0^{\infty} \frac{dz}{a(1 + z^p)} \\
 &= \frac{1}{a} \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{1}{p}} \int_0^{\infty} \frac{dz}{(1 + z^p)}.
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

Fazendo uso do teorema de resíduos

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} \frac{dz}{1 + z^p} &= \frac{\pi}{p \sin \frac{\pi}{p}} \\
 \int_0^{\infty} \frac{dx}{a + bx^p} &= \frac{1}{a} \left(\frac{a}{b}\right)^{\frac{1}{p}} \frac{\pi}{p \sin \frac{\pi}{p}} \\
 &= \frac{1}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}} \left[1, 5 \left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}}\right]^{\frac{5}{3}}} \frac{\pi}{\frac{5}{3} \sin \pi \frac{3}{5}} \\
 &= \frac{\pi}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}} 1, 5 \left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}} \sin \frac{3\pi}{5}}
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Logo,

$$\begin{aligned}\sigma_i^2 &= 1,5c_i \frac{z}{U} \left[\frac{\pi}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}} (1,5)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}} \sin \frac{3\pi}{5}} \right] \\ &= \frac{c_i \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} u_*^2 \pi (1,5)}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}} (1,666)(0,95)(1,2754)}\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

assim, define-se a equação da variância da velocidade turbulenta para a camada limite estável

$$\sigma_i^2 = \frac{2,32c_i \phi_i^{\frac{1}{3}} u_*}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}}\quad (\text{A.13})$$

Para definir o espectro normalizado é necessário fazer a razão entre da expressão do espectro da velocidade turbulenta pela variância da velocidade turbulenta, como é demonstrado na seguinte equação

$$F_i^E(n) = \frac{0,65 \frac{z}{U}}{(f_m)_i \left[1 + 1,5 \frac{\left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}}} n^{\frac{5}{3}} \right]}\quad (\text{A.14})$$

Para encontrar a equação do parâmetro de dispersão para uma camada limite estável dominada por cisalhamento emprega-se a equação geral definida por Pasquill (1974)

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \left[\frac{\sin^2\left(\frac{\pi n t}{\beta}\right)}{n^2} \right] dn\quad (\text{A.15})$$

onde $\alpha = x, y$ e z , $i = u, v$ e w , $F_i^E(n)$ é o valor do Espectro Euleriano de energia normalizado pela variância da velocidade Euleriana, β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriano, σ_i^2 é a variância da velocidade turbulenta, n é a frequência e t é o tempo de viagem da partícula. De acordo com ??), β_i e $F_i^E(n)$ podem ser escritos como:

$$\beta_i = \left(\frac{\pi U_2}{16 \sigma_i^2} \right)^{\frac{1}{2}}\quad (\text{A.16})$$

$$F_i^E(n) = \frac{0,65 \left(\frac{z}{U}\right)}{(f_m)_i} \left[1 + 1,5 \frac{\left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}}} n^{\frac{5}{3}} \right]\quad (\text{A.17})$$

ao definir essas expressões é necessário retornar a equação de Pasquill (1974) e fazer algumas substituições algébricas, como segue

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{U}{16\pi} \int_0^\infty \frac{0,65\left(\frac{z}{U}\right) \sin^2\left(\frac{n\pi t}{\beta_i}\right)}{(f_m)_i \left[1 + 1,5 \frac{\left(\frac{z}{U}\right)^{\frac{5}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}}} \right]} \frac{dn}{n^2} \quad (\text{A.18})$$

o argumento do *sin* é definido como

$$\begin{aligned} \frac{n\pi t}{\beta_i} = a &= n4\pi^{\frac{1}{2}} \frac{x\sigma_i}{UU} \\ &= 4\pi^{\frac{1}{2}} n \frac{x}{UU} \left(\frac{(2,32)^{\frac{1}{2}} c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} u_*}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}}} \right) \frac{h}{h} \\ &= \frac{4n\pi^{\frac{1}{2}} (2,32)^{\frac{1}{2}} c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} h}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}} U} \\ &= 4n\pi^{\frac{1}{2}} X'(2,32)^{\frac{1}{2}} c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} \frac{h}{U} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

onde

$$\begin{aligned} t &= \frac{x}{U} \\ X' &= \frac{xu_*}{Uh} \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Fazendo uma mudança de variáveis

$$\begin{aligned} n' &= bn \\ n &= \frac{n'}{b} \\ dn &= \frac{1}{b} dn' \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Retornando à integral de Pasquill (1974), definimos as seguintes expressões

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{U}{16\pi} \frac{0,65z}{(f_m)_i} \int_0^\infty \frac{\sin^2\left(\frac{a}{b}n'\right)}{\left[1 + \left(\frac{b^{\frac{5}{3}} n'^{\frac{5}{3}}}{b^{\frac{5}{3}}} \right) \right]} \frac{dn}{\left(\frac{n'}{b}\right)^2} \quad (\text{A.22})$$

assim, é determinado o parâmetro de dispersão para uma camada limite estável dominada por cisalhamento com dependência do fator $\frac{z}{h}$ e da distância adimensional da fonte (DEGRAZIA; MORAES, 1992),

$$\frac{\sigma_\alpha^2}{h^2} = \frac{0,016 \frac{z^2}{h^2}}{(f_m)_i^2} \int_0^\infty \frac{\sin^2 \left(\frac{X' 8,47 c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{2}} (f_m)_i^{\frac{2}{3}} n'}{\frac{z}{h}} \right)}{[1 + n'^{\frac{5}{3}}] n'^2} dn' \quad (\text{A.23})$$

Derivação do coeficiente de difusão turbulenta para uma camada limite estável dominada por cisalhamento na forma integral

Para a seguinte derivação são empregados a teoria de similaridade local e o espectro de velocidade turbulenta na teoria de difusão estatística de Taylor. O coeficiente de difusão derivado por Degrazia et al. (2015) é definido a partir da teoria de Batchelor (1949)

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt} \quad (\text{A.24})$$

no qual é possível obter a expressão geral para o coeficiente de difusão a partir da equação do parâmetro de dispersão

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin \left(\frac{2n\pi t}{\beta_i} \right)}{n} dn \quad (\text{A.25})$$

ao derivar o coeficiente de difusão para a camada limite estável são necessários o emprego das expressões β_i definida por Wandel e Kafoed-Hansen (1962), a equação do espectro de velocidade é definida por Degrazia et al. (2000) juntamente com a variância da velocidade turbulenta, σ_i^2 , (DEGRAZIA et al., 2000), bem como, a frequência do pico espectral e o comprimento de Monin-Obukhov local. Essas constantes já foram definidas na seção anterior para a determinação do parâmetro de dispersão.

Retornando a equação de Batchelor (1949) é necessário definir algumas expressões matemáticas para determinar o coeficiente de difusão turbulento. O espectro Euleriano normalizado é definido pela razão do espectro de velocidade pela variância da velocidade turbulenta, como segue

$$F_i^E(n) = \frac{1,5 c_i \left(\frac{z}{U} \right) \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} u_*^2 (f_m)_i^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i \left[1 + 1,5 \frac{\left(\frac{nz}{U} \right)^{\frac{5}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{5}{3}}} \right]} \quad (\text{A.26})$$

ainda é necessário definir as seguintes expressões matemáticas

$$\frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} = \frac{(2,32)^{\frac{1}{2}} c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} u_*}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}} 8\pi^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{A.27})$$

$$a = \frac{8\pi^{\frac{1}{2}} (2,32)^{\frac{1}{2}} c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{3}{4}} X' h}{U (f_m)_i^{\frac{1}{3}}} \quad (\text{A.28})$$

$$b = (1, 5)^{\frac{3}{5}} \frac{\frac{z}{U}}{(f_m)_i} \quad (\text{A.29})$$

Para a frequência adimensional define-se

$$\begin{aligned} n' &= bn \\ n &= \frac{n'}{b} \\ dn' &= bdn \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Fazendo uso das expressões matemáticas a integral referente ao coeficiente de difusão pode ser ajustado da seguinte forma

$$K_\alpha = \frac{(2, 32)^{\frac{1}{2}} c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{3}} u_* U}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}} 8\pi^{\frac{1}{2}}} \int_0^\infty \frac{0, 64 \left(\frac{z}{h}\right) \sin\left(\frac{an'}{b}\right) b}{(f_m)_i \left[1 + b^{\frac{5}{3}} \frac{n'^{\frac{5}{3}}}{b^{\frac{5}{3}}}\right] bn'} dn' \quad (\text{A.31})$$

e a expressão do coeficiente de difusão para uma camada limite estável dominada por cisalhamento do vento é definida

$$\frac{K_\alpha}{u_* h} = \frac{0.07 \sqrt{c_i} (1 - z/h)^{3/4} z/h}{(f_m)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin[(18.24(1 - z/h)^{3/4} X') f(m)_i^{2/3} \frac{h}{z} n']}{(1 + n'^{5/3}) n'} dn' \quad (\text{A.32})$$

onde $n' = \frac{1.5z}{(f_m)_i U} n'$, $X' = \frac{xu_*}{hU}$. para $\alpha = z$ na equação anterior resulta:

$$\frac{K_z}{u_* h} = \frac{0.04(1 - z/h)^{3/4} z/h}{(f_m)_w^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\sin[(18.24(1 - z/h)^{3/4} X') (f_m)_w^{2/3} \frac{h}{z} n']}{(1 + n'^{5/3}) n'} dn' \quad (\text{A.33})$$

Coeficiente de difusão turbulento com comportamento assintótico para a camada limite estável dominada por cisalhamento do vento

Degrazia et al. (2000) define o coeficiente de difusão assintótico a partir da seguinte expressão

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\bar{X}^2}{2} \right) = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E (n \rightarrow 0)}{4} \quad (\text{A.34})$$

e o espectro Euleriano normalizado é definido por

$$F_i^E (n \rightarrow 0) = \frac{0, 64z}{U (f_m)_i} \quad (\text{A.35})$$

a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana para grandes tempos de viagem é definida por (DEGRAZIA; MORAES; OLIVEIRA, 1996) e (DEGRAZIA; Campos Velho; CARVALHO, 1997)

$$T_{Li} = \frac{\beta_i F_i^E(n \rightarrow 0)}{4} \quad (\text{A.36})$$

Logo,

$$T_{Li} = \frac{0,088z}{\sigma_i(f_m)_i} \quad (\text{A.37})$$

Para derivar o coeficiente de difusão turbulenta assintótico para uma turbulência gerada por efeitos mecânicos, no qual é desconsiderado a dependência da distância da fonte de contaminantes, considera-se que a derivada do espectro de energia cinética terá a seguinte frequência $n \rightarrow 0$. Sendo assim, a expressão para derivar o coeficiente de difusão é definido por

$$K_\alpha = \sigma_i^2 T_{Li} \quad (\text{A.38})$$

ou seja,

$$K_\alpha = \left(\frac{2,32c_i \phi_\varepsilon^{\frac{2}{3}} u_*^2}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \right) \left(\frac{0,088z}{\sigma_i(f_m)_i} \right) \quad (\text{A.39})$$

e

$$K_\alpha = \frac{0,134z c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{2}} u_*}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}} \quad (\text{A.40})$$

o coeficiente de difusão para o comportamento assintótico em uma camada limite estável a partir da substituições da frequência do pico espectral, $(f_m)_i = (f_m)_{0i} \left(1 + 3,7 \frac{z}{\Lambda}\right)$, e do comprimento de Monin-Obukhov local, $\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{5}{4}}$, é definido por

$$K_\alpha = \frac{0,134c_i^{\frac{1}{2}} \phi_\varepsilon^{\frac{1}{2}} (u_*)_0 \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{3}{4}}}{\left\{ (f_m)_{0i} \left[1 + 3,7 \frac{z}{L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{5}{4}}} \right] \right\}_i^{\frac{4}{3}}} \quad (\text{A.41})$$

APÊNDICE B – PARÂMETRO DE DIFUSÃO PARA UMA CAMADA LIMITE CONVECTIVA

A equação para o espectro de velocidade turbulento para a camada limite convectiva é definido por Degrazia e Anfossi (1998)

$$\frac{nS_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1,06c_i f \left(\psi \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{5/3} \left[1 + 1,5 \frac{f}{[(f_m)_i]}\right]^{5/3}} \quad (\text{B.1})$$

onde $i = u, v$ e w em que $c_v = c_w = 0,36$ e $c_u = 0,27$, a frequência reduzida é expressa por $f = \frac{nz}{U}$, z é a altura acima da superfície, z_i é a altura da camada convectiva, $(f_m)_i$ é a normalização da frequência do pico espectral, w_* é a escala da velocidade convectiva, $\psi = \frac{\varepsilon z_i}{w_*^3}$ é a função taxa de dissipação onde ε é a taxa de dissipação de energia cinética por unidade de tempo e unidade de massa do fluido. A expressão para variância da velocidade turbulenta é definida a partir da integração analítica da equação do espectro de velocidade turbulenta

$$\sigma_i^2 = \int_0^\infty S_i^E(n) dn \quad (\text{B.2})$$

fazendo as devidas substituições obtém-se a seguinte expressão

$$\sigma_i^2 = \int_0^\infty \frac{1,06c_i f \left(\psi \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} w_*^2}{[(f_m)_i]^{5/3} \left[1 + 1,5 \frac{f}{[(f_m)_i]}\right]^{5/3}} dn \quad (\text{B.3})$$

é necessário reconhecer as seguintes modificações algébricas:

$$a = 1,5 \frac{f}{[(f_m)_i]} \quad (\text{B.4})$$

assim obtém-se:

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06c_i z \left(\psi \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}} w_*^2}{U [(f_m)_i]^{5/3}} \int_0^\infty \frac{dn}{[1 + an]^{\frac{5}{3}}} \quad (\text{B.5})$$

considerando e empregando uma substituição de variáveis

$$u = 1 + an \quad (\text{B.6})$$

$$du = a dn$$

$$dn = \frac{du}{a}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \frac{dn}{[1+an]^{\frac{5}{3}}} &= \frac{1}{a} \int_0^\infty \frac{du}{u^{\frac{5}{3}}}, & (B.7) \\
&= \frac{1}{a} \int_0^\infty u^{-\frac{5}{3}} du, \\
&= \frac{1}{a} \left[\frac{u^{-\frac{5}{3}+1}}{-\frac{5}{3}+1} \right]_0^\infty, \\
&= \frac{1}{a} \left[\frac{u^{-\frac{2}{3}}}{-\frac{2}{3}} \right]_0^\infty, \\
&= \frac{1}{a} \left(\frac{-3}{2} \right) \left[\frac{1}{u^{\frac{2}{3}}} \right]_0^\infty, \\
&= \frac{12}{a3}
\end{aligned}$$

a partir da solução da integração é possível determinar a solução para a expressão da variância generalizada das velocidades turbulentas

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06c_i\psi^{\frac{2}{3}}w_*^2\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \quad (B.8)$$

onde a frequência normalizada associada ao máximo do espectro convectivo é definida por $f_m = \frac{z}{\lambda_m} = \frac{z}{1,5z_i}$.

O parâmetro de dispersão para uma camada limite convectiva é determinado a partir da expressão geral de Pasquill (1974)

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2\beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \left[\frac{\sin^2\left(\frac{\pi nt}{\beta}\right)}{n^2} \right] dn \quad (B.9)$$

onde $\alpha = x, y$ e z , $i = u, v$ e w , $F_i^E(n)$ é o valor do Espectro Euleriano de energia normalizado pela variância da velocidade Euleriana, β_i é definido como a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriano, σ_i^2 é a variância da velocidade turbulenta, n é a frequência e t é o tempo de viagem da partícula. De acordo com Wandel e Kafoed-Hansen (1962), β_i e $F_i^E(n)$ podem ser escritos como:

$$\beta_i = \left(\frac{\pi U_2}{16 \sigma_i^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (B.10)$$

$$F_i^E(n) = \frac{z}{U(f_m)_i} \left[1 + 1,5 \frac{f}{(f_m)_i} \right]^{\frac{-5}{3}} \quad (B.11)$$

a partir da equação de Pasquill (1974) é necessário fazer algumas manipulações algébricas

$$\sigma_{alpha}^2 = \frac{U^2}{16\pi} \int_0^\infty \frac{z}{U(f_m)_i \left[1 + \frac{1,5f}{(f_m)_i}\right]^{\frac{5}{3}}} \frac{\sin^2 \frac{n\pi t}{\beta}}{n^2} dn \quad (\text{B.12})$$

o argumento do sin é definido considerando as seguintes equações e empregando no argumento

$$t = \frac{x}{U},$$

$$X = \frac{w_* x}{z_i U},$$

$$\begin{aligned} \frac{n\pi t}{\beta} &= n4\pi^{\frac{1}{2}} \frac{\sigma_i x}{UU}, \\ &= \frac{n4\pi^{\frac{1}{2}(0,61)w_*}}{UU} \frac{z_i}{z_i}, \\ &= a = \frac{4,32z_i X}{U} \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

reorganizando a integral

$$\sigma_{alpha}^2 = \frac{1,5Uz_i}{16\pi} \int_0^\infty \frac{\sin^2 \left(\frac{4,32z_i X}{U} \right)}{n^2 \left[1 + 2,25 \frac{nz_i}{U}\right]} dn \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned} a &= \frac{3,32z_i X}{U}, \\ b &= 2,25 \frac{z_i}{U} \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

para definir o parâmetro de dispersão é necessário fazer a seguinte mudança de variável

$$\begin{aligned} n' &= bn \\ dn' &= bdn \\ dn &= \frac{dn'}{b} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

logo,

$$\sigma_{alpha}^2 = \frac{1,5Uz_i}{16\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(an)}{n^2[1+bn]^{\frac{5}{3}}} dn \quad (B.17)$$

empregando as mudanças de variáveis encontra-se a seguinte expressão

$$\sigma_{\alpha}^2 = \frac{1,5Uz_i}{16\pi} \int_0^{\infty} \frac{\sin^2\left(\frac{an'}{b}\right)^{\frac{1}{b}}}{\left[1 + \frac{bn'}{b}\right]^{\frac{5}{3}} \frac{n'^2}{b^2}} dn' \quad (B.18)$$

Retornando a equação de Pasquill (1974) e fazendo as devidas substituições algébricas, obtém-se o parâmetro de dispersão definido pela seguinte expressão

$$\sigma_{\alpha}^2 = 0,07z_i^2 \int_0^{\infty} \frac{\sin^2(1,92z_iX)}{[1+n']n'^2} dn' \quad (B.19)$$

Derivação do coeficiente de difusão turbulenta para a camada limite planetária

O coeficiente de difusão é definido a partir da expressão definida por ??)

$$K_{\alpha} = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_{\alpha}^2}{dt} \quad (B.20)$$

no qual é possível obter a expressão geral para o coeficiente de difusão a partir da equação do parâmetro de dispersão

$$K_{\alpha} = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^{\infty} F_i^E(n) \frac{\sin\left(\frac{2n\pi t}{\beta_i}\right)}{n} dn \quad (B.21)$$

a razão entre as escalas de tempo Lagrangeana e Euleriana é definida por

$$\beta_i = d\left(\frac{U}{\sigma_i}\right) \quad (B.22)$$

onde $d = 0,55$, uma constante definida em trabalhos já realizados por Degrazia e Anfossi (1998)

A equação do espectro da velocidade é definida por

$$\frac{nS_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1,06c_i f\left(\psi \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{5/3} \left[1 + 1,5 \frac{f}{(f_m)_i}\right]^{5/3}} \quad (B.23)$$

e a variância da velocidade turbulenta é definida como

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06c_i \psi^{\frac{2}{3}} w_*^2 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{2}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \quad (B.24)$$

para resolver a equação do coeficiente de difusão é necessário resolver as seguintes expressões

$$\begin{aligned}
\frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} &= \frac{\sigma_i U}{8\pi^{\frac{1}{2}}}, \\
&= \frac{1,06^{\frac{1}{2}} c_i^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{3}} w^*}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{U}{8\pi^{\frac{1}{2}}}, \\
&= \frac{0,09 U c_i^{\frac{1}{2}} w^* \Psi^{\frac{1}{3}}}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}}
\end{aligned} \tag{B.25}$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{2\pi t}{\beta_i} = a &= \frac{8\pi x \sigma}{\pi^{\frac{1}{2}} U U}, \\
&= \frac{11,76 c_i^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{2}}}{(f_m)_i^{\frac{1}{3}}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{z_i}{U} X
\end{aligned} \tag{B.26}$$

O espectro Euleriano normalizado é escrito pela razão do espectro de velocidade pela variância da velocidade turbulenta

$$\begin{aligned}
F_i^E(n) &= \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2}, \\
&= \frac{z}{U (f_m)_i} \left[1 + \frac{1,5f}{(f_m)_i}\right]^{\frac{5}{3}}
\end{aligned} \tag{B.27}$$

reformulando a expressão para o coeficiente de difusão obtém-se

$$K_\alpha = \frac{0,09 c_i^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{3}} z^{\frac{4}{3}} w_*}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}} z^{\frac{1}{3}}} \int_0^\infty \frac{\sin(an)}{\left\{1 + 1,5 \left\{\frac{nz}{[(f_m)_i U]}\right\}\right\}^{\frac{5}{3}}} \frac{dn}{n} \tag{B.28}$$

fazendo uma mudança de variáveis, admite-se

$$\begin{aligned}
n' &= bn, \\
n &= \frac{n'}{b}, \\
dn &= \frac{1}{b} dn'
\end{aligned} \tag{B.29}$$

no qual obtém-se

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = \frac{0,09c^{\frac{1}{2}}\Psi^{\frac{1}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{4}{3}}w_*}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}}\int_0^\infty \frac{\sin\left(\frac{a}{b}n'\right)}{[1+n']^{\frac{5}{3}}}\frac{dn'}{n'} \quad (\text{B.30})$$

assim, expandindo para:

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = \frac{0,09c^{\frac{1}{2}}\Psi^{\frac{1}{3}}\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{4}{3}}w_*}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}}\int_0^\infty \frac{\sin\left(\frac{7,84c^{\frac{1}{2}}\Psi^{\frac{1}{3}}(f_m)_i^{\frac{2}{3}}Xn'}{\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{5}{3}}}\right)}{[1+n']^{\frac{5}{3}}}\frac{dn'}{n'} \quad (\text{B.31})$$

O coeficiente de difusão para uma camada limite convectiva é derivado como uma função dependente da distância, essa dependência em z produz uma descrição da dispersão turbulenta em uma distância perto, intermediária e longe da fonte elevada (podendo ser considerado o efeito de memória).

Coeficiente de difusão turbulenta assintótico para a camada limite convectiva

Degrazia e Anfossi (1998) deriva a formulação para a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana. Essa derivação baseia-se na teoria estatística de difusão de Taylor e também no modelo de energia cinética turbulenta

$$T_{Li} = \frac{\beta_i F_i^E(n\vec{0})}{4} \quad (\text{B.32})$$

onde $F_i^E(n\vec{0})$ é definido por Degrazia et al. (2000)

$$F_i^E(\vec{0}) = \frac{z}{U(f_m)_i} \quad (\text{B.33})$$

sendo assim é possível determinar a expressão para a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana

$$T_{Li} = \frac{0,13z^{\frac{2}{3}}z_i^{\frac{1}{3}}}{c^{\frac{1}{2}}\Psi^{\frac{1}{3}}(f_m)_i^{\frac{2}{3}}w_*} \quad (\text{B.34})$$

A expressão para derivar o coeficiente de difusão é definido por

$$K_\alpha = \sigma_i^2 T_{Li} \quad (\text{B.35})$$

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(n\vec{0})}{4} \quad (\text{B.36})$$

substituindo as expressões da variância da velocidade turbulenta e a expressão da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana na expressão do coeficiente de difusão turbulenta

obtém-se

$$K_\alpha = \left(\frac{1,06c_i \Psi^{\frac{2}{3}} \left(\frac{z}{z_i} \right)}{(f_m)_i^{\frac{2}{3}}} \right) \left(\frac{0,13z^{\frac{2}{3}} z_i^{\frac{1}{3}}}{c^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{3}} (f_m)_i^{\frac{2}{3}} w_* z_i} \right) \quad (\text{B.37})$$

$$K_\alpha = \frac{0,137c^{\frac{1}{2}} \Psi^{\frac{1}{3}} \left(\frac{z}{z_i} \right) w_* z_i}{(f_m)_i^{\frac{4}{3}}} \quad (\text{B.38})$$

Na equação que se refere ao coeficiente de difusão a expressão para a frequência normalizada do pico espectral convectivo é definido por

$$(f_m)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i} = 0,55 \left(\frac{z}{z_i} \right) \left[1 - \exp \left(- \frac{4z}{z_i} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{z_i} \right) \right]^{-1} \quad (\text{B.39})$$

com essa definição é possível determinar a equação para o comportamento assintótico em função da frequência normalizada do pico espectral convectivo como segue

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = 0,16 \Psi^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp \left(- \frac{4z}{z_i} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{z_i} \right) \right]^{\frac{4}{3}} \quad (\text{B.40})$$

Com a definição da expressão para frequência normalizada do pico espectral convectivo é possível definir a equação do coeficiente de difusão no comportamento integral. Esse coeficiente é descrito em termos de energia contida dentro dos turbulhões em função de uma distância X e da altura z . A expressão é expressa da seguinte forma

$$\frac{K_\alpha}{w_* z_i} = 0,12 \Psi^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp \left(- \frac{4z}{z_i} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{z_i} \right) \right]^{\frac{4}{3}} \quad (\text{B.41})$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin \left\{ 3,17 \left[1 - \exp \left(- \frac{4z}{z_i} \right) - 0,0003 \exp \left(\frac{8z}{z_i} \right) \right]^{\frac{2}{3}} \Psi^{\frac{1}{3}} X n' \right\}}{[1 + n']^{\frac{5}{3}}} \frac{dn'}{n'}$$

APÊNDICE C – MÉTODO SPLINE CÚBICO

Método Spline Cúbico, $S(x)$, é uma função que é uma interpolação para ordenadar $y_i (i = 1, \dots, N)$ em pontos localizados na malha x_i , tais como

- $S(x)$ é contínuo para a primeira e segunda derivada,
- $S(x)$ é um polinômio cúbico no qual seu intervalo é $x_{i-1} \leq x \leq x_i$,
- $S(x) = y_i$

A expressão para $S'(x)$ sobre $[x_{i-1}, x_i]$ em termos de $p_i = \frac{\partial S}{\partial x}$ para o nó x_i é (AHLBERG; NILSON; WALSH, 1967)

$$S'(x) = p_{i-1} \frac{(x_i - x)(2x_{i-1} + x_i - 3x)}{h_i^2} - p_i \frac{(x - x_{i-1})(2x_{i-1} + x_{i-1} - 3x)}{h_i^2} + 6 \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i^3} (x_i - x)(x - x_{i-1}) \quad (\text{C.1})$$

onde $h_i = x_i - x_{i-1}$

A integração de $S'(x)$ é o produto da primeira derivada de $S(x)$

$$S(x) = p_{i-1} \frac{(x_i - x)^2(x - x_{i-1})}{h_i^2} - p_i \frac{(x - x_{i-1})^2(x_i - x)}{h_i^2} + y_{i-1} \frac{(x_i - x)^2[2(x - x_{i-1}) + h]}{h_i^3} + y_i \frac{(x - x_{i-1})^2[2(x_i - x) + h]}{h_i^3} \quad (\text{C.2})$$

e diferentemente de $S'(x)$, o produto de $S''(x)$ após algumas manipulações algébricas é definido como

$$S''(x) = -2p_{i-1} \frac{(2x_i + x_{i-1} - 3x)}{h_i^2} - 2p_i \frac{(2x_{i-1} + x_i - 3x)}{h_i^2} + 6 \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i^3} (x_i - x_{i-1} - 2x) \quad (\text{C.3})$$

A expressão C.4 é utilizada para determinar os valores de p_{i-1} e p_i . Além disso, deriva-se os limites para $\lim_{x \rightarrow x_i}$ e $\lim_{x \rightarrow x_{i-1}}$ resultando nas seguintes expressões

$$\lim_{x \rightarrow x_i} S''(x_i^-) = 2 \frac{p_{i-1}}{h_i} + 4 \frac{p_i}{h_i} - 6 \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i+1}^2} \quad (\text{C.4})$$

$$\lim_{x \rightarrow x_{i-1}} S''(x_i^+) = -4 \frac{p_{i-1}}{h_{i+1}} - 2 \frac{p_{i+1}}{h_{i+1}} - 6 \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}^2} \quad (\text{C.5})$$

Aplicando a condição de continuidade sobre $S''(x)$ para $x_i = (i = 1, \dots, N - 1)$
 $S''(x_i^+) = S''(x_i^-)$

$$2\frac{p_{i-1}}{h_i} + 4\frac{p_i}{h_i} - 6\frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i+1}^2} = -4\frac{p_{i-1}}{h_{i+1}} - 2\frac{p_{i+1}}{h_{i+1}} - 6\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}^2} \quad (\text{C.6})$$

Resultando em
$$\begin{cases} \lambda_i p_{i-1} + 2p_i + \mu_i p_{i+1} = c_i = 2, \dots, N - 2, \\ 2p_i + \mu_i p_{i+2} = c_i, \\ \lambda_N p_{N-1} + 2p_N = c_{N-1} \end{cases} \quad \text{onde } \lambda_i = \frac{hi+1}{h_i+h_{i+1}}, \mu_i =$$

$1 - \frac{hi+1}{h_i+h_{i+1}}$ e $c_i = \lambda_i \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} + 3\mu_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}}$

Sendo assim, criou-se um sistema tridiagonal feito de N equações (??). Retornando para o caso, no qual estamos estudando, é possível observar a derivada Spline p_i como $P_i^n = \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial x}\right)$, para a derivada de x , por exemplo, obtém-se o seguinte sistema

$$\frac{1}{2}p_{i-1}^n + 2p_i^n + \frac{1}{2}p_{i+1}^n = \frac{3}{2\Delta x}(\bar{C}_i^n - \bar{C}_{i-1}^n) + \frac{3}{2\Delta x}(\bar{C}_{i+1}^n - \bar{C}_i^n) \quad (\text{C.7})$$

onde $h_i = h_{i-1} = \Delta x$ e $y_i = \bar{C}_i^n$.

APÊNDICE D – FILTRO

Os ruídos computacionais são gerados por uma aproximação numérica dos termos advectivos, para amenizar esses ruídos é utilizado um filtro não-linear que primeiramente foi introduzido por Forester (1979) e posteriormente foi descrito por McRae et al. (1982). McRae et al. (1982) descreve o comportamento desse filtro em uma revisão feita por ele (McRae et al. 1982). Para esse tipo de filtro localmente transformado, por exemplo, a equação de advecção na direção x é demonstrada da seguinte forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} \quad (\text{D.1})$$

adicionalmente

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} K_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (\text{D.2})$$

no qual o filtro é dado por

$$C_j^k + 1 = C_j^k + \frac{k_f}{2} [(C_{j+1} - C_j)(\Psi_j + \Psi_{j+1}) - (C_j - C_{j-1})(\Psi_j + \Psi_{j+1})]^k \quad (\text{D.3})$$

onde $C_j^k + 1$ é o valor de C_j após o incremento k de um filtro e k_f é o coeficiente médio associado com o processo do filtro

$$\Psi_j = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

0, se não existir necessidade do processo de filtragem;

1, para a condição, no qual, existe a necessidade de um processo de filtragem.

Então, o objetivo desejado é determinar uma maneira de selecionar os pontos nos quais têm-se $\Psi_j = 1$. Inicialmente, todos os Ψ_j são considerados zero. Logo, ao fixar um ponto j , sobre cada intervalo $[j - m, j + m + 1]$ tem-se uma evolução da função

$S_i = \text{sing}[C_i - C_{i-1}]$ onde $i = j - m, j - m - 1, j + 1, \dots, j + m + 1$ e

$$\text{sing}(C) = \begin{cases} 1 \frac{C}{|C|} > 0 \\ -1 \frac{C}{|C|} < 0 \end{cases}$$

Se o valor da concentração C_j para o nó j é um extremo, então, S_j e S_{j+1} têm sinais opostos.

Além disso, quando o intervalo for $[j - m, j + m + 1]$, $S_{j+1}, \dots, S_{j+m+1}$ têm mesmo sinal e todos os S_{j-1}, \dots, S_{j-m} são de sinais opostos com o S_{j+1} , então a distribuição de C sobre este intervalo é homogêneo. Nesse caso, Ψ_j são considerados zero, dessa forma não é aplicado um atenuante para C_j .

Considerando C_j um extremo, testa-se S_j, \dots, S_{j+m+1} para o sinal de continuidade.

Assim, se o sinal de continuidade não vale para os valores de m e de S sobre cada lado do extremo, Ψ_j é definido para 1 no intervalo $[i - 1, i + 1]$. Os valores de m e de l devem ser escolhidos para garantir que os pontos nos quais Ψ não é zero e são representativos nas regiões onde há ruído computacional. Sendo assim, a seleção de m e de l é determinado experimentalmente.

O teste empírico para a escolha destas constantes são baseadas no fato que m representa metade do comprimento de onda dos ruídos computacionais que possuem o maior comprimento de onda, enquanto que l deve ser grande o suficiente para que Ψ tenha um valor diferente de zero e seja contínuo sobre qualquer região que o processo de escolha defina um ruído computacional. Para remover esse ruído computacional, como é esperado, o processo de filtragem é aplicado k vezes. Para isso é necessário escolher e utilizar os seguinte valores para as constantes paramétricas

$$\left\{ \begin{array}{l} m = 3 \\ l = 2 \\ k_f = 0, 2 \\ k = 2 \end{array} \right.$$

APÊNDICE E – CRANCK NICOLSON

McRae, Goodin e Seinfeld (1982) descreve a aproximação localmente unidimensional (LOD) utilizando a integração temporal Crank-Nicolson, obtida por

$$\bar{c}^{n+1} = \prod_{j=1}^3 \left[I - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_j \right]^{-1} \left[I - \frac{\Delta t}{2} \Lambda_j \right] \bar{c}^n \quad (\text{E.1})$$

que pode ser reescrito como

$$\bar{c}^{n+1} = \prod_{j=1}^3 T_j^n \bar{c}^n = T^n \bar{c}^n \quad (\text{E.2})$$

Para obter a ordem da aproximação temporal da equação E.2 é necessário expandir o operador T_j^n em potências de Δt

$$T_j^n = 1 - \Delta t \Lambda_j^n + \frac{\Delta t^2}{2!} (\Lambda_j^n)^2 - \frac{\Delta t^3}{3!} (\Lambda_j^n)^3 + \dots \quad (\text{E.3})$$

e

$$T^n = I - \Delta t \Lambda_j^n + \frac{\Delta t^2}{2!} [(\Lambda_j^n)^2 + \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^n (\Lambda_\alpha^n \Lambda_\beta^n + \Lambda_\beta^n \Lambda_\alpha^n)] + O(\Delta t^3) \quad (\text{E.4})$$

Assim, o operador *Splitting*, esquema de diferenças finitas, será de segunda ordem de acurácia se o operador *splitting* Λ_{alpha}^n e Λ_{beta}^n comutarem, se não, serão de primeira ordem. Se eles comutam os termos sobre os somatórios serão zero ou equivalente

$$T^n = I - \Delta t \Lambda^n + \frac{\Delta t^2}{2!} (\Lambda^n)^2 + O(\Delta t^3) \quad (\text{E.5})$$

Para obter a acurácia de segunda ordem é necessário reservar a ordem do operador alternando cada passo para cancelar dois termos não comutáveis, então consecutivamente obtém-se

$$\bar{c} = \prod_{j=1}^n T_j^n \bar{c}^n \quad (\text{E.6})$$

e

$$\bar{c}^{n+1} = \prod_{j=3}^1 T_j^n \bar{c}^n \quad (\text{E.7})$$