

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**UMA EQUAÇÃO CONSTITUINTE PARA A DISPERSÃO NÃO-LINEAR  
DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE ATMOSFÉRICA TURBULENTA:  
FECHAMENTO FICKIANO MODIFICADO E A PRESENÇA DE FASE**

por

Debora Lidia Gisch

Dissertação para obtenção do Título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 2014

**UMA EQUAÇÃO CONSTITUINTE PARA A DISPERSÃO NÃO-LINEAR  
DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE ATMOSFÉRICA TURBULENTA:  
FECHAMENTO FICKIANO MODIFICADO E A PRESENÇA DE FASE**

por

Debora Lidia Gisch

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Bardo Bodmann

Aprovada por:

Prof. Dr. Gervasio Annes Degrazia

Prof. Dr. Marco Túllio Menna Barreto de Vilhena

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros

Prof. Dr. Rogério José Marczak  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 20 de Fevereiro de 2013

## Agradecimentos

Quero agradecer primeiramente ao professor Bardo Bodmann, que é um excelente orientador, um exemplo como profissional e pessoa. Obrigada por tudo o que me ensinou nos últimos anos, que vai muito além do que está contido nestas páginas. Agradeço também ao professor Marco Vilhena que me ofereceu esta oportunidade de fazer o tão sonhado mestrado e trabalhar com este grupo de pesquisa tão engajado. Aos meus colegas de grupo agradeço pelas reuniões e discussões, sempre muito produtivas. Em especial ao Marcelo, a Cibele e a Celina, por apontarem direções à serem estudadas e analisadas para obter resultados, à Jacqueline e ao Rodrigo, por passar vários dias debruçados sobre os livros e juntos alcançarmos a aprovação em diversas cadeiras e ao Guilherme que ao emprestar suas anotações ajudou esclarecer dúvidas que surgiram durante a pesquisa bibliográfica. Este trabalho deve-se, também, à excelente formação que tive, graças aos maravilhosos professores da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, que dispõem aos alunos todo o conhecimento que podem. A estes meu muito obrigado. Aos amigos do “gente esquisita”, pelas risadas, pelos passeios, pela amizade. Por diversas questões, principalmente a distância e a restrição de tempo, infelizmente acabei nestes anos me afastando de pessoas que muito contribuíram para minha formação pessoal e, portanto, por chegar até aqui, mas lembro de cada um com um grande sentimento de saudade. Preciso agradecer à minha família que sempre me ajudou e compreendeu a minha rotina maluca de estudo e sempre relevou a minha ausência em momentos onde todos estavam reunidos inclusive meu avô que hoje não está mais entre nós, pois nos deixou no final de 2012. Ao pai do Ricardo que incentiva e se preocupa com todos, sempre querendo e torcendo para que nós continuemos estudando, nos esforçando e alcançando nossos objetivos. Agradeço a uma amiga que tenho à anos, eu a vi nascer e crescer, minha irmã Laura, que muitas vezes me escutou explicar o meu trabalho sem entender muita coisa, acabei mostrando para ela como é maravilhoso descobrir coisas novas.

Ao meu pai, exemplo de pessoa, de honra, de respeito e persistência. Que sempre

tentava entender o meu trabalho e sim, das pessoas que não pesquisam, foi a que chegou mais perto da compreensão e com isso me deu uma felicidade enorme. A minha mãe, que é uma das principais responsáveis por eu estar aqui hoje, nos momentos de dúvidas e incertezas ela sempre esteve pronta para dizer alguma coisa que abria uma janela para cada porta que se fechava. Agora, agradeço ao meu noivo Ricardo, que me apoiou diretamente muito antes de eu escolher a matemática. Um companheiro e amigo, que com seu otimismo e alegria de viver a vida, me faz continuar muito além do ponto onde teria desistido sozinha, a contribuição que deu para a minha formação, profissional e pessoal, é bem maior do que é capaz de perceber. Minha vida obrigada por voar ao meu lado e também por ter decidido que nós adotariamos o Ash.

## RESUMO

O fenômeno da dispersão de poluentes precisa ser compreendido e analisado profundamente para que estudos de impactos ambientais possam ser realizados para projetar e prever situações. Então, obter um modelo analítico de dispersão de poluente realista torna-se interessante, pois permite avaliar com maior precisão o impacto ambiental da liberação de poluentes na atmosfera, além de abrir novos horizontes para a pesquisa. A Camada Limite Planetária (CLP) é o domínio de interesse da grande maioria dos modelos, já que nela os fenômenos turbulentos estão presentes. Uma característica destes fenômenos são os vórtices e turbilhões chamados de Estruturas Coerentes (ECs) e que são dominados por uma fase. O modelo analítico mais estudado é o que tem por base a equação advecção-difusão onde diversas simplificações como médias de Reynolds e o fechamento Fickiano são aplicados. Essas simplificações tornam o modelo determinístico e linear, mesmo o fenômeno sendo estocástico e não linear. Para resgatar algumas características do fenômeno turbulento neste trabalho sugeriu-se a inclusão de uma fase na equação advecção-difusão, através de um coeficiente difusivo complexo. Isso porque estruturas coerentes são características turbulentas dominadas pela fase. Comparou-se aqui os modelos com coeficiente difusivo real e complexo para as mesmas condições podendo assim observar qualitativamente a inclusão da fase no modelo que reproduz uma característica do escoamento turbulento, apresentando um comportamento mais realista. Apesar de não podemos garantir que esta é a maneira mais acertada de incluir a fase na equação advecção-difusão, com certeza ela nos trás um grande benefício que é a garantia de sempre ter soluções semi-positivas definidas, compatíveis com distribuições, para a representação da concentração.

Palavras-chave: Equação Advecção-Difusão, Dispersão de Poluentes, Fechamento Fickiano Modificado, Não Linear.

## **ABSTRACT**

### **A CONSTITUENT EQUATION FOR NONLINEAR DISPERSION OF POLLUTANTS IN TURBULENT ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER: MODIFIED FICKIAN CLOSURE AND PRESENCE OF PHASE**

The phenomenon of dispersion of pollutants needs to be analyzed and deeply understood so that environmental impact studies can be performed to design and predict situations. Then, to obtain an analytical model of realistic pollutant dispersion becomes interesting because it allows to accurately assess the environmental impact of the release of pollutants into the atmosphere and to open new horizons for research. The planetary boundary layer (PBL) is the domain of interest of the majority of models, since this is domain where turbulent phenomena are present. A feature of these phenomena are the vortexes and eddies that are Coherent Structures (CSs) and are dominated by a phase. The most studied analytical model is based on the advection-diffusion equation where several simplifications such as Reynolds averages and Fickian closure are applied. These simplifications render the model deterministic and linear, although the phenomenon is stochastic and nonlinear. To recover some characteristics of turbulent phenomena in this work a phase was included in the advection-diffusion equation by a complex diffusion coefficient. This is because coherent structures are turbulent characteristics and dominated by phase. We compared the models with real and complex diffusion coefficient for the same conditions, thus being able to observe qualitatively the inclusion of phase in the model that reproduces a characteristic of turbulent flow, presenting a more realistic behavior. Although we can not guarantee that this is the adequate way to include the phase in the advection-diffusion equation, it certainly brings us benefit that is the guarantee to always have at least semi-positive solutions, compatible with distributions that represent the concentration.

## ÍNDICE

<b>1</b>	<b>Introdução</b> .....	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Revisão Bibliográfica e Contextualização do Presente Modelo</b> .....	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Atmosfera Terrestre e Camada Limite Planetária</b> .....	<b>9</b>
3.1	Termosfera .....	9
3.2	Mesosfera .....	10
3.3	Estratosfera .....	10
3.4	Troposfera .....	10
3.5	Camada Limite Planetária .....	12
3.5.1	Camada Limite Convectiva .....	13
3.5.2	Camada Residual Noturna .....	14
3.5.3	Camada Limite Estável .....	14
<b>4</b>	<b>Equação de Advecção-Difusão</b> .....	<b>15</b>
4.1	A Simplificação da Equação de Advecção-Difusão .....	16
4.2	Solução da Equação Advecção-Difusão .....	19
4.3	O Problema de Definir Estruturas Coerentes .....	22
4.4	Estruturas Coerentes .....	24
4.5	Forma Bilinear .....	25
<b>5</b>	<b>Resultados</b> .....	<b>27</b>
<b>6</b>	<b>Conclusão</b> .....	<b>45</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>47</b>

## LISTA DE SÍMBOLOS

### 1. Caracteres Arábicos

$C$	concentração ( $g/m^3$ )
$\mathcal{C}$	concentração complexa
$\mathcal{C}^*$	concentração complexa conjugada
$CLC$	camada limite convectiva
$CLE$	camada limite estável
$CLN$	camada limite noturna
$CLP$	camada limite planetária
$CLR$	camada limite residual
$CLS$	camada limite superficial
$CM$	camada de mistura
$CSs$	coherent structures
$D_L$	coeficiente de difusão laminar
$ECs$	estruturas coerentes
$H$	espaço de Hilbert
$H_s$	altura da fonte ( $m$ )
$K_T$	coeficiente de difusão turbulenta
$K_x$	coeficiente de difusão na direção $x$ ( $m^2/s$ )
$K_y$	coeficiente de difusão na direção $y$ ( $m^2/s$ )
$K_z$	coeficiente de difusão na direção $z$ ( $m^2/s$ )
$K_{za}$	parte real do coeficiente de difusão na direção $z$
$K_{zb}$	parte complexa do coeficiente de difusão na direção $z$
$\mathcal{L}$	transformada de Laplace
$LES$	large eddy simulation
$L_x$	limite do domínio em $x$ ( $m$ )
$L_y$	limite do domínio em $y$ ( $m$ )
$L_z$	limite do domínio em $z$ ( $m$ )



$l, l', n, n'$	número de autovalores
$PBL$	planetary boundary layer
$\dot{Q}$	intensidade da fonte ( $g/s$ )
$t$	tempo ( $s$ )
$u$	velocidade média do vento orientado na direção $x$ ( $m/s$ )
$U$	espaço vetorial
$x$	distância da fonte ( $m$ )
$x_0$	posição da coordenada $x$ da fonte
$y$	distância da fonte ( $m$ )
$y_0$	posição da coordenada $y$ da fonte
$z$	altura acima da superfície ( $m$ )
$z_0$	posição da coordenada $z$ da fonte

## 2. Caracteres Gregos

$\alpha, \beta$  constante de separação

$\delta$  função delta de Dirac

$\lambda_y$  e  $\lambda_z$  autovalor do problema de Sturm-Liouville

$\Omega$  espaço vetorial

## ÍNDICE DE FIGURAS

3.1	Estratificação da atmosfera segundo o perfil de temperatura absoluta.[Arya, 1999] . . . . .	11
3.2	Estrutura da Troposfera [Stull, 1988] . . . . .	11
3.3	Evolução temporal da CLP [Stull, 1988] . . . . .	13
5.1	$C(y, t)$ com $K_z$ real para 1000, 5000 e 10000 autovalores. . . . .	27
5.2	Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em $C(0, y, 50, t)$ . . . .	29
5.3	Comportamento da solução para solução real e a solução bilinear em $C(0.5, y, 50, t)$ . . . . .	30
5.4	Comportamento da solução para solução real e a solução bilinear em $C(1, y, 50, t)$ . . . . .	31
5.5	Comportamento da solução bilinear $C(0, y, 50, t)$ com variações $K_{zb}$ . . . . .	32
5.6	Comportamento da solução bilinear $C(0.5, y, 50, t)$ com variações $K_{zb}$ . . . . .	32
5.7	Comportamento da solução bilinear $C(1, y, 50, t)$ com variações $K_{zb}$ . . . . .	33
5.8	Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em $C(0, 0, z, t)$ . . . . .	35
5.9	Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em $C(0.5, 0, z, t)$ . . . .	36
5.10	Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em $C(1, 0, z, t)$ . . . . .	37
5.11	Comportamento da solução bilinear $C(0, 0, z, t)$ com variações $K_{zb}$ . . . . .	38
5.12	Comportamento da solução bilinear $C(0.5, 0, z, t)$ com variações $K_{zb}$ . . . . .	38
5.13	Comportamento da solução bilinear $C(1, 0, z, t)$ com variações $K_{zb}$ . . . . .	38
5.14	Comportamento da solução real em $C(x, 0, 50, t)$ . . . . .	40
5.15	Comportamento da solução bilinear em $C(x, 0, 50, t)$ com $K_{zb} = 0.5$ . . . . .	40
5.16	$C(x, t) K_z$ Real $\times C(x, t) K_z$ Complexo Linear e Logarítmico. . . . .	41
5.17	Comportamento da solução real em $C(x, y, 50, t)$ . . . . .	42
5.18	Comportamento da solução bilinear em $C(x, y, 50, t)$ com $K_{zb} = 0.5$ . . . . .	42
5.19	Comportamento da solução real em $C(x, 0, z, t)$ . . . . .	43
5.20	Comportamento da solução bilinear em $C(x, 0, z, t)$ . . . . .	43

## ÍNDICE DE TABELAS

5.1	Valores dos parâmetros usados nas simulações para investigar o comportamento das soluções.	28
-----	--	----

## CAPÍTULO 1

### Introdução

Trabalhos voltados à compreensão do fenômeno de dispersão de poluentes são cada vez mais fundamentais em tomadas de decisões. O entendimento do fenômeno pode orientar nas situações cotidianas como a instalação de parques industriais ou em casos de catástrofes como erupções vulcânicas e incêndios das proporções da fábrica de fertilizantes que ocorreu no ano 2013 na cidade de São Francisco do Sul, no litoral norte de Santa Catarina onde a fumaça tóxica era tão grande e densa que podia ser captada por satélites.

A busca por modelos e por suas soluções mais realísticas que descrevam o fenômeno da dispersão de poluentes é um campo crescente e é um dos recursos que vem sendo utilizado frequentemente para simular situações como as descritas acima. Em geral existem modelos determinísticos, predominantemente Eulerianos, e estocásticos, tipicamente Lagrangianos para descrever o processo de dispersão. Literatura que aborda essa linha são [Buske et al., 2007b], [Mello et al., 2007] e [Vilhena et al., 2012] e outras. Uma propriedade da camada limite atmosférica são os regimes, estável, neutro e instável, associados a produção de turbulência, que é o mecanismo que promove a mistura de poluentes na camada limite. Enquanto experimentos tentam identificar características da turbulência através da chamada covariância de turbilhões (*eddy covariance*) ou seja, medidas de correlações, um modelo determinístico ou estocástico, deveria incorporar grandezas que refletem alguma propriedade dessa natureza.

Em mecânica dos fluidos turbulentos não há consenso sobre qual seria o ponto de partida mais adequado para estabelecer uma relação entre equações de movimento e a inserção ou identificação de turbilhões. Portanto, neste trabalho parte-se da hipótese que o movimento orquestrado no ar, ou seja os turbilhões formados, são devido à presença de fase. Um exemplo justificando este raciocínio é o fenômeno acústico do efeito estéreo, onde a fase

é responsável pela distribuição correlacionada de sensações sonoras espaciais e temporais.

Movimentos com correlações espaciais e temporais poderiam ser convenientemente representados através de estruturas coerentes, que possuem tais propriedades. Uma definição inequívoca para as estruturas coerentes em mecânica dos fluidos turbulentos é ausente, conseqüentemente não é óbvio qual seria a equação adequada para quantificar este fenômeno. Por esta razão parece conveniente analisar uns dos modelos estabelecidos, no caso da dissertação o modelo de advecção-difusão dependente do tempo, procurando uma possibilidade de incluir a fase como tentativa de representar uma grandeza que poderia ser associada a propriedades de turbilhões.

Observando, que na dedução da equação de advecção-difusão o fechamento dado pela hipótese de Fick reduziu o modelo originalmente com componente estocástica, ou seja com um termo de flutuações, a um determinístico. Pelo fato de que as flutuações, pelo menos parcialmente, contêm correlações oriundas dos turbilhões, sugere-se que a introdução de uma fase pode ser convenientemente implementada junto à hipótese de fechamento. Por um lado as características de fechamento por Fick podem ser mantidas e por outro estendidas com uma contribuição imaginária no coeficiente de difusão. Então um coeficiente de difusão complexo terá ao lado de uma característica dissipativa também uma propriedade que implica coerência.

Evidentemente uma equação de advecção-difusão com coeficiente complexo tem apenas uma solução complexa, enquanto as grandezas observadas são reais. Uma saída desta limitação aparente é descrever a concentração observada de poluentes de forma bilinear. Alguns argumentos axiomáticos permitem justificar tal procedimento. Primeiro, observáveis que obedecem a distribuição, no caso presente o poluente. Segundo, mesmo que a equação de advecção-difusão complexa é linear, a grandeza que corresponde as observáveis é bilinear, ou seja, não-linear como sabe-se que o fenômeno da turbulência é não-linear. Finalmente, existe uma teoria que de certa forma tem semelhança com as equações de fluidos, por exemplo a equação de Poynting do eletromagnetismo têm equivalência à equação de Unov originalmente escritas para fluidos. Enquanto as equações de Maxwell determinam os campos elétrico e magnético, a densidade de energia, que é semi-positiva definida, tem caráter de uma distribuição e é formada de forma bilinear pelos campos elétricos e magnéticos.

Partindo destas premissas é o foco principal dessa dissertação analisar efeitos da

fase nas soluções em comparação à abordagem com um coeficiente de difusão puramente real. A autora da dissertação é consciente de que esta proposta é nova e tem uma literatura um tanto escassa. Esta é primeira tentativa de descrever o fenômeno da dispersão com a inclusão de uma fase usando um modelo simples. Neste modelo de dispersão características turbulentas são incluídas na solução. Essas características já eram introduzidas nos modelos anteriormente, porém havia um necessidade de usar um grande número de parâmetros. E esta é uma vantagem que o modelo de fechamento fickiano modificado proporciona, há o aparecimento destas características turbulentas com a introdução de poucos parâmetros.

A dissertação está estruturada da seguinte maneira. Capítulo 2 uma breve revisão bibliográfica de modelos de dispersão de poluentes e uma contextualização do presente modelo. Já capítulo 3, trás uma estratificação da atmosfera dando ênfase à camada limite planetária dado que os turbilhões e vórtices estão presentes. Continuando pelo capítulo 4 tem-se a modelagem, solução e a base axiomática para fundamentar o presente trabalho. Seguindo apresenta-se os resultados onde há ou não a influência da fase e compara-se o comportamento da solução com coeficiente real e complexo e no capítulo 6 chegam-se as conclusões.

## CAPÍTULO 2

### Revisão Bibliográfica e Contextualização do Presente Modelo

Os problemas científicos começam a ser estudados a partir da necessidade de compreender algum fenômeno, que de alguma forma afeta a vida humana e de outros seres vivos que habitam o planeta Terra. Neste caso, a emissão de poluentes na atmosfera, que intencionalmente começamos a emitir a partir da Revolução Industrial 1760 à 1830.

Coincidentemente na metade do século *XIX* a primeira solução da equação de advecção-difusão chamada de solução Gaussiana, foi encontrada por Fick. Nesta solução o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura, e são consideradas as seguintes condições de contorno, onde o fluxo é nulo na parte inferior e superior da camada limite planetária (CLP)

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0 \text{ e } z \rightarrow \infty. \quad (2.1)$$

O próximo grande passo foi dado por [Roberts, 1923], onde utilizou uma solução não Gaussiana bidimensional e mais próxima ao solo. O que caracteriza essa solução são os campo de vento e coeficiente de difusão variáveis com altura. Para isso utilizou-se uma lei de potência em função da altura  $z$

$$\bar{u} = u_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^m \quad ; \quad K_z = K_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^n, \quad (2.2)$$

onde  $z_1$  a altura na qual a velocidade  $u_1$  e  $K_1$  são avaliados,  $n$  está relacionado com a rugosidade da superfície,  $m$  é um expoente que está relacionado com a instabilidade atmosférica e os expoentes variam entre 0 e 1 [Irwin, 1979]. O [Rounds, 1955] reproduziu o trabalho anterior, porém os  $K_z$ 's tinham perfis lineares e a altura da fonte era mais elevada. Continuando na linha de soluções bidimensionais e com variações de  $\bar{u}$  e  $K_z$  em função da



altura, [Smith, 1957] alterou o expoente do vento que segue a lei conjugada de Schmidt (*expoente do vento* =  $1 - K_z$ ). Smith também contribuiu com uma solução onde  $\bar{u}$  era constante e  $K_z$  variava conforme

$$K_z = K_0 z^\alpha (z_i - z)^\beta, \quad (2.3)$$

onde  $K_0$  é uma constante,  $\alpha$  e  $\beta$  variam entre 0 e 1 de acordo com a altura da camada limite  $z_i$ .

Já [Scriven e Fisher, 1975] propõem uma solução onde  $\bar{u}$  também é constante e  $K_z$  é definido como

$$K_z = z \text{ para } 0 \leq z \leq z_t, \quad (2.4)$$

$$K_z = K_z(z_t) \text{ para } z_t \leq z \leq z_i, \quad (2.5)$$

onde  $z_t$  altura é pré-definida que geralmente é altura da camada limite superficial. A solução de Scriven e Fisher é utilizada na Europa para o transporte e deposição de contaminantes. Já no Reino Unido ela é aplicada em transporte de longa escala de poluentes.

Em 1975, Yeh e Huang [Yeh e Huang, 1975] e Berlyand [Berlyand, 1975] publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com  $\bar{u}$  e  $K_z$  seguindo os perfis de potência, mas para uma atmosfera sem contorno superior ( $K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0$  em  $z = \infty$ ). Estas soluções foram obtidas em termos de funções de Green. Já em 1978 Demuth [Demuth, 1978] publicou uma solução em termos de funções de Bessel onde a camada vertical era limitada ( $K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0$  em  $z = a$ ) onde  $a$  é constante. Essa é uma das condições também apresentada neste trabalho.

Seguindo pelo trabalho de Van Ulden, [Van Ulden, 1978] ele usou a teoria da similaridade de Monin-Obukhov para solucionar a difusão vertical usando fontes contínuas próximas ao solo supondo ainda que  $\bar{u}$  e  $K_z$  seguem perfis de similaridade.

Em 1980 foi solucionado por Nieuwstadt [Nieuwstadt, 1980] um problema unidimensional dependente do tempo, logo a primeira solução transiente. Utilizando os polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado por

$$K_z = Gu_* z \left(1 - \frac{z}{z_i}\right), \quad (2.6)$$

onde  $G$  é uma constante  $u_*$  velocidade de fricção. A publicação subsequente Nieuwstadt e Haan [Nieuwstadt e Haan, 1981] abordou a solução utilizando polinômios de Jacobi, onde  $\bar{u}$  é uma escala de velocidade turbulenta dependente do tempo e a altura da camada limite cresce com o tempo. Catalano [Catalano, 1982], por sua vez, estendeu a solução para o caso de perfis de vento vertical não-zero.

Uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, com absorção de contaminantes por este, foi proposta por Koch [Koch, 1989], onde o modelo é altamente dependente da velocidade e do coeficiente vertical de difusão  $K_z$ . Os contaminantes foram acoplados à solução em termos de funções hipergeométricas.

Em 1992 Chrysikopoulos [Chrysikopoulos et al., 1992] aproveitou-se da solução em termos de funções hipergeométricas e adicionou as funções de Bessel para a deposição. Aplicaram em uma solução tridimensional com  $\bar{u}$  e  $K_z$  seguindo as leis de potência dadas pela equação (2.2) com uma fonte aérea contínua. Sendo a concentração avaliada ao nível do solo.

Já [Sharan et al., 1996b] trabalharam na solução tridimensional permanente para condição de ventos fracos, com a velocidade vertical desprezível, difusividades turbulentas constantes e fonte pontual. Já no trabalho [Sharan et al., 1996a] aborda-se o caso para fontes baixas, o campo de vento é apenas longitudinal e com coeficientes de difusividades para as três direções. As outras condições permanecem as mesmas.

Moura e Pires, apresentaram a solução analítica da equação de difusão unidimensional dependente do tempo, sem vento, utilizando o coeficiente de difusão  $K_z$  de Degrazia [Degrazia et al., 1997], para o caso estável [Moura et al., 1995] e convectivo [Pires, 1996]. Usando o mesmo método Moreira [Moreira, 1996] resolveu para o caso bidimensional estacionário. Lin e Hildeman [Lin e Hildeman, 1997] usaram a solução obtida por Yeh e Huang [Yeh e Huang, 1975] e Berlyand [Berlyand, 1975] e acrescentaram a deposição ao solo.

Todos os trabalhos anteriores são válidos em situações muito específicas com restrições ao vento e nos perfis verticais dos coeficientes de difusão [Moreira et al., 2009a]. Para abranger situações mais variadas os modelos híbridos como o ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*) [Vilhena et al., 1998], [Degrazia et al., 2001], [Moreira et al., 2004], [Moreira et al., 2005a], [Moreira et al., 2005b], [Moreira et al., 2005c], [Moreira et al., 2006b] e [Buligon et al., 2006] discretiza-se a camada limite planetária em  $N$  subcamadas e para

cada subcamada resolve-se a equação advecção-difusão através da Técnica de Transformada de Laplace onde o perfil de vento e os coeficientes de difusão são termos médios. A GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) por [Cotta, 1993], [Cotta e Mikhaylov, 1997] embasados em [Mikhaylov e Özisik, 1984], usaram a derivação da transformação clássica e aplicaram em problemas lineares de difusão. Desenvolveu-se a GITT para outras classes de problemas lineares, não-lineares de difusão e difusão-advecção. GILTT [Wortmann et al., 2005], [Moreira et al., 2006a], [Buske et al., 2007a], [Buske et al., 2007b], [Tirabassi et al., 2008], [Buske et al., 2008], [Moreira et al., 2009b], [Moreira et al., 2009c], [Buske et al., 2010] e [Weymar, 2012] onde é feito uma variação do GITT, onde o sistema de equações diferenciais ordinárias (**EDO**) resultante da aplicação da GITT é resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização.

Existe uma grande variedade de modelos numéricos para resolver o problema de advecção-difusão. A maioria divide-se em Métodos das Diferenças Finitas e Elementos Finitos. Porém, trabalhos analíticos e híbridos tem como um dos principais objetivos validar e avaliar os resultados obtidos numericamente e no caso de uma análise de erro completo substituí-los.

Apesar do presente trabalho resolver a equação advecção-difusão ele também seguirá por uma linha que visará um modelo bilinear com coeficiente difusivo complexo. Um modelo bilinear foi aplicado por [Duff e Isham, 1980] para encontrar soluções não-lineares da equação de campo de Yang-Millis, pois trabalhava-se no espaço de Minkowski onde as soluções são necessariamente complexas.

Já o trabalho de [Bodmann et al., 2013] usou o coeficiente de difusão complexo na equação de difusão gerando soluções da forma bilinear para a equação, observando a presença de estruturas coerentes.

Usando os dois últimos trabalhos como referência a ênfase aqui será analisar os efeitos de presença de fase na solução da distribuição de poluentes na camada limite atmosférica, onde a razão da parte real e imaginária será associada a um regime específico turbulento. Mais especificamente, quanto mais dominante a parte imaginária na solução maior é a presença de efeitos turbulentos. A autora da dissertação está consciente do fato que existe um grau elevado de especulações nesta abordagem e evidentemente será desejável estabelecer um modelo a partir de alguns princípios mais consagrados como leis de conservação entre outras. Porém, o trabalho presente têm como objetivo demonstrar através da comparação

das soluções advecção-difusão puramente real e complexos as possibilidades que surgem a partir de um modelo linear complexo cujos observáveis são representados de forma bilinear e portanto compatível com grandezas que seguem distribuições associadas.

Um apontamento relevante a ser feito sobre este modelo perante aos outros citados acima é que todas as soluções da equação advecção-difusão dos demais modelos são soluções de equações determinísticas. Apesar deste modelo surgir de equações determinísticas, com a introdução da fase torna o modelo novamente estocástico o que convém, dado que o fenômeno descrito é estocástico. A vantagem se dá no momento de analisar as flutuações, que em modelos determinísticos não ocorre devido ao fato ter-se apenas o primeiro momento analisado, ou seja apenas os valores médios de velocidade e concentração.

## CAPÍTULO 3

### Atmosfera Terrestre e Camada Limite Planetária

A seguir será apresentada a atmosfera terrestre com ênfase à camada limite planetária, que é considerada a região onde o modelo a ser desenvolvido têm maior relevância. O fato do perfil de temperatura ser utilizado como classificação de uma inversão a partir da tropopausa permite simplificar e desacoplar troposfera do restante das camadas da atmosfera terrestre. Dois argumentos podem ser apresentados para justificar esta simplificação. Em primeiro, uma inversão de temperatura significa um gradiente vertical da temperatura zero, ou seja, uma região de equilíbrio térmico e conseqüentemente os efeitos pela irradiação da superfície terrestre são significativos apenas em regiões de não equilíbrio que no caso das considerações da camada limite planetária é abaixo deste limite. Segundo, a pressão nesta altura é da ordem de um décimo da pressão na superfície da Terra, o que significa baixa densidade onde os efeitos mecânicos que poderiam dar origem ao movimento turbulento são pequenos.

A atmosfera terrestre é uma mistura de gases inodoros e incolores, que forma um envoltório na Terra. Ela atinge uma altura de 800 *km* que mantém-se constante [Nefussi, 1976]. Segundo [Donn, 1978] é uma capa de ar sem limite superior perfeitamente definido e que a densidade diminui com a altura até confundir-se com a “atmosfera solar”. Dividi-se ou estratifica-se ela em camadas definidas pelo perfil de temperatura absoluta média onde em cada camada há uma absorção diferenciada da energia solar.

#### 3.1 Termosfera

A termosfera é a camada mais externa da atmosfera. A temperatura aumenta com a altura devido a absorção da radiação ultravioleta extrema pelo oxigênio molecular e atômico, provavelmente chegando 800 - 1200 *Kelvins*, mas essas temperaturas são essencialmente teóricas [Chorley, 2012]. As partículas dessa camada são carregadas assim ela também é

conhecida como ionosfera.

### 3.2 Mesosfera

A característica da mesosfera é oposta a termosfera, nela as temperaturas caem com o aumento da altura. Por esse motivo entre as duas camadas existe a mesopausa, que separa a termosfera da mesosfera, onde a inversão começa ocorrer acima de 80 *km* aproximadamente.

### 3.3 Estratosfera

Novamente existe uma zona de inversão térmica entre mesosfera e estratosfera, a tropopausa, onde a temperatura assume um perfil constante. Já na estratosfera a temperatura aumenta com a altura. A quase ausência de turbulência faz com que a camada não seja bem misturada e a ausência de nuvens e precipitação fazem com que os poluentes que chegam a essa camada dificilmente sejam removidos.

### 3.4 Troposfera

Define-se a troposfera como a camada mais baixa da atmosfera com uma altura variável de 9 a 16 *km* dependendo da latitude. A temperatura diminui com o aumento da altura. Grande parte dos fenômenos meteorológicos, assim como a emissão de poluentes lançados na superfície terrestre são dispersados e transportados através dela. A troposfera pode se dividida em uma camada adjacente à superfície terrestre, chamada Camada Limite Planetária (CLP) que se encontra de 100 – 3000 *m* [Arya, 1999] e Atmosfera Livre que compreende o resto da camada.

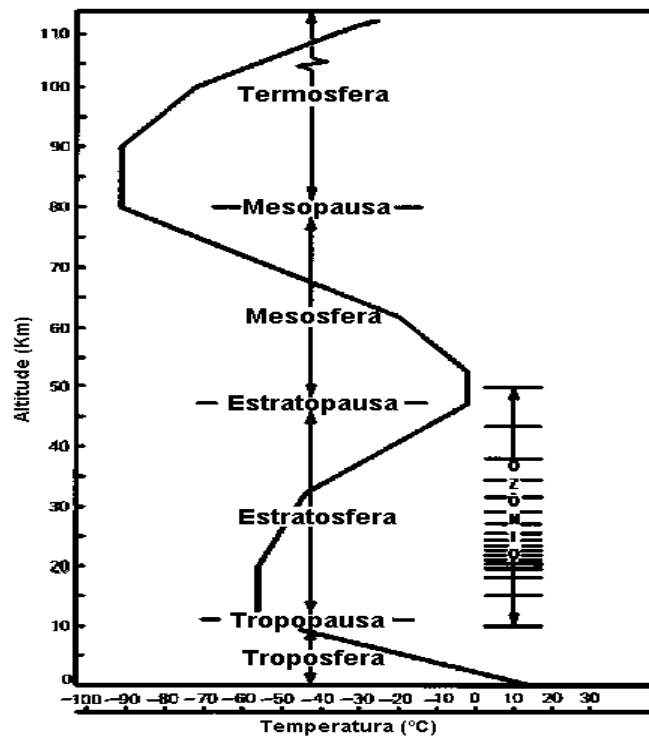


Figura 3.1: Estratificação da atmosfera segundo o perfil de temperatura absoluta.[Arya, 1999]

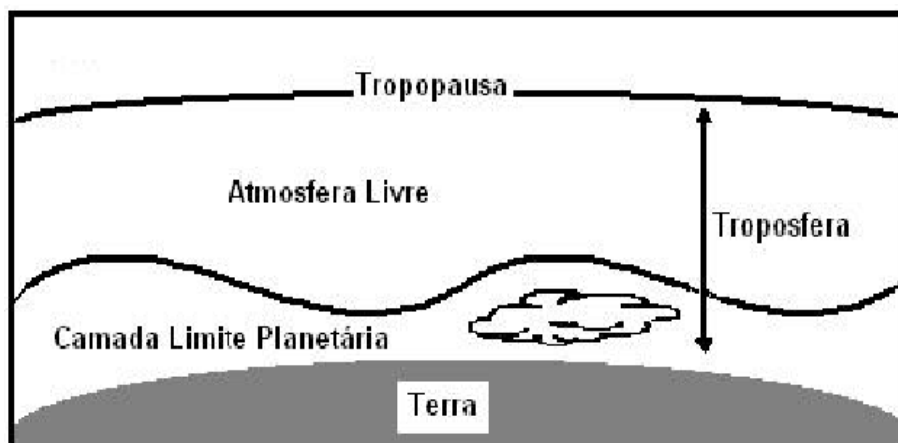


Figura 3.2: Estrutura da Troposfera [Stull, 1988]

### 3.5 Camada Limite Planetária

Os trabalhos de dispersão focam-se na camada limite planetária (CLP), pois esta encontra-se mais próxima a superfície terrestre. Para o presente trabalho é interessante trabalhar onde há o surgimento de turbilhões que irá tentar-se representar. Nas demais camadas os turbilhões são praticamente inexistentes. A superfície gera uma influência na CLP através das forçantes superficiais como força de atrito, movimentos verticais, evaporação, emissão de poluentes, *momentum*, umidade e modificações de fluxo introduzidas pela rugosidade do terreno.

A CLP pode ser definida como uma fina camada adjacente à superfície da Terra em que o escoamento apresenta elevado número de Reynolds, onde a turbulência gera transporte de energia, massa e quantidade de movimento entre a superfície e a atmosfera. A variação de espessura, de 100 a 3000 metros de altura, ocorre devido as forçantes mecânicas e térmicas, gerando movimentos turbulentos em uma escala temporal de uma hora ou até menos.

O transporte na CLP é dominado pela turbulência na vertical e advecção na horizontal. A advecção ou vento médio varia de 2 a 10  $m/s$ . Já o transporte na vertical tem formações de turbilhões que variam de 1  $mm$  a 3000  $m$  de diâmetro. Somando todas as contribuições dos turbilhões chegamos ao espectro de energia turbulenta.

A influência do ciclo diário, de aquecimento e resfriamento da superfície, é vista claramente na estrutura da CLP. Onde ela se divide em camada limite convectiva, camada residual noturna e camada limite estável ou noturna [Stull, 1988].

Radiação difusa e do solo são os fatores que mais contribuem para o aquecimento do ar. Já radiação direta do sol quase não contribui para a variação de temperatura da CLP, porque pouco dessa energia é absorvida pelo ar.



Podemos ver essa distribuição da estrutura na figura (3.3):

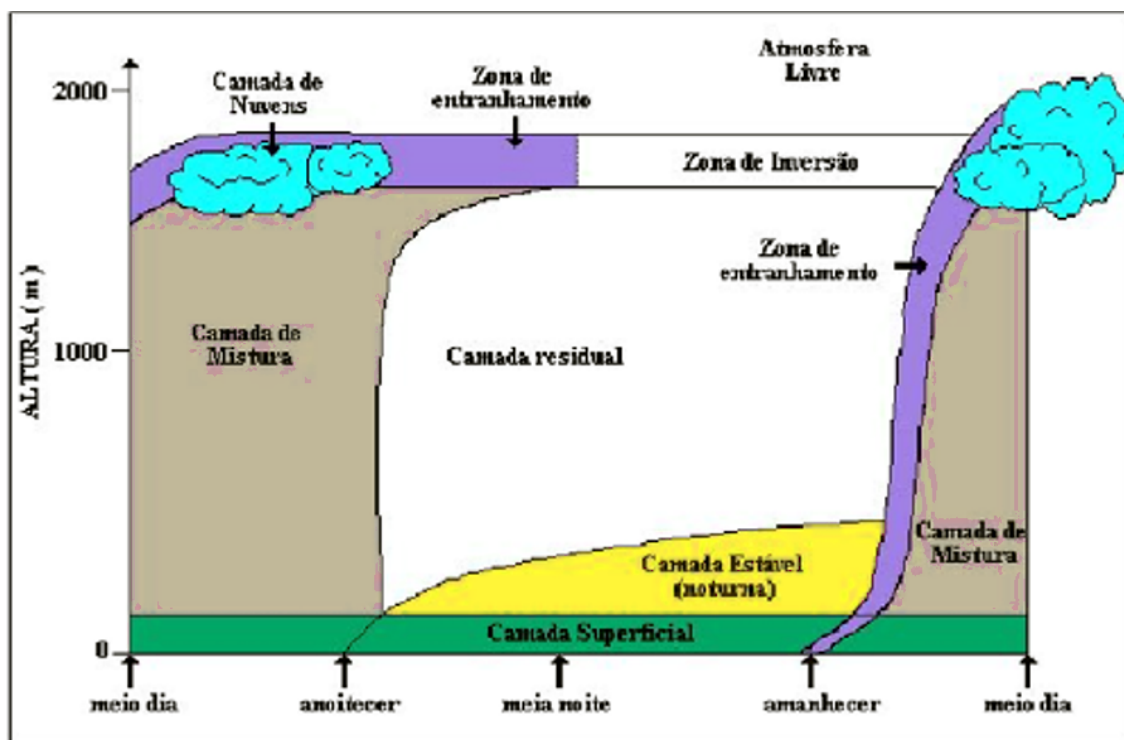


Figura 3.3: Evolução temporal da CLP [Stull, 1988]

### 3.5.1 Camada Limite Convectiva

A Camada Limite Convectiva (CLC) forma-se após o nascer do sol e nela há a forte presença dos vórtices devido as termas geradas pelo aquecimento. A superfície da Terra aquece e um fluxo de calor positivo se forma, consequentemente aparecem termas de ar quente que modificam o topo da CLP. Ao pôr-do-sol a superfície resfria-se e temos um fluxo de calor negativo. A camada chega a alcançar 1000 a 2000 metros durante o período da tarde, lembrando que boa parte dos contaminantes são lançados nessa camada que tem como uma das principais características a forte mistura vertical causada pelas termas de ar quente. Estratifica-se a camada em : *Camada Superficial*, adjacente a superfície da Terra onde a ocorrência de turbulência relativamente constante. A altura dela corresponde a mais ou menos 10% da CLC. Também é caracterizada por grandes gradientes normais da velocidade tangencial e gradientes de concentração de quantidades como temperatura, umidade e sedimentos transportados; *Camada Limite de Mistura*, compreende a maior parte da CLC,

nela ocorre intensa mistura vertical que tende conservar as variáveis como temperatura potencial e umidade constante com a altura; *Zona de Entranhamento*, neste local existe um empuxo negativo, fazendo com que as termas que ascendem verticalmente com o empuxo positivo, voltem a camada limite convectiva, porém com ar seco e quente, sendo esse processo chamado de entranhamento.

### 3.5.2 Camada Residual Noturna

Ela forma-se meia hora antes do pôr do sol, quando as termas cessam e a turbulência diminui. Essa camada é chamada de camada residual (porque suas propriedades são resíduos da camada de mistura) e forma-se acima da camada limite estável. Enquanto a camada limite noturna tem um perfil muito estável, a camada residual tende a ter um perfil neutro. A camada residual não tem contato com a superfície da terra, e assim não é influenciada por tensões turbulentas. Ela não é influenciada diretamente pela superfície da Terra, logo não é considerado uma camada limite, apenas a camada de mistura.

### 3.5.3 Camada Limite Estável

Depois do pôr do sol, o movimento convectivo diminui drasticamente e ocorre mudança de sinal no fluxo de calor na superfície, a turbulência começa a decair e passa a ser dominada por pequenos turbilhões isotrópicos. Também podemos explicar esse fenômeno da seguinte maneira, como há um resfriamento da superfície provoca um fluxo negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões, logo sobram apenas pequenos turbilhões.

Isso resulta em uma estrutura turbulenta estável estratificada, a qual é fortemente influenciada pela taxa de resfriamento radiativo e pela taxa de advecção da turbulência mecânica. Portanto a turbulência na CLE é menor que na CLC, conseqüentemente os poluentes emitidos nessa camada são dispersados lentamente na horizontal. E devido a altura ser de 100 a 300 metros a poluição fica próxima ao nível do solo.

## CAPÍTULO 4

### Equação de Advecção-Difusão

O objetivo é partir da equação de advecção-difusão, simplificá-la para o problema proposto e introduzir um coeficiente difusivo complexo, com o intuito de investigar a influência da presença de fase na solução da equação no contexto de dispersão de poluentes.

A descrição de poluentes na CLP é tipicamente representado através das concentrações (absolutas ou relativas) do poluente por volume de ar. Estas concentrações médias podem ser determinadas resolvendo as equações constituintes de um modelo, neste caso da equação de advecção-difusão. Note que as concentrações de poluentes enquadram-se em grandezas que obedecem propriedades de distribuições, aqui será mencionado apenas a semi-positividade. Analisando a equação de advecção-difusão observa-se, que quando existe uma solução semi-positiva a mesma solução com sinal trocado é também uma solução o que contradiz as propriedades exigidas para grandezas que representam distribuições e consequentemente a equação de advecção-difusão descreve apenas uma grandeza de distribuição multiplicado por uma propriedade que permite sinal negativo. Como a discussão que segue demonstra a presente abordagem se restringe meramente a grandezas de distribuições semi-positiva definida. Contudo antes de apresentar as alterações que constituem estas modificações, será apresentado a equação de advecção-difusão convencional que também servirá como referência na comparação.

A equação advecção-difusão é resolvida através de um problema associado de Sturm-Liouville para  $y$  e  $z$  e para  $t$  e  $x$  usa-se a Técnica de Transformada de Laplace e uma delta de Dirac para representação da fonte.

#### 4.1 A Simplificação da Equação de Advecção-Difusão

A equação de advecção-difusão é apresentada no livro [Arya, 1999] da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v} C = D_L \nabla^2 C + F . \quad (4.1)$$

Para este trabalho o termo  $D_L \nabla^2 C$  é desprezado, pois o coeficiente de difusão laminar é muito menor que coeficiente de difusão turbulenta  $D_L \ll K_T$ .

Reescreve-se o seguinte termo como:

$$\nabla \vec{v} C = u \frac{\partial C}{\partial x} + C \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + C \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + C \frac{\partial w}{\partial z} . \quad (4.2)$$

Usando a definição encontrada em [Arya, 1999] o fluxo da atmosfera é incompressível. Na verdade despreza-se os efeitos da compressão, pois se a atmosfera fosse incompressível não haveria propagação do som. Então assume-se a seguinte condição:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 . \quad (4.3)$$

Reorganizando a equação (4.2) podemos simplificá-la usando a hipótese do fluxo incompressível,

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + C \left[ \underbrace{\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z}}_0 \right] . \quad (4.4)$$

Agora a equação (4.1) pode ser reescrita assim:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + F = 0 . \quad (4.5)$$

Seguindo o próximo passo aplica-se decomposição de Reynolds [Stull, 1988] onde

utiliza-se as seguintes substituições:

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' ; \\ v &= \bar{v} + v' ; \\ w &= \bar{w} + w' ; \\ C &= \bar{C} + C' . \end{aligned} \quad (4.6)$$

Usando as propriedades da decomposição de Reynolds apresentadas no livro [Stull, 1988] e a equação de continuidade (4.3) com as devidas substituições apresentadas acima chega-se a equação

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{\overline{\partial u' C'}}{\partial x} + \frac{\overline{\partial v' C'}}{\partial y} + \frac{\overline{\partial w' C'}}{\partial z} + F = 0 , \quad (4.7)$$

que após as simplificações pela hipóteses de Fick reduz-se a um modelo determinístico.

Relaciona-se a equação anterior com o fluxo turbulento em termo das concentrações médias, que é suposição básica para hipótese da Lei de Fick, que expressa o fato de que o transporte de qualquer grandeza física é no sentido da maior para a menor concentração. Em outras palavras é feito uma analogia com a primeira Lei de Fick [Daily e Harleman, 1966], usada em difusão molecular, supõe-se que o fluxo turbulento é proporcional ao gradiente da concentração média. Então os termos  $\overline{u' C'}$ ,  $\overline{v' C'}$  e  $\overline{w' C'}$  serão substituídos por  $-K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x}$ ,  $-K_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y}$  e  $-K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z}$  respectivamente. A teoria  $K$  de difusão turbulenta é facilmente compreendida e aceita quando resolve-se para tempos grandes. Aceitação ocorre devido a necessidade de ocorrer uma grande difusão onde o material dispersado é maior que os turbilhões do processo difusivo [Mangia et al., 2002].

O fechamento baseado tipicamente na lei de Fick relaciona flutuações no transporte com valores médios. Então é plausível que uma modificação no fechamento seja adequado para incluir um grau de liberdade de fase.

Ao substituir  $-K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x}$ ,  $-K_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y}$  e  $-K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z}$  na equação (4.7) chegamos a equação advecção-difusão completa, que é a base dos modelos de dispersão de poluentes na atmosfera. Na equação de advecção-difusão as variações dos coeficientes de difusão podem estar vinculados a uma função de concentração e há a presença de coordenadas temporal e espacial

para difusão anisotrópica. O que significa, que as flutuações para as diferentes direções comportam-se de maneira independente

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) . \quad (4.8)$$

A partir da equação (4.8) começa a estruturar-se o problema a ser resolvido, onde ele estará sujeito as seguintes condições:

- Contorno

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0 \text{ em } x = 0 \text{ e } \lim_{x \rightarrow L_x} \frac{\partial C}{\partial x} = 0 , \quad -L_y \leq y \leq L_y \text{ e } 0 \leq z \leq L_z ,$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \text{ em } y = -L_y \text{ e } y = L_y, \quad 0 \leq x \leq L_x \text{ e } 0 \leq z \leq L_z ,$$

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \text{ e } z = L_z, \quad 0 \leq x \leq L_x \text{ e } -L_y \leq y \leq L_y .$$

- Inicial  $C(x, y, z, 0) = 0$  para  $t = 0$  .
- Condição de Fonte  $uC(0, y, z, t) = \dot{Q}\delta(y - y_0)\delta(z - H_s)$  .

A equação também considerará os seguintes pontos:

- Os coeficientes de difusão serão constantes  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  reais.
- Para o modelo com fechamento Fikiano modificado o  $K_z$  será complexo e  $K_y$ ,  $K_z$  permanecem reais, isso porque o efeito turbulento é dominante na vertical.
- As velocidades na vertical e nas laterais serão desconsideradas, já a velocidade horizontal  $u$ , ou velocidade na direção  $x$  estará presente.
- A fonte na coordenada  $x$  está na fronteira do domínio.

A equação de advecção-difusão transiente tridimensional, em coordenadas cartesianas que modela dispersão de poluentes na atmosfera e que representa o problema proposto, é

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} . \quad (4.9)$$

Sobre as condições há uma ressalva feita pela autora da dissertação, ela refere-se a condição de fonte ideal para este tipo de problema. A fonte dita ideal seria um fluxo na derivada temporal aplicada em  $t = 0$ , mas como o objetivo inicial do trabalho é encontrar a manifestação da fase gerada pela introdução do coeficiente difusivo complexo, utiliza-se

uma fonte mais simples como a apresentada acima que é aplicada no contorno da equação diferencial em  $x$ .

## 4.2 Solução da Equação Advecção-Difusão

Para resolver (4.9) aplicou-se separação de variáveis onde  $C(x, y, z, t)$  será separada da seguinte forma:

$$C(x, y, z, t) = C_{xt}(x, t)C_y(y)C_z(z) . \quad (4.10)$$

A equação diferencial  $C_{xt}(x, t)$  separada da equação principal (4.10) :

$$\frac{\partial C_{xt}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} = \alpha C_{xt} , \quad (4.11)$$

$$K_y \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial z^2} = \alpha C_{yz} , \quad (4.12)$$

a constante de separação será representada por  $\alpha$ .

Subsequentemente separa-se  $C_y(y)$  da equação diferencial (4.12) e chega-se:

$$K_y \frac{d^2 C_y}{dy^2} + \beta C_y = 0 , \quad (4.13)$$

$$K_z \frac{d^2 C_z}{dz^2} - (\alpha + \beta) C_z = 0 , \quad (4.14)$$

onde a constante de separação é  $\beta$ .

Tendo as três equações diferenciais separadas, resolve-se cada uma delas.

### Solução de $C_y$

Na equação (4.13) dividi-se por  $K_y$  ,

$$\frac{d^2 C_y}{dy^2} + \frac{\beta}{K_y} C_y = 0 . \quad (4.15)$$

Suponha que a solução seja  $C_y(y) = e^{\lambda_y y}$  então  $C'_y(y) = \lambda_y e^{\lambda_y y}$  e  $C''_y(x) = \lambda_y^2 e^{\lambda_y y}$  substituindo em (4.15) e resolvendo através de um problema associado de Sturm-Liouville tem-se polinômio característico

$$\lambda_y^2 + \frac{\beta}{K_y} = 0, \quad (4.16)$$

que tem como solução,

$$\lambda_y = \pm \sqrt{-\frac{\beta}{K_y}}. \quad (4.17)$$

Nos casos onde  $\sqrt{-\frac{\beta}{K_y}} \geq 0$  e com as condições de contorno dadas pelo problema  $\frac{dC_y}{dy} = 0$  em  $y = -L_y$  e  $y = L_y$  as soluções encontradas são as triviais. Já o caso  $\sqrt{-\frac{\beta}{K_y}} < 0$  tem-se como solução

$$C_y(y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{n\pi}{L_y} y\right), \quad (4.18)$$

onde  $\lambda_y = \frac{n\pi}{L_y}$ . O valor de  $\beta$  é dado por

$$\beta = K_y \left[\frac{n\pi}{L_y}\right]^2. \quad (4.19)$$

### Solução de $C_z$

Para a equação (4.14) divide-se ela por  $K_z$

$$\frac{\partial^2 C_z}{\partial z^2} - \frac{(\alpha + \beta)}{K_z} C_z = 0. \quad (4.20)$$

As condições de contorno dadas pelo problema  $\frac{dC_z}{dz} = 0$  em  $z = 0$  e  $z = L_z$ . Resolvendo novamente um problema associado de Sturm-Liouville chega-se ao seguinte polinômio característico

$$\lambda_z^2 - \frac{(\alpha + \beta)}{k_z} = 0, \quad (4.21)$$

onde  $\lambda_z = \pm \sqrt{\frac{(\alpha + \beta)}{K_z}}$ . Nos casos onde  $\sqrt{\frac{(\alpha + \beta)}{K_z}} \geq 0$  e com as condições de contorno dadas pelo problema  $\frac{dC_z}{dz} = 0$  em  $z = 0$  e  $z = L_z$  as soluções encontradas são as triviais. Já o caso



$\sqrt{\frac{(\alpha+\beta)}{K_z}} < 0$  temos como solução

$$C_z(z) = \sum_{l=1}^{\infty} A_l \cos\left(\frac{l\pi}{L_z} z\right), \quad (4.22)$$

onde  $\lambda_z = \frac{l\pi}{L_z}$ . Encontra-se a expressão para o  $\alpha$ :

$$\alpha = - \left[ K_z \left(\frac{l\pi}{L_z}\right)^2 + K_y \left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2 \right]. \quad (4.23)$$

### Solução de $C_{xt}$

A equação (4.11) depende de  $x$  e  $t$ . Aplicando a técnica da Transformada de Laplace, transformando  $t$  em  $s$  e  $C_{xt}(x, t)$  em  $C_{xs}(x, s)$  usando a condição inicial  $C_{xt}(x, 0) = 0$  e a condição de contorno  $C_{xt}(0, t) = 1$ ,

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\partial C_{xt}}{\partial t} \right] + \mathcal{L} \left[ u \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} \right] - \mathcal{L} \left[ K_x \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} \right] - \mathcal{L} [\alpha C_{xt}] = 0, \quad (4.24)$$

$$sC_{xs} + u \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} - \alpha C_{xs} = 0. \quad (4.25)$$

Agora aplica-se a Transformada de Laplace nas condições iniciais e de contorno:

$$\mathcal{L} [C_{xt}(x, 0)] = 0, \quad (4.26)$$

$$\mathcal{L} [C_{xt}(0, t)] = \frac{1}{s}. \quad (4.27)$$

Reescrevendo a equação (4.25) e dividindo a equação por  $K_x$

$$\frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} - \frac{u}{K_x} \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} - \frac{(s - \alpha)}{K_x} C_{xs} = 0. \quad (4.28)$$

Aplicando a técnica de Transformada de Laplace também em  $x$  transformando para  $p$

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} \right] - \mathcal{L} \left[ \frac{u}{K_x} \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} \right] - \mathcal{L} \left[ \frac{(s - \alpha)}{K_x} C_{xs} \right] = 0, \quad (4.29)$$

$$\left(p^2 - \frac{u}{K_x}p - \frac{s - \alpha}{K_x}\right) C_{p,s}(p, s) - pC_{x,s}(0, s) - C'_{x,s}(0, s) + \frac{u}{K_x}C_{x,s}(0, s) = 0, \quad (4.30)$$

$$C_{p,s}(p, s) = \frac{\frac{1}{s}\left(p - \frac{u}{K_x}\right)}{\left(p^2 - \frac{u}{K_x}p - \frac{(s-\alpha)}{K_x}\right)}. \quad (4.31)$$

Tendo  $C(p, s)$  isolado pode-se aplicar a transformada inversa de Laplace na variável  $p$  transformando em  $x$  e desprezando a parte da solução que não representa o problema físico,

$$C(x, s) = e^{\frac{ux}{2K_x}} e^{\left(-\sqrt{s-\alpha+\frac{u^2}{4K_x}}\frac{x}{\sqrt{K_x}}\right)} \left(\frac{1}{s} - \frac{5\sqrt{K_x}u}{s\sqrt{s-\alpha+\frac{u^2}{4K_x}}}\right). \quad (4.32)$$

O próximo passo é aplicar a transformada inversa de Laplace na variável  $s$  levando em  $t$ , mas primeiro aplica-se a propriedade de translação [Özisk, 1974] e subsequentemente a inversão.

$$C(x, t) = \int_0^t \frac{1}{2} e^{\frac{ux}{2K_x}} e^{\left(\alpha - \frac{u^2}{4K_x}\right)\tau} e^{-\left(\frac{x^2}{4K_x\tau}\right)} \left[\frac{x}{\sqrt{\pi K_x \tau^3}} - \frac{5\sqrt{K_x}u}{\sqrt{\pi\tau}}\right] d\tau \quad (4.33)$$

Pode-se estranhar o porque a equação diferencial para  $x$  e  $t$  não tenha sido separada. Ao manter  $x$  e  $t$  juntos a componente de decaimento aparece direto ao aplicar a transformada inversa na equação (4.32).

Essa é a solução analítica após a reconstrução,

$$C(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} A_{nl} C(x, t) \cos\left(\frac{n\pi}{L_y}y\right) \cos\left(\frac{l\pi}{L_z}z\right) \quad (4.34)$$

### 4.3 O Problema de Definir Estruturas Coerentes

Para tornar a nova abordagem consistente precisa-se definir propriedades para validar os resultados e garantir que ela é um problema bem-posto no corpo  $\mathbb{C}$ . As definições dadas a seguir serão necessárias para introduzir um formalismo matemático consistente para definir estruturas coerentes sem ambiguidade físicas.

**Definição 1.** *Seja  $U$  um espaço vetorial sobre o números  $\mathbb{C}$ . Uma norma sobre  $U$  é uma função  $f : U \rightarrow \mathbb{C}$  que verifica as seguintes propriedades:*

$$i) \|u\| \geq 0$$

$$ii) \|u\| = 0 \iff u = 0$$

$$iii) \|\lambda u\| = |\lambda| \|u\| \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}, \forall u \in U$$

$$iv) \|u + w\| \leq \|u\| + \|w\| \quad \forall u, w \in U \quad (\text{desigualdade triangular})$$

O par  $(U, \|\cdot\|)$  é definido como sendo o espaço vetorial normado. Um espaço normado é um espaço de Banach se for completo, isto é, toda sequência de Cauchy é convergente em  $U$  [Kreyszig, 1978].

**Definição 2.** *Seja  $V$  um espaço vetorial onde  $V \subset U$ , logo complexo  $\mathbb{C}$ . Um produto interno em  $V$  é um funcional bilinear em  $V \times V$  que associa a cada par de vetores  $u, u_1, u_2, w \in V$  um escalar  $\alpha \in \mathbb{R}$ , tal que, as seguintes condições sejam satisfeitas:*

$$i) (u_1 + u_2, w) = (u_1, w) + (u_2, w)$$

$$ii) (\alpha u, w) = \alpha (u, w)$$

$$iii) (u, w) = (w, u)$$

$$iv) (u, u) \geq 0 \text{ e } (u, u) = 0 \text{ se, e somente se, } u = 0$$

para cada  $u, u_1, u_2, w \in V$  e  $\alpha \in \mathbb{R}$ .

Um produto interno em  $V$  define uma norma em  $V$  dado por

$$\|u\| = \sqrt{(u, u)}, \quad \forall u \in V. \quad (4.35)$$

**Definição 3.**  *$H$  é dito um espaço de Hilbert se ele é completo segundo a métrica induzida pelo produto interno [Kreyszig, 1978].*

**Definição 4.** *O funcional bilinear  $A(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ , ou seja, a função numérica  $A$  definida em  $V \times V$  é linear em  $V$ , se é linear em cada uma das componentes, mais detalhes em [Kreyszig, 1978].*

Agora seja  $\Omega$  um conjunto aberto pertencente  $\mathbb{C}$ ,  $V$  e  $H$  espaço de Hilbert. Considera-se o espaço de funções  $L^2(\Omega)$  tem por definição  $\Omega \subset \mathbb{C} = \{f : V \rightarrow \mathbb{C} \mid f \text{ é Lebesgue mensurável } \|f\|_{L^2(\Omega)} < \infty\}$  onde sua norma é dada por  $\|f\|_{\Omega} = \int_{\Omega} |f(x)|^2 dx$

Como o espaço de funções do problema possui as propriedades descritas acima, diz-se que o problema é contínuo, diferenciável e integrável. Dando respaldo para todas as operações aplicadas sobre o espaço. Para mais detalhes e demonstrações sugere-se o [Kreyszig, 1978] que define todas as propriedades para um corpo qualquer e para o corpo dos reais [Medeiros et al., 2000] e [Ladeia, 2012].

#### 4.4 Estruturas Coerentes

A definição não é única, mas [Hussain e Fazle, 1986] e [Robinson, 1991] relacionaram Estruturas Coerentes (ECs) aos fenômenos de intrusão e ejeção no escoamento turbulento próximo a um contorno rígido.

Para [Hussain e Fazle, 1986] estrutura coerente é como uma massa de fluido turbulento com grande escala, com vorticidade correlata e em fase, sobre uma região do fluido. Com base nesse conceito, pode-se estabelecer que a turbulência seja uma superposição ao de movimentos coerentes e não coerentes (aleatórios), esses últimos se estendendo além das fronteiras da estrutura coerente.

Já [Robinson, 1991] definiu as ECs como sendo uma região tridimensional onde pelo menos uma das variáveis fundamentais do escoamento (componente da velocidade, massa específica, temperatura, etc.) apresenta uma significativa correlação com ela mesma ou com outra variável num intervalo temporal que é significativamente maior do que as menores escalas locais do escoamento.

Devido ao problema abordado podemos compreender ECs dando uma interpretação física. O termo coerente é usado frequentemente em problemas de ondulatória quando estão em fase ou quando mantém a diferença de fase constante no tempo [Nussenzveig, 2002]. [Bodmann et al., 2013] fez uma conexão para a mecânica quântica onde tais propriedades são correlacionadas.

A definição de coerência é bem fundamentada matematicamente como sistemas com diferença de fase constante, oscilando na mesma frequência. Também relacionados com a manifestação de interferências destrutivas ou construtivas que podem se apresentar de forma tanto espacial quanto temporal.

A turbulência na atmosfera é abordado como transporte por turbilhões (veja por exemplo as abordagens baseadas em LES), por isso esta proposta de incluir a fase na equação.

Por outro lado turbilhões são estruturas coerentes e portanto precisam na sua descrição uma característica que reflete coerência. Isto pode ser feito por uma ou mais fases. A equação de Navier-Stokes pela sua estrutura não contém explicitamente uma fase e portanto não pode ser considerado completa. Da mesma forma modelos como a equação de advecção-difusão.

Dos fenômenos eletromagnéticos manifesto nas equações de Maxwell obtém-se uma descrição que permite coerência através de uma descrição complexa que naturalmente representa a influência de uma fase [Jackson, 1999]. No eletromagnetismo, por exemplo, a densidade de energia é proporcional ao quadrado do campo elétrico e portanto representado de forma bilinear [Jackson, 1999]. Representações bilineares, quadráticas ou produto entre grandeza e o seu complexo conjugado, pela natureza sempre são semi-positivo definido como dito anteriormente. Sabe-se que as grandezas observáveis não possuem parte imaginária, ou seja, no caso que em uma equação é considerada adequada, os valores observáveis se apresentam como invariantes de uma descrição complexa. Então é plausível que uma equação constituinte pode ter além de soluções negativas também complexas em geral, enquanto as observáveis aqui as concentrações  $C$  de poluentes são descritos de forma bilinear  $C = \mathcal{C}(x, y, z, t)\mathcal{C}^*(x, y, z, t)$ , que desta forma permite uma fase junto a amplitude.

Para continuidade do trabalho precisa-se compreender aspectos importantes que serão aplicados para obtenção dos resultados desejados. Por questão de organização a equação (4.34) será renomeada para enfatizar que ela possui um coeficiente  $K_z$  complexo:

$$\mathcal{C}(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} A_{nl} \mathcal{C}(x, t) \cos\left(\frac{n\pi}{L_y} y\right) \cos\left(\frac{l\pi}{L_z} z\right). \quad (4.36)$$

#### 4.5 Forma Bilinear

Tem-se uma forma bilinear a partir do momento que introduz  $K_z$  complexo na equação de advecção-difusão. Usamos um funcional bilinear  $A(\cdot, \cdot)$  para representar a parte real e imaginária da nossa equação. Ao multiplicar a solução pela sua solução complexa conjugada obtemos uma solução no corpo dos  $\mathbb{R}$ , que representa a observável, ou seja a concentração de poluentes.

Lembrando que por definição [Churchill e Brown, 1974] o complexo de uma constante é representado por  $K_z = K_{za} + iK_{zb}$ , onde  $K_{za}$  é a parte real e  $K_{zb}$  imaginária e o seu complexo conjugado é escrito como  $K_z^* = K_{za} - iK_{zb}$ . Assim a solução  $\mathcal{C}^*(x, y, z, t)$  é definida como

solução complexa conjugada

$$\mathcal{C}^*(x, y, z, t) = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=1}^{\infty} A_{n'l'} \mathcal{C}^*(x, t) \cos\left(\frac{n'\pi}{L_y} y\right) \cos\left(\frac{l'\pi}{L_z} z\right). \quad (4.37)$$

Ao multiplicar  $\mathcal{C}(x, y, z, t)$  e  $\mathcal{C}^*(x, y, z, t)$  obtém-se uma concentração real, que é uma distribuição semi-positiva definida, garantindo a positividade da solução. Cumpre enfatizar, que aparecem termos com os mesmos índices nas somas das equações (4.36) e (4.37) e também termos cruzados que são as manifestações dos efeitos decorrentes da fase e portanto representam uma propriedade de uma estrutura coerente que pode ser interpretada como proveniente de turbilhões. A solução completa deve satisfazer a condição de contorno em  $x = 0$

$$C(0, y, z, t) = \frac{\dot{Q}}{u} \delta(y - y_0) \delta(z - z_0), \quad (4.38)$$

portanto, para calcular o coeficiente  $A_{nl'n'l'}$  usa-se norma generalizada [Butkov, 1968]

$$A_{nl'n'l'} = \frac{\int_0^{L_z} \int_{-L_y}^{L_y} \mathcal{C}(x, t) \mathcal{C}^*(x, t) \frac{\dot{Q}}{u} \delta(y - y_0) \delta(z - H_s) \phi_{nl'n'l'}(y, z) dy dz}{\int_0^{L_z} \int_{-L_y}^{L_y} \mathcal{C}(x, t) \mathcal{C}^*(x, t) \phi_{nl'n'l'}^2(y, z) dy dz}, \quad (4.39)$$

onde

$$\phi_{nl'n'l'}(y, z) = \cos\left(\frac{n\pi}{L_y} y\right) \cos\left(\frac{l\pi}{L_z} z\right) \cos\left(\frac{n'\pi}{L_y} y\right) \cos\left(\frac{l'\pi}{L_z} z\right), \quad (4.40)$$

$$A_{nl'n'l'} = \frac{4\dot{Q} \phi_{nl'n'l'}(y_0, H_s)}{u(L_y L_z)^2}. \quad (4.41)$$

E os termos cruzados  $\mathcal{C}_i \mathcal{C}_j^*$ ,  $\mathcal{C}_j \mathcal{C}_i^*$  são gerados na multiplicação das duas formas bilineares e causam o aparecimento de oscilações.

## CAPÍTULO 5

### Resultados

Para analisar os resultados graficamente usamos 5000 autovalores para que houvesse uma convergência satisfatória e computacionalmente viável. Segue abaixo uma figura com três gráficos da solução real mostrando a convergência para 1000, 5000 e 10000 autovalores. Percebe-se que com 5000 autovalores temos uma convergência satisfatória. Seria melhor usar 10000, mas o custo computacional não compensa, logo optou-se por 5000 autovalores.

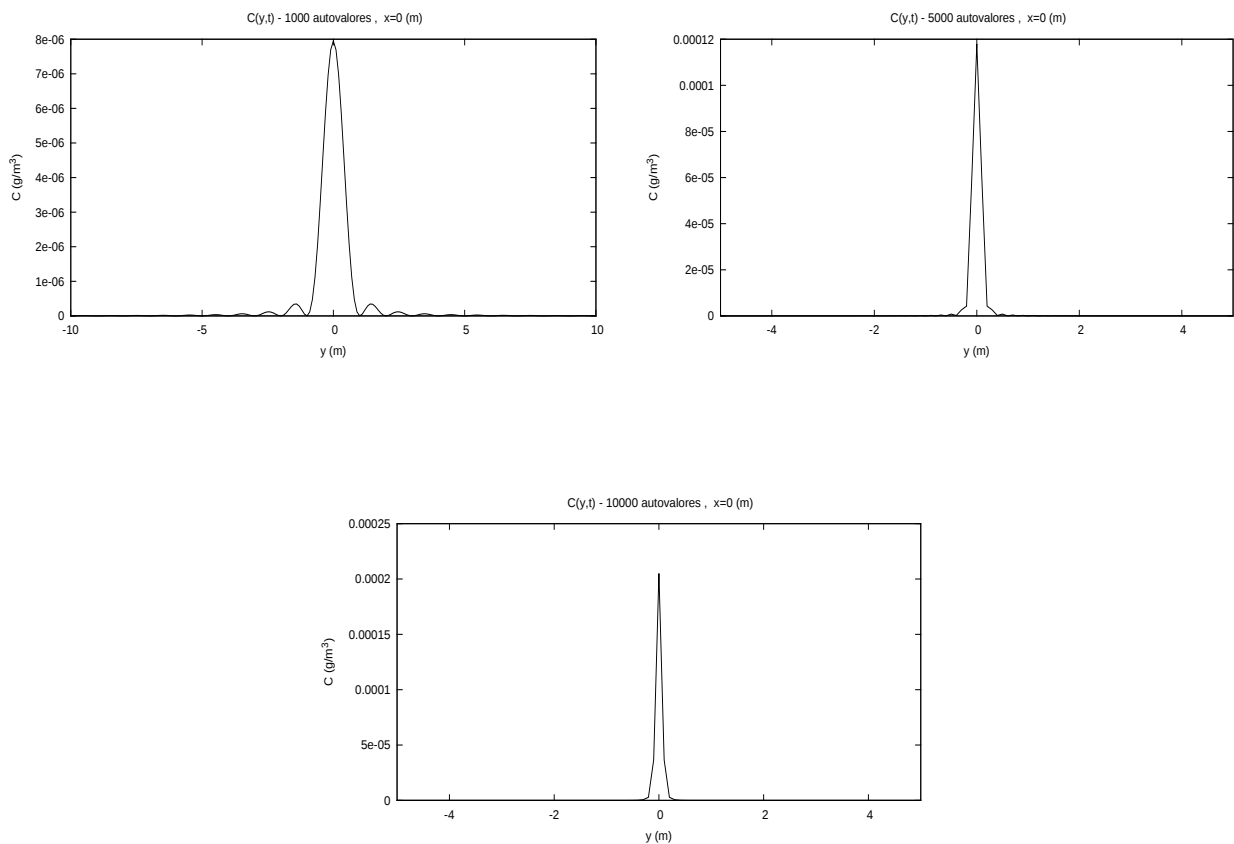


Figura 5.1:  $C(y,t)$  com  $K_z$  real para 1000, 5000 e 10000 autovalores.

As concentrações dos poluentes foram reescaladas pela taxa de emissão  $C(x_0, y_0, z_0, t)/\dot{Q}$ . Para o estudo de comportamento da solução real e bilinear  $C(y, t)$ ,  $C(z, t)$ ,  $C(x, y)$  e  $C(x, z)$  foram utilizados os seguintes parâmetros:

Tabela 5.1: Valores dos parâmetros usados nas simulações para investigar o comportamento das soluções.

$u$	$K_x$	$K_y$	$L_x$	$L_y$	$L_z$	$\dot{Q}$	$z_0$	$y_0$
$(ms^{-1})$	$(m^2s^{-1})$	$(m^2s^{-1})$	(m)	(m)	(m)	$(gs^{-1})$	(m)	(m)
1	0,1	0,1	1000	1000	1000	1	50	0

### Comportamento $C(y,t)$

Nas figuras apresentadas abaixo plotou-se a solução  $C(y, t)$  e variou-se  $x$  para cada figura diferente e deixando  $z = 50 m$  fixo. As figuras tem gráficos  $a$  até  $h$  que são integradas no tempo de  $[0..t]$  segundos e  $y$  varia  $[-20..20]$  metros sendo que a fonte localiza-se em  $y = 0 m$  e  $z = 50 m$ :

- (a) Solução Real com coeficiente difusivo  $K_z$  é real.
- (b) Solução Bilinear com  $K_z = K_{za} + iK_{zb}$ , com  $K_{zb} = 0$ .
- (c)-(h) Solução Bilinear com  $K_z = K_{za} + iK_{zb}$  onde varia-se o  $K_{zb}$ .

O perfil usado para o coeficiente difusivo  $K_z(z)$ :

No caso real,

$$K_z(z) = 0.1 \sin(z\pi/L_z) . \quad (5.1)$$

E para o caso complexo

$$K_z(z) = 0.1 \sin(z\pi/L_z) + iK_{zb} . \quad (5.2)$$



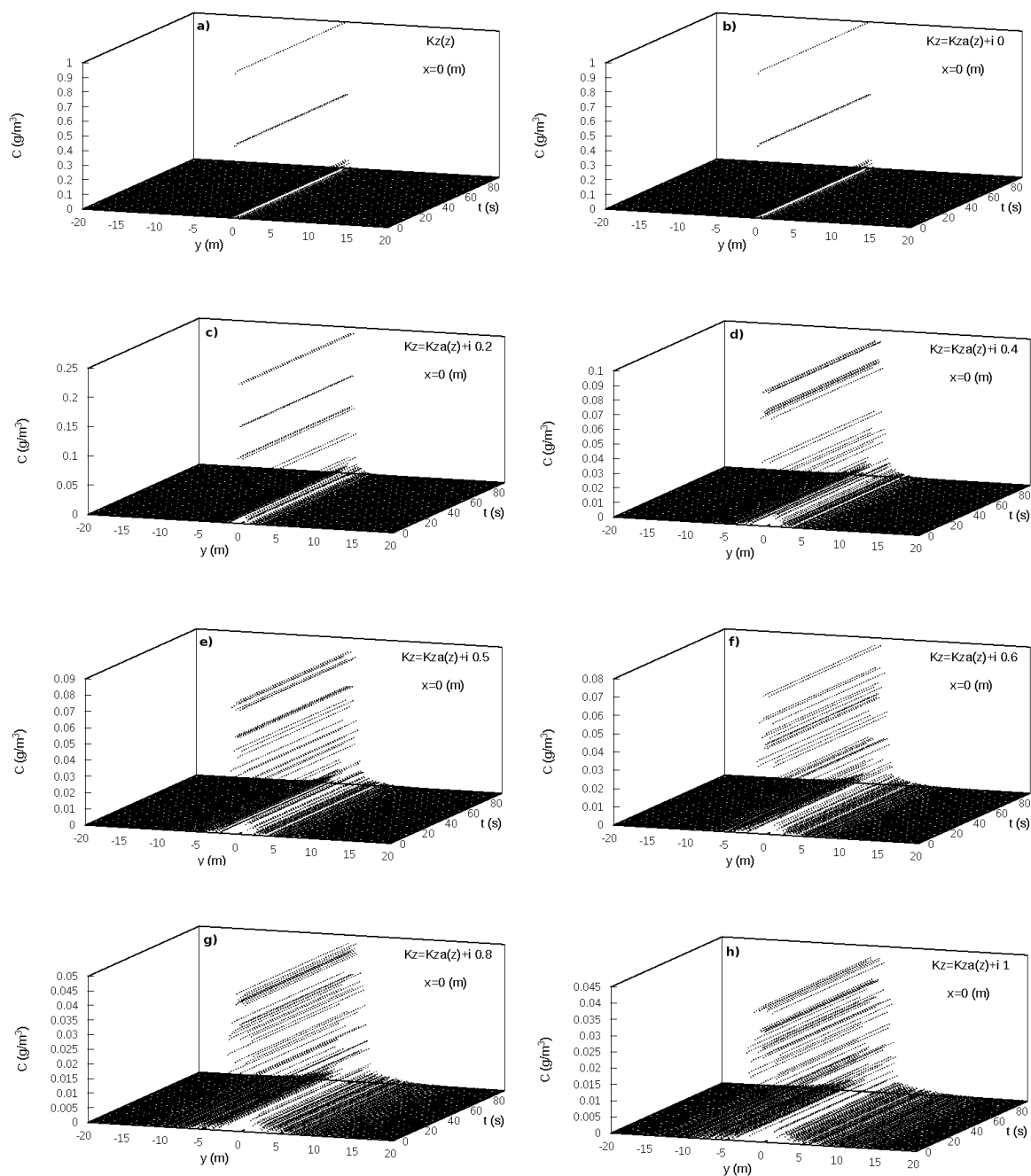


Figura 5.2: Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em  $C(0, y, 50, t)$

Na figura (5.2), nos casos onde o  $K_z$  é complexo e o  $K_{zb} \neq 0$ , ou seja, onde há introdução da fase, os gráficos apresentam uma dificuldade para representar a função delta. Isto ocorre porque a função é descontínua e está sendo construída a partir de uma Série de Fourier, sendo esta contínua.

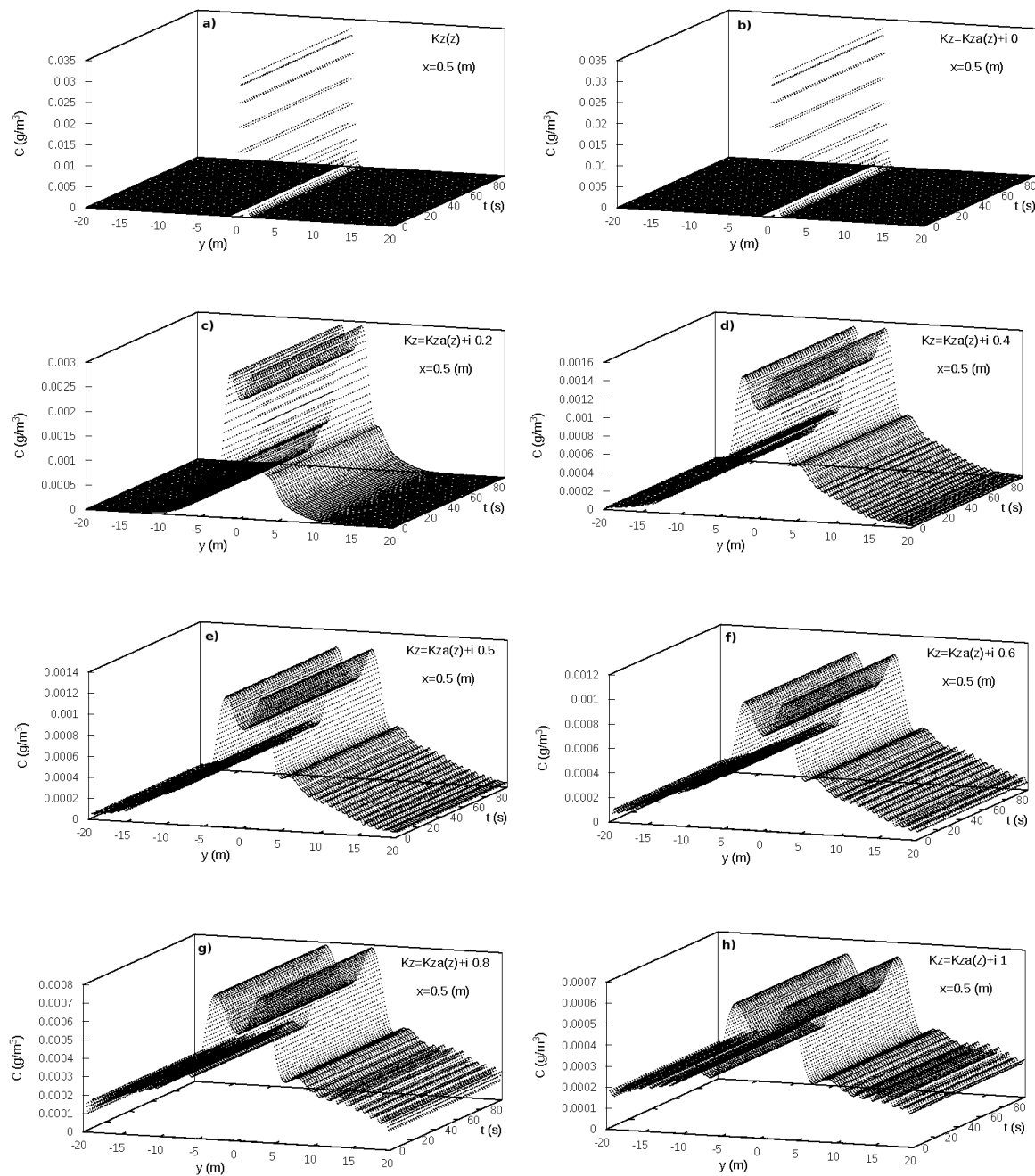


Figura 5.3: Comportamento da solução para solução real e a solução bilinear em  $C(0.5, y, 50, t)$

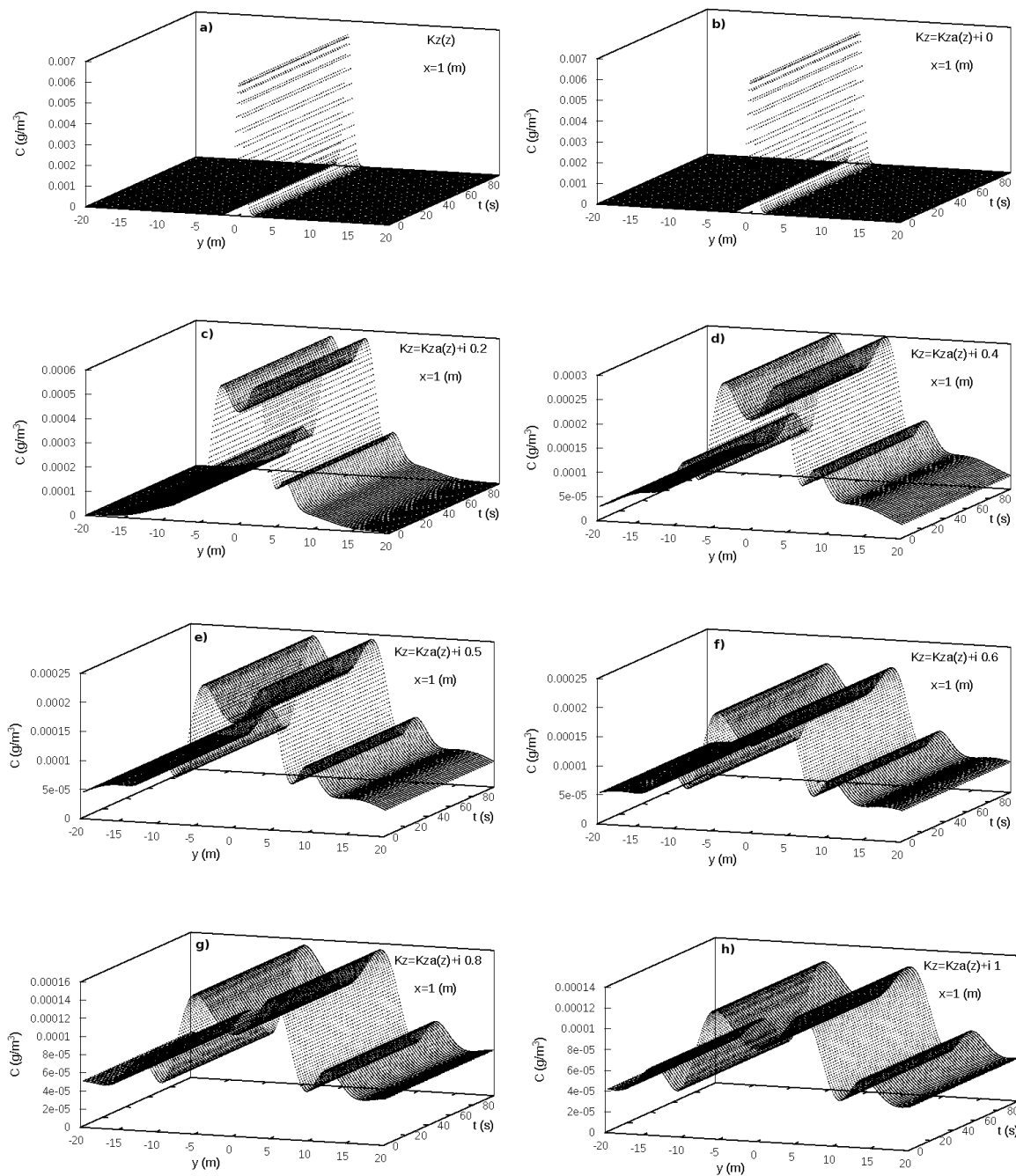


Figura 5.4: Comportamento da solução para solução real e a solução bilinear em  $C(1, y, 50, t)$

Nas figuras subsequentes (5.3) e (5.4) pode-se observar a medida que afasta-se da fonte, na direção  $x$ , surgem oscilações advindas da presença da fase. Afirma-se isso dado que nos gráficos (a)'s e (b)'s das figuras não há a manifestação alguma de oscilação, como o esperado das soluções real e bilinear com  $K_{zb} = 0$ . Outro aspecto presente é o aumento das oscilações com o aumento do  $K_{zb}$ .

Outro resultado que se confirmou com as simulações pode ser visto nas três figuras (5.2), (5.3) e (5.4) nos gráficos (a)'s e (b)'s onde tem-se a solução real é igual a solução bilinear com  $K_{zb} = 0$ , portanto a solução bilinear é coerente com a solução real, como esperado.

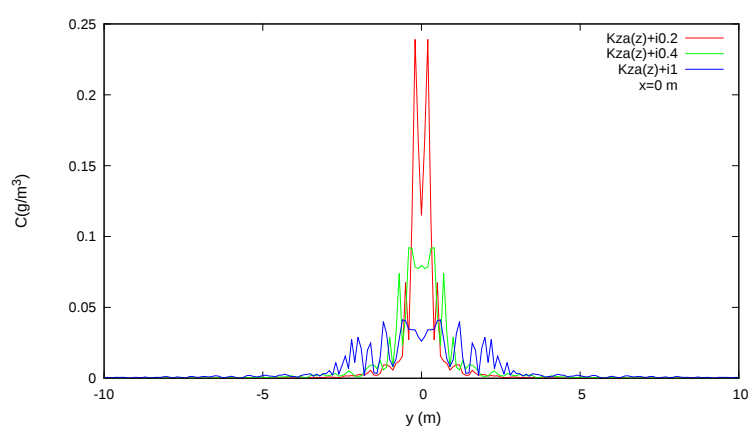


Figura 5.5: Comportamento da solução bilinear  $C(0, y, 50, t)$  com variações  $K_{zb}$

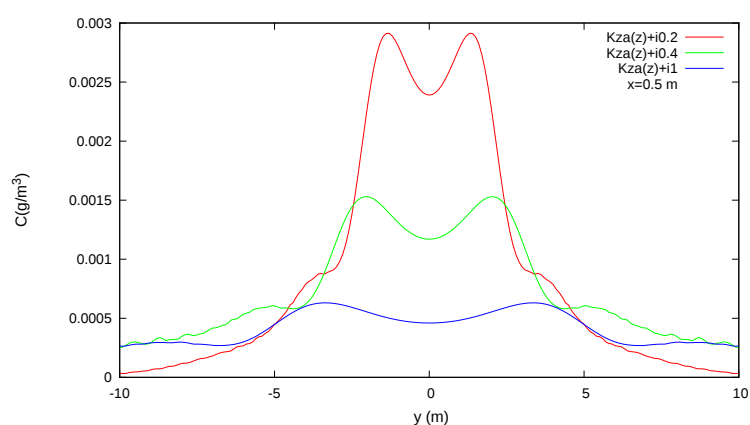


Figura 5.6: Comportamento da solução bilinear  $C(0.5, y, 50, t)$  com variações  $K_{zb}$

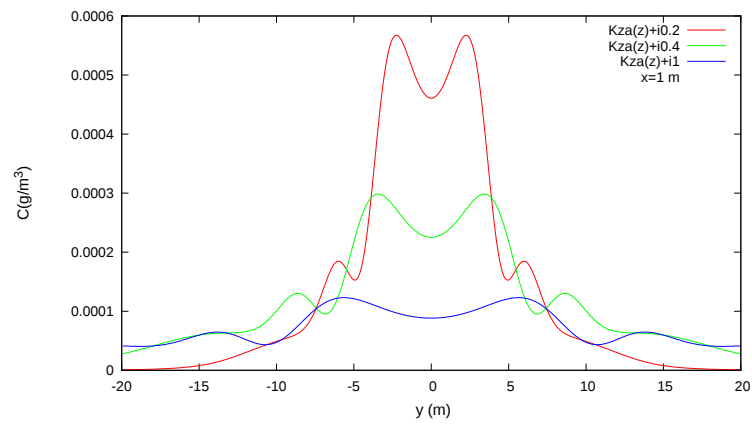


Figura 5.7: Comportamento da solução bilinear  $C(1, y, 50, t)$  com variações  $K_{zb}$

Nas figuras (5.5), (5.6) e (5.7) apresentam  $C(y, t)$  bidimensional para  $x = 0 \text{ m}$ ,  $x = 0.5 \text{ m}$  e  $x = 1 \text{ m}$  respectivamente, no tempo  $t = 100 \text{ s}$  para três valores distintos  $K_{zb}$ . Identifica-se nas três figuras, que a dispersão cresce com o aumento da parte imaginária. Com isso pode-se sugerir que há um coeficiente difusivo efetivo que depende da parte real e imaginária de  $K_z$ .

### Comportamento $C(z,t)$

Nas figuras apresentadas abaixo plotou-se a solução  $C(z, t)$  e variou-se  $x$  para cada figura diferente e deixando  $y = 0$  m fixo. As figuras tem gráficos  $a$  até  $h$  onde são integradas no tempo de  $[0..t]$  segundos e  $z$  varia  $[30..70]$  metros sendo que a fonte localiza-se à 50 m de altura:

- (a) Solução Real com coeficiente difusivo  $K_z$  é real.
- (b) Solução Bilinear com  $K_z = K_{za} + iK_{zb}$ , com  $K_{zb} = 0$ .
- (c)-(h) Solução Bilinear com  $K_z = K_{za} + iK_{zb}$  onde varia-se o  $K_{zb}$ .

O perfil usado para o coeficiente difusivo  $K_z(z)$ :

No caso real,

$$K_z(z) = 0.1 \sin(z\pi/L_z) . \quad (5.3)$$

E para o caso complexo

$$K_z(z) = 0.1 \sin(z\pi/L_z) + iK_{zb} . \quad (5.4)$$

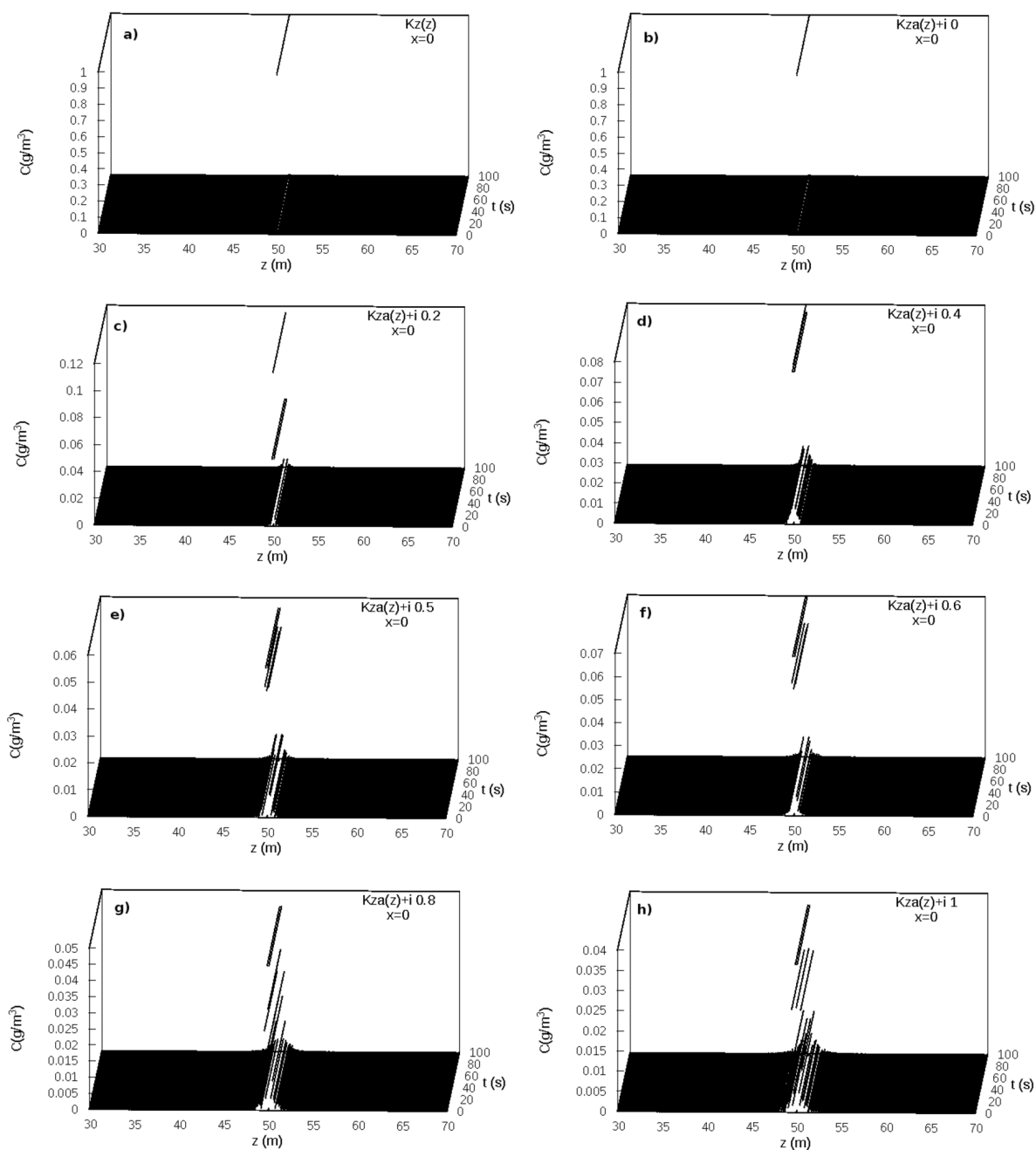


Figura 5.8: Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em  $C(0, 0, z, t)$

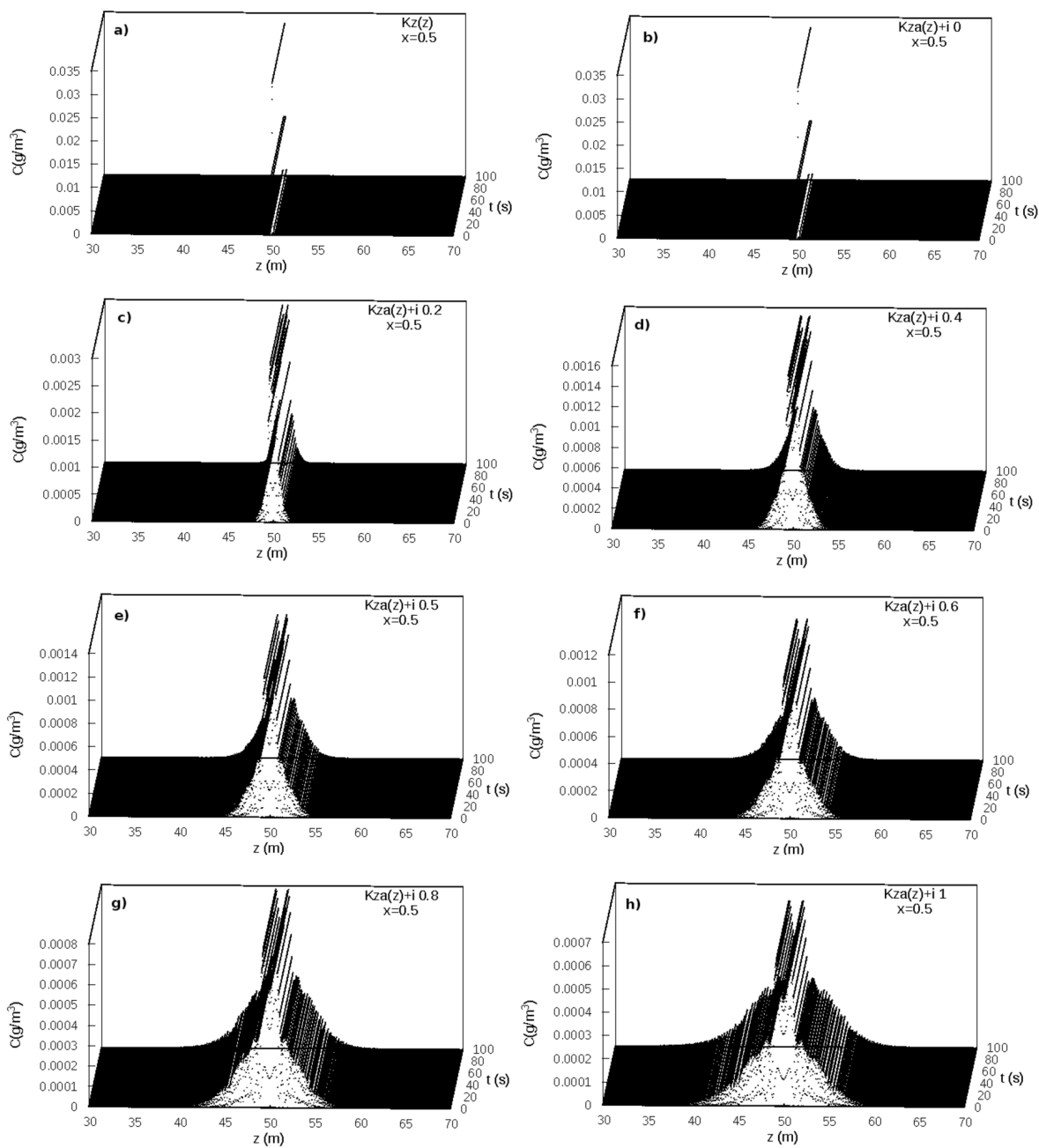


Figura 5.9: Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em  $C(0.5, 0, z, t)$



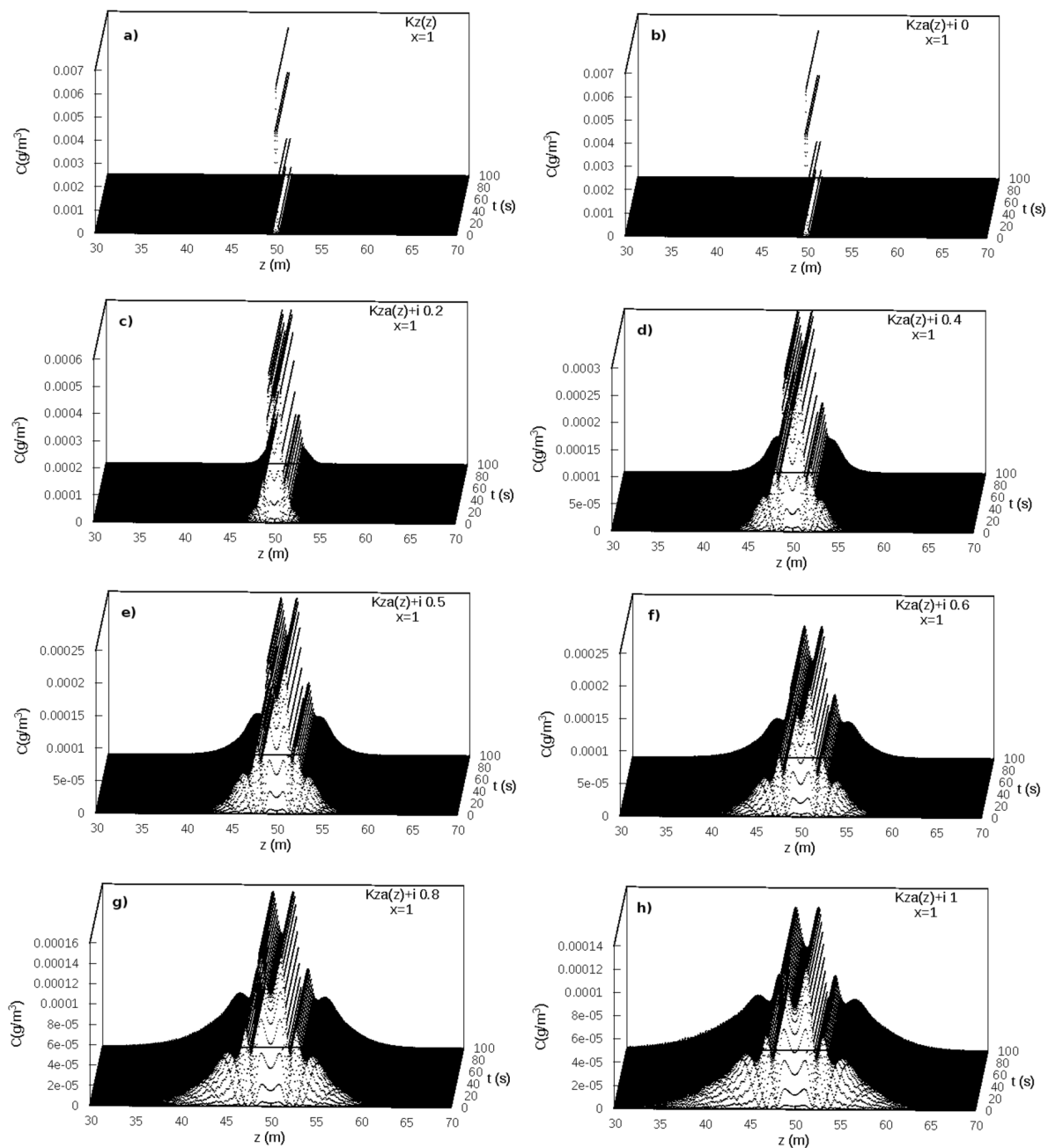


Figura 5.10: Comportamento da solução para o caso real e para a solução bilinear em  $C(1,0,z,t)$

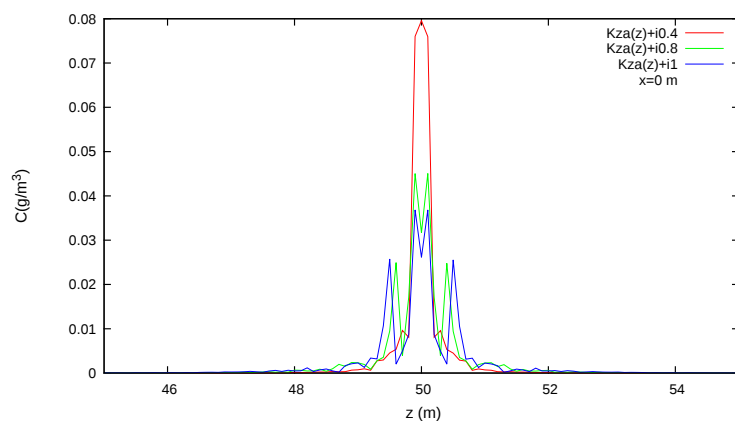


Figura 5.11: Comportamento da solução bilinear  $C(0, 0, z, t)$  com variações  $K_{zb}$

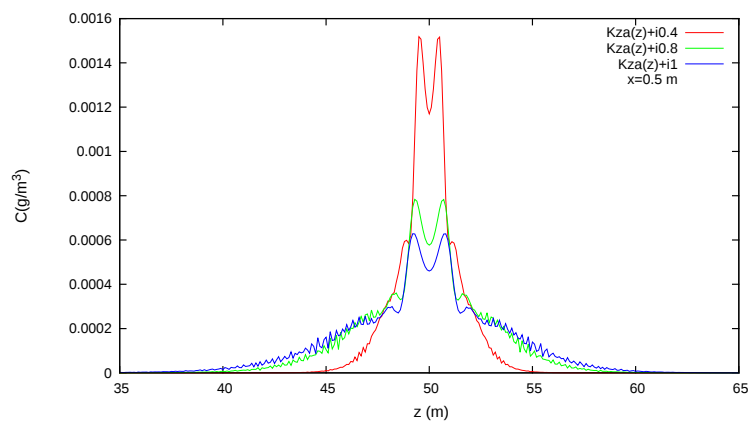


Figura 5.12: Comportamento da solução bilinear  $C(0.5, 0, z, t)$  com variações  $K_{zb}$

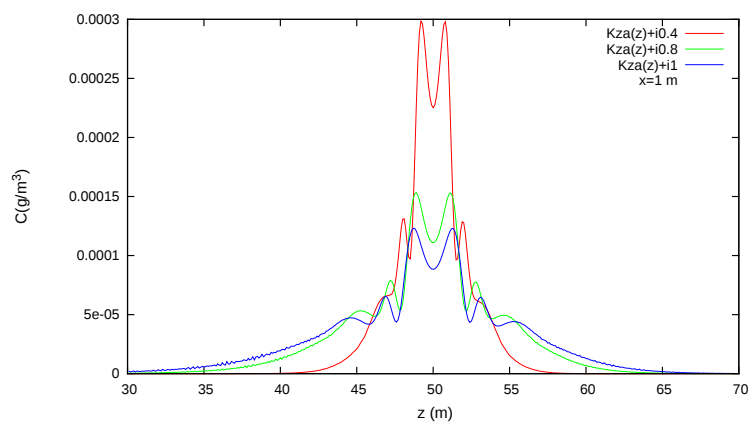


Figura 5.13: Comportamento da solução bilinear  $C(1, 0, z, t)$  com variações  $K_{zb}$

Para  $C(z, t)$  observa-se nas figuras (5.8), (5.9) e (5.10) um comportamento semelhante à  $C(y, t)$ , dificuldade da representação da função delta em  $x = 0$ , aumento das oscilações ao afastar-se da fonte e a solução real é igual à solução bilinear (gráficos a's e b's).

Já nas figuras (5.11), (5.12) e (5.13) apresentam  $C(z, t)$  bidimensional para  $x = 0$  m,  $x = 0.5$  m e  $x = 1$  m respectivamente, no tempo  $t = 100$  s para valores distintos  $K_{zb}$  também há um aumento da dispersão relacionado ao aumento de  $K_{zb}$ .

Abaixo faz se uma comparação entre o comportamento da solução com  $K_z$  real e a com  $K_z$  complexo usando os mesmos perfis para os  $K_z$ 's real (5.1) e complexo (5.2) e os valores da tabela (5.1)

### Comportamento $C(x,t)$

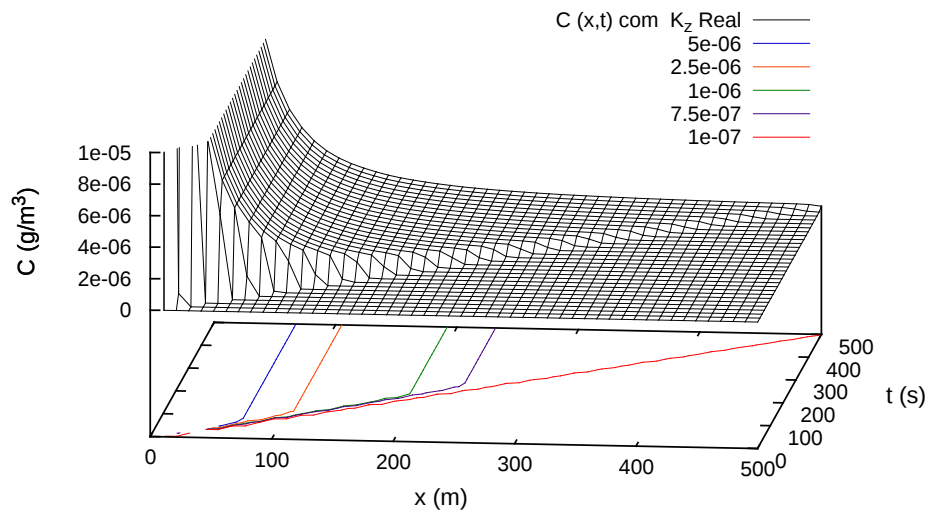


Figura 5.14: Comportamento da solução real em  $C(x, 0, 50, t)$

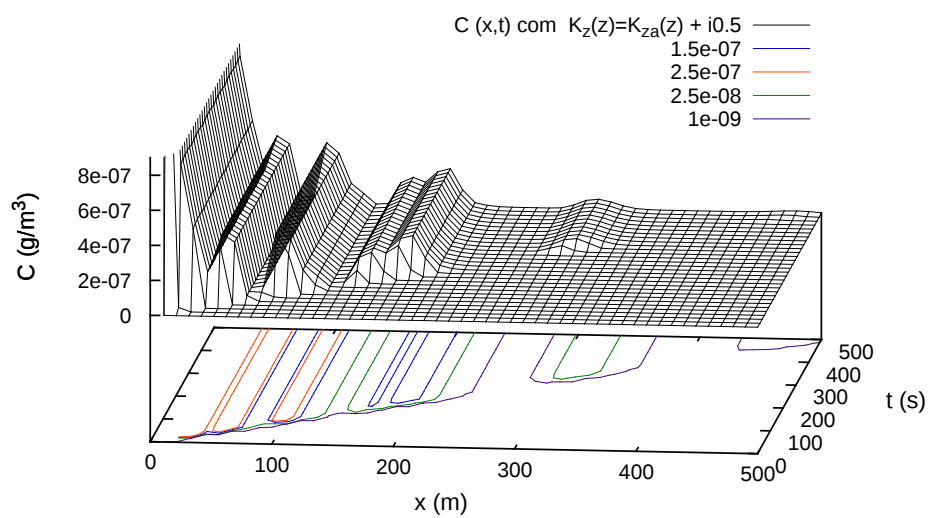


Figura 5.15: Comportamento da solução bilinear em  $C(x, 0, 50, t)$  com  $K_{zb} = 0.5$

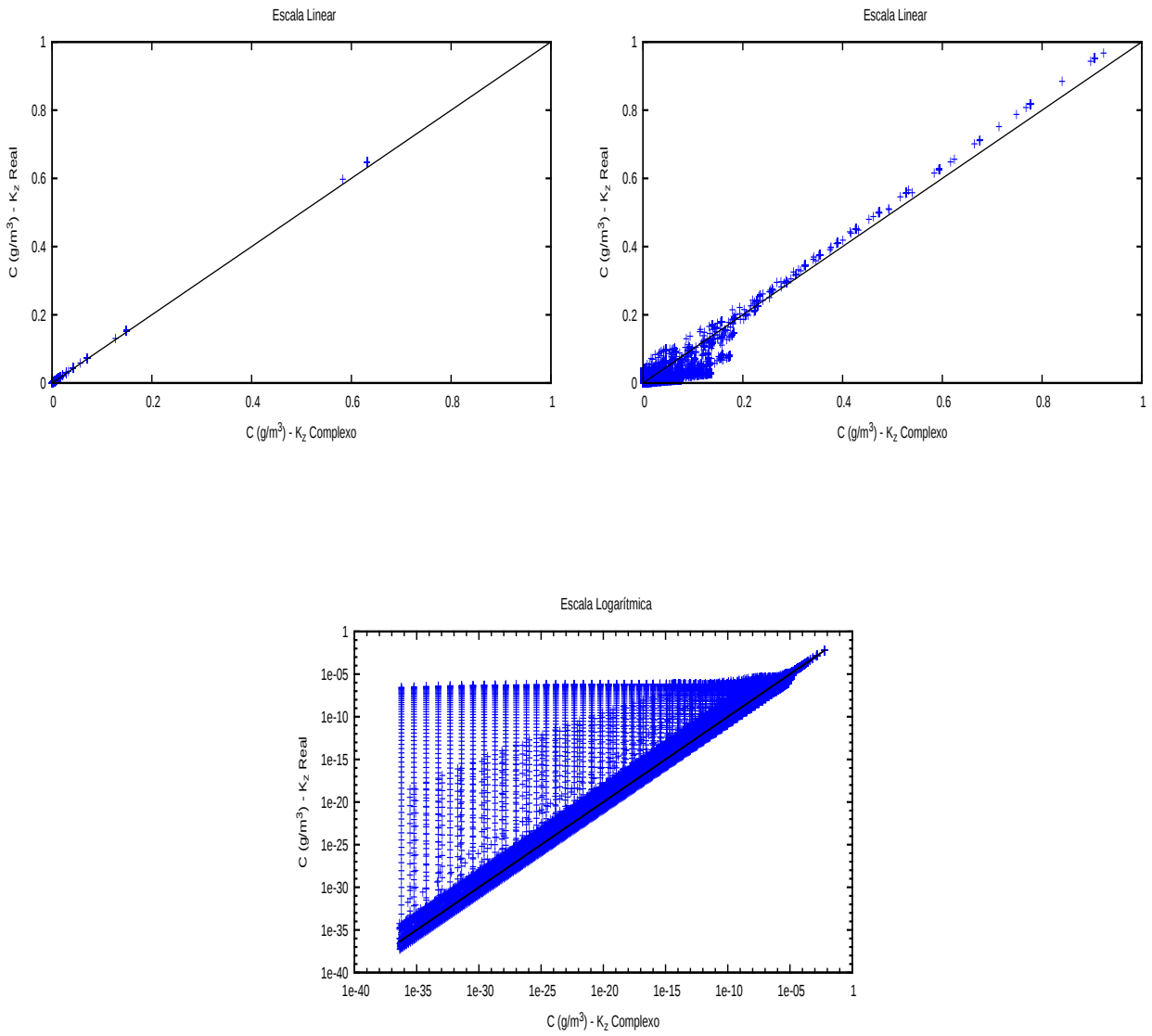


Figura 5.16:  $C(x, t) K_z \text{ Real} \times C(x, t) K_z \text{ Complexo}$  Linear e Logarítmico.

### Comportamento $C(x,y)$

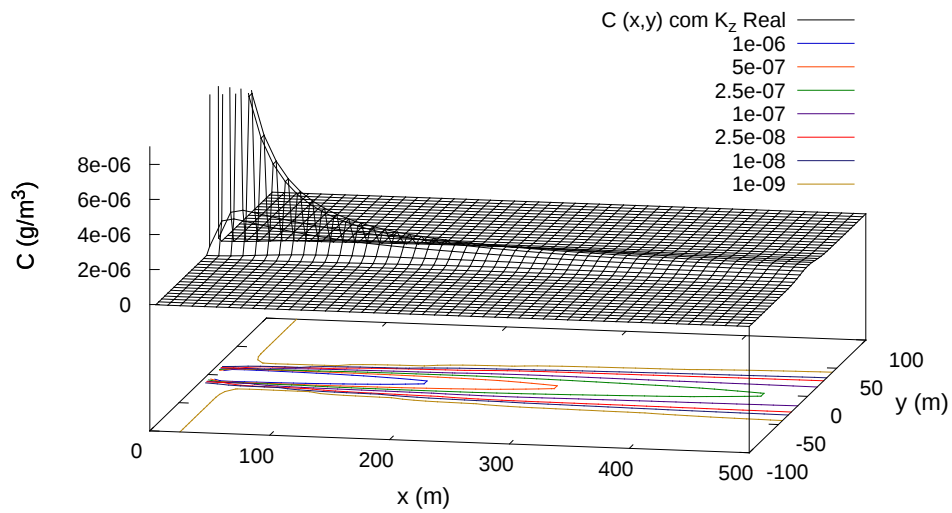


Figura 5.17: Comportamento da solução real em  $C(x, y, 50, t)$

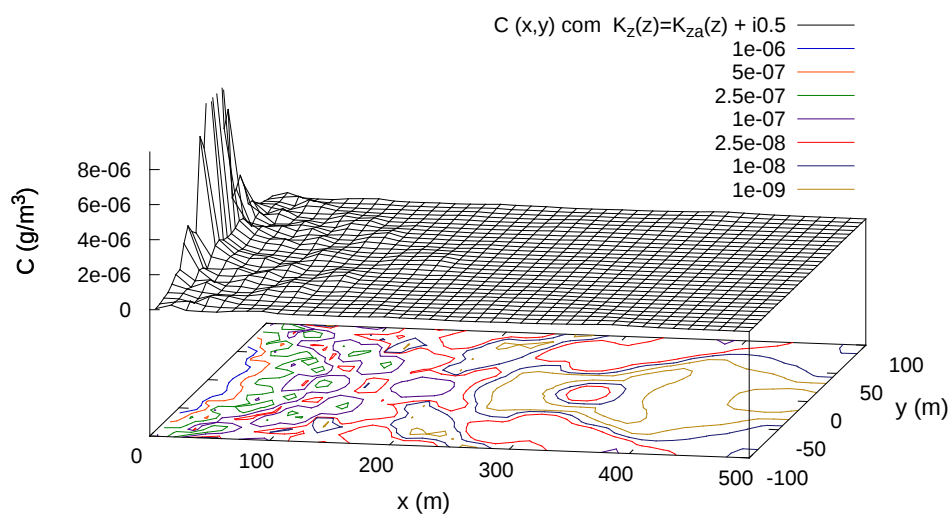


Figura 5.18: Comportamento da solução bilinear em  $C(x, y, 50, t)$  com  $K_{zb} = 0.5$

Comportamento  $C(x,z)$

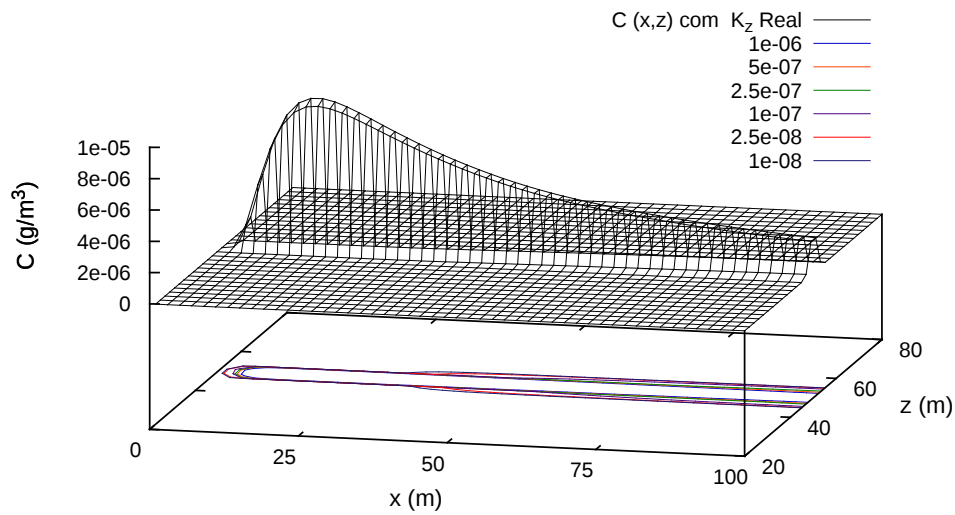


Figura 5.19: Comportamento da solução real em  $C(x, 0, z, t)$

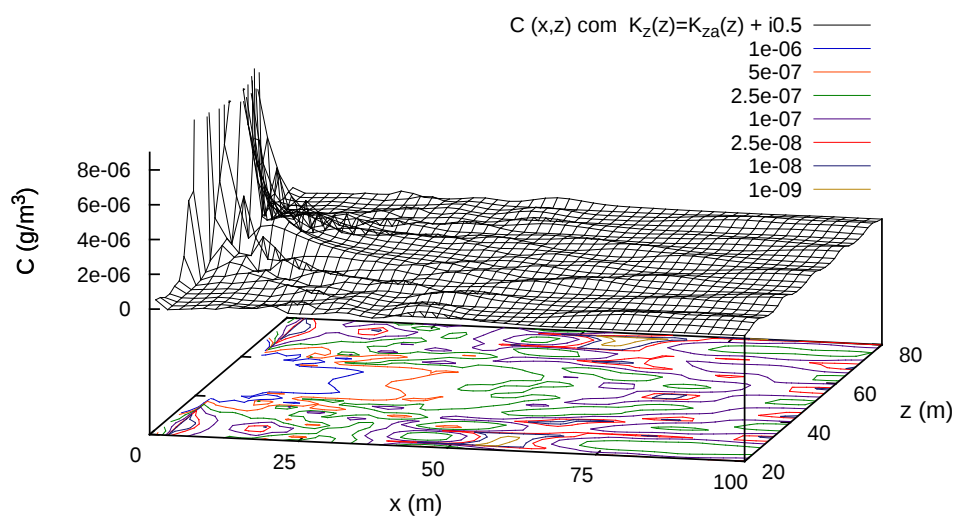


Figura 5.20: Comportamento da solução bilinear em  $C(x, 0, z, t)$

As figuras (5.14), (5.15), (5.17), (5.18), (5.19) e (5.20) apresentam uma comparação feita entre as soluções com  $K_z$  real e complexo. O comportamento com o  $K_z$  real está nas figuras (5.14), (5.17) e (5.19) para  $C(x, t)$ ,  $C(x, y)$  e  $C(x, z)$  respectivamente. Observa-se nos gráficos com  $K_z$  real o comportamento esperado para as soluções de dispersão de poluentes encontradas na literatura, ou seja, o poluente se dispersa de maneira suave. Já nas figuras (5.15), (5.18) e (5.20) apresentam os comportamentos das soluções com coeficiente difusivo  $K_z$  complexo. Observa-se o comportamento da solução com a introdução do coeficiente difusivo complexo, na forma de oscilações nas concentrações devido à fase. Essas oscilações aparecem nas três direções apesar de apenas o coeficiente difusivo na direção de  $z$ ,  $K_z$ , ter parte imaginária.

Já para a figura (5.16) a explicação para a distribuição com pontos apenas acima da bissetriz, vem do fato que a concentração advinda do modelo complexo tem oscilações, enquanto o modelo real apenas altera as concentrações de forma suave. O efeito que resulta deste fato é que enquanto para coordenadas  $x-t$  o modelo real esta variando gradativamente em relação a vizinhança, o modelo complexo oscila. Os valores das oscilações predominantemente menores inclusive tendo valores próximos de zero ocorrem devido a concentração difundir mais rápido com as variações provocadas pela presença da fase. É fácil ver no gráfico (5.15) onde temos as isolinhas que há regiões onde o valor da concentração do poluentes é igual mesmo para regiões diferentes. Ao comparar as concentrações geradas pelo modelo bilinear e real observa-se que a concentração gerada pelo modelo real decai com o tempo sem flutuações já para o modelo complexo existe flutuações na concentração o que geram as curvas de níveis que mostram os locais onde a concentração tem o mesmo valor. Apesar das flutuações ao longo do tempo e espaço as concentrações decaem com uma velocidade maior do que no modelo com coeficiente real o que é mais um indício que o modelo está no caminho certo já que em dias onde há mais turbulência pode-se observar uma dispersão rápida devido a presença de vórtices que ajudam na dispersão do poluente.



## CAPÍTULO 6

### Conclusão

Foi discutido nesta dissertação um modelo para descrever a dispersão de poluentes na camada limite planetária. O ponto de partida é a já bem explorada equação de advecção-difusão, porém utilizando um fechamento Fickiano modificado que inclui a fase na solução, isto é, na distribuição da concentração de poluentes.

A interpretação da fase refere-se ao fato de a turbulência implicar em turbilhões de várias escalas como já citado, que por sua vez são estruturas coerentes. No presente trabalho também foi estabelecido uma definição consistente tanto sob ponto de vista formal quanto físico de uma abordagem onde a concentração local é compatível com propriedades de distribuições. Este objetivo é alcançado utilizando uma representação da distribuição de poluentes de forma bilinear.

O fechamento de Fick leva à equação de advecção-difusão num modelo determinístico, sendo que o fenômeno originalmente é estocástico. Neste trabalho o fechamento é modificado incluindo uma parte imaginária e portanto representando a distribuição de poluentes de forma bilinear. Cumpre salientar que a equação para calcular a amplitude de dispersão é linear enquanto a distribuição é não-linear. Os termos responsáveis pela não-linearidade são os termos cruzados gerados ao fazer o produto de termos da amplitude e do seu complexo conjugado. São estes termos que introduzem os efeitos da fase.

Alguns argumentos utilizados fazem analogia com fenômenos eletromagnéticos, embasando este raciocínio não convencional no ramo da mecânica dos fluidos turbulentos. Pode-se dizer que a parte imaginária é associada à presença de turbulência, mais especificamente a relação entre a parte real e imaginária é associada a um regime turbulento específico.

Evidentemente deseja-se desenvolver o modelo a partir de princípios mais consagrados, como as leis de conservação, ao invés de basear a modificação do modelo em argumentos

axiomáticos. Porém o trabalho presente tem como objetivo demonstrar pela comparação das soluções reais e complexas da equação de advecção-difusão e as suas propriedades associadas que esta descrição não gera contradições, mas sim é formalmente e fisicamente consistente.

A comparação entre a descrição meramente real e a complexa mostra que nas soluções complexas a distribuição é muito mais rica em ondulações, ou seja flutuações, o que de fato colabora pelo menos de forma qualitativa com as observações por covariância de turbilhões (*eddy covariance*).

Ademais, um argumento formal permite interpretar os resultados como distribuições probabilísticas para realizações das concentrações de poluentes. O fato que a amplitude é composta por várias contribuições permite associar a cada termo um estado. Considerando um instante  $t$  e uma posição  $x$ ,  $y$  e  $z$ , a concentração é uma superposição de combinações de estados diferentes. Cada estado tem o seu fator peso que permite dizer que a forma bilinear é claramente uma grandeza probabilística e, conseqüentemente, as distribuições descrevem um perfil espacial e temporal que reproduzem um processo estocástico com um número suficientemente grande de realizações. Portanto o fechamento Fickiano com um “coeficiente de difusão complexo” preserva pelo menos parcialmente o caráter estocástico no modelo de advecção-difusão.

Evidentemente o fato de ter baseado a modificação do fechamento em argumentos axiomáticos deixa muitas questões em aberto. Neste sentido a presente dissertação tem o papel de apresentar uma possibilidade de quebrar um paradigma tradicional de tentar descrever processos que envolvem turbulência. Para reforçar esta ideia nova muitos trabalhos futuros serão necessários para explorar este potencial, como, por exemplo, realizar um grande número de simulações estocásticas e comparar com este modelo, reformular o modelo introduzindo uma condição de fonte mais adequada, definir um coeficiente de difusão efetivo para comparar esta solução com resultados experimentais e explorar o impacto da introdução de termos imaginários nos demais coeficientes de difusão.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Arya, S. P., 1999. “**Air Pollution Meteorology and Dispersion**”. Oxford University Press, New York, USA.

Berlyand, M., 1975. “**Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere**”. Translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA, 2 edition.

Bodmann, B. E. J., Zabadal, J. R. S., Vilhena, M. T., and Quadros, R., 2013, “**On Coherent Structures from a Diffusion-Like Model**”, In *Integral Methods in Science and Engineering*, pages 1–10. Springer New York Heidelberg Dordrecht London.

Buligon, L., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2006. “Uma solução semi-analítica da dispersão de poluentes com a equação do telégrafo e fluxo contra-gradiente”, **Revista Brasileira de Meteorologia**, vol. 21, pp. 77–85.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Bodmann, B., 2008. “An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach”, **Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; S. Potapenko**, page 27–36.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2007a. “An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure”, **Environmental Fluid Mechanics**, vol. 7, pp. 43–54.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2007b. “Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 41(26), pp. 5496 – 5501. 2007b.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., and Tirabassi, T., 2010. “An Analytical Solution for the Transient Two-dimensional Advective-Diffusion Equation with Non-Fickian Closure in Cartesian Geometry by the General Integral Transform Technique”, **Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; M. E. Pèrez**, page 33–40.

Butkov, E., 1968. “**Mathematical physics**”. Addison-Wesley series in advanced physics. Addison-Wesley Pub. Co.

Chorley, Richard J.e Barry, R. G., 2012. “**Atmosfera, Tempo e Clima**”. Bookman Companhia Ed, 9 edition.

Chrysikopoulos, C., Hildemann, L. M., and Roberts, P. V., 1992. “A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground level area source”, **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 747–757.

Churchill, R. and Brown, J., 1974. “**Complex Variables and Applications**”. McGraw-Hill.

Cotta, R. and Mikhaylov, M., 1997. “**Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**”. John Wiley & Sons, Baffins Lane, Chichester, England.

Cotta, R. M., 1993. “**Integral transforms in computational heat and fluid flow**”. CRC Press, Boca Raton, Florida.

Daily, J. and Harleman, D., 1966. “**Fluid Dynamics**”. Addison-Wesley Publishing Company, Mass., USA.

Degrazia, G. A., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2001. “Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer”, **Journal of Applied Meteorology**, pages 1233–1240.

Degrazia, G. A., Velho, H. F. C., and Carvalho, J. C., 1997. “Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties”, **Contributions to Atmosph. Phys.**, pages 57–64.

Demuth, C. A., 1978. “Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources”, **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 1255–1258.

Donn, W. L., 1978. “**Meteorologia**”. Editorial Reverté, Barcelona, Espanha.

Duff, M. and Isham, C., 1980. “Self-duality, helicity and coherent states in non-abelian gauge theories”, **Nuclear Physics B**, vol. 162, pp. 271–284.

Hussain, A. K. and Fazle, M., 1986. “Coherent structures and turbulence”, **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 173, pp. 303.

Irwin, J., 1979. “A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability”, **Atmospheric Environment (1967)**, vol. 13.

Jackson, J. D., 1999. “**Classical electrodynamics**”. Wiley, New York, NY, 3rd ed. edition.

Koch, W., 1989. “A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption”, **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1729–1732.

Kreyszig, E., 1978. “**Introductory functional analysis with applications**”. Londres, 1rd ed. edition.

Ladeia, C. A., 2012. “**Formulação semi-discreta aplicada as equações 1D de convecção-difusão-reação e de Burgers**”, Dissertação de mestrado, Curso de Pós Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, Londrina.

Lin, J. S. and Hildeman, L. M. A., 1997. “A generalized mathematical scheme to analitically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition”, **Atmospheric Environment**, vol. 31, pp. 59–71.

Mangia, C., Moreira, D., Schipa, I., Degrazia, G., Tirabassi, T., and Rizza, U., 2002. “Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions”, **Atmospheric Environment**, vol. 36(1), pp. 67–76.

Medeiros, L. A., , and Miranda, M. M., 2000. “**Espaços de Sabolev: Iniciação aos Problemas Elíticos não Homogêneos**”. Rio de Janeiro, 3rd ed. edition.

Mello, K. B. d., Carvalho, J. C., and Vilhena, M. T., 2007. “Simulação da dispersão de poluentes usando o método de decomposição”, **Ciência e Natura**, vol. 12/200, pp. 363–366.

Mikhaylov, M. and Özisik, 1984. “**Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**”. John Wiley & Sons, New York.

Moreira, D., 1996. “**Comparação entre um modelo gaussiano atualizado e a equação de difusão no cálculo da concentração superficial de poluentes na camada limite convectiva: o caso de fontes pontuais contínuas elevadas**”, Dissertação de mestrado, Mestrado em Física, UFSM, Santa Maria.

Moreira, D., Vilhena, M., Buske, D., and Tirabassi, T., 2009a. “The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere”, **Atmospheric Research**, vol. 92(1), pp. 1–17.

Moreira, D. M., Carvalho, J. C., and Tirabassi, T., 2005a. “Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers”, **Atmospheric Environment**, vol. 39(20), pp. 3643–3650.

Moreira, D. M., Ferreira Neto, P. V., and Carvalho, J. C., 2005b. “Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion”, **Environmental Modelling and Software**, vol. 20, pp. 1159–1165.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Buske, D., 2009b. “On the GILTT Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer”, **Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications, Organized by: D. Moreira; M. Vilhena** **Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications, Organized by: D. Moreira; M. Vilhena**, vol. 1, pp. 179–202.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D., and Tirabassi, T., 2006a. “The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL”, **Atmospheric Environment**, vol. 40, pp. 3186–3194.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D., and Tirabassi, T., 2009c. “The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere”, **Atmospheric Research**, vol. 92, pp. 1–17.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Carvalho, C., and Degrazia, G. A., 2004. “Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion”, **Environmental Modelling and Software**, vol. 20(10), pp. 1347–1351.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., and Carvalho, C., 2005c. “A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant”, **Ecological Modelling**, vol. 189(3-4), pp. 413–424.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., Costa, C., and Bodmann, B., 2006b. “Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach”, **Water, Air and Soil Pollution**, vol. 177, pp. 411–439.

Moura, A., Vilhena, M., and Degrazia, G., 1995. “Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável”, **Proceedings of COBEM**.

Nefussi, N., 1976. “**Curso de poluição do ar e d’água**”. Instituto Brasileiro do Petróleo, Rio de Janeiro, BR.

Nieuwstadt, F. T. M., 1980. “An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 14, pp. 1361–1364.

Nieuwstadt, F. T. M. and Haan, B. J., 1981. “An analytical solution of the one-dimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation”, **Atmospheric Environment**, vol. 15, pp. 845–851.

Nussenzveig, H., 2002. “**Curso de Física básica: fluidos, oscilações e ondas, calor**”. Curso de física básica. Edgard Blücher.

Özisik, M., 1974. “**Heat Conduction**”. John Wiley & Sons, New York, 2 edition.

Pires, C., 1996. “Um estudo analítico de dispersão de contaminantes abandonados por fontes aéreas em uma camada limite convectiva”, Dissertação de mestrado, Curso de Pós Graduação em Sensoriamento Remoto, Porto Alegre.

Roberts, O. F. T., 1923. “The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere”, **Proc. Roy. Soc.**, vol. 104, pp. 640–648.

Robinson, S. K., 1991. “The kinematics of turbulent boundary layer structure”, **Tech. Memo. 103859**.

Rounds, W., 1955. “Solutions of the two-dimensional diffusion equation”, **American Geophysical Union**, vol. 36, pp. 395–405.

Scriven, R. A. and Fisher, B. A., 1975. “The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II. The effect of turbulent diffusion”, **Atmospheric Environment**, vol. 9, pp. 59–68.

Sharan, M., Singh, M., and Yadav, A., 1996a. “Mathematical model for atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance”, **Atmospheric Environment**, vol. 30(7).

Sharan, M., Yadav, A., and Singh, M., 1996b. “A mathematical model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions”, **Atmospheric Environment**, vol. 30(8), pp. 1209–1220.

Smith, F., 1957. “The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere”, **J. Fluid Mechanics**, vol. 2, pp. 49–76.

Stull, R. B., 1988. “**An Introduction to Boundary Layer Meteorology**”. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holanda.

Tirabassi, T., Buske, D., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2008. “A two-dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground”, **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, page 2096–2104.

Van Ulden, A. P., 1978. “Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground”, **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 2125–2129.



Vilhena, M., Buske, D., Degrazia, G., and Quadros, R., 2012. “An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer”, **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, vol. 391(8), pp. 2576 – 2584.

Vilhena, M., Rizza, U., Degrazia, G., Mangia, C., Moreira, D., and Tirabassi, T., 1998. “An analytical air pollution model: Development and evaluation”, **Contrib. Atmos. Phys.**, vol. 71, pp. 315–320.

Weymar, G., 2012. “**Simulação analítica da dispersão de substâncias radiotivas liberadas na atmosfera por usinas nucleares pelo método GILTT**”, Dissertação de mestrado, Mestrado em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre.

Wortmann, S., Vilhena, M., Moreira, D., and Buske, D., 2005. “A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL”, **Atmospheric Environment**, vol. 39(12), pp. 2171–2178.

Yeh, G. and Huang, C., 1975. “Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere”, **Boundary Layer Meteorology**, vol. 9, pp. 381–390.