

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

**EFEITOS ESTOCÁSTICOS EM MODELOS DETERMINÍSTICOS PARA
DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE ATMOSFÉRICA**

por

Jaqueline Fischer Loeck

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 2014

EFEITOS ESTOCÁSTICOS EM MODELOS DETERMINÍSTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE ATMOSFÉRICA

por

Jaqueline Fischer Loeck

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. Marco Túllio Menna Barreto de Vilhena (UFRGS)

Coorientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann (UFRGS)

Aprovada por:

Prof.^a Dr.^a Daniela Buske (UFPel / Pelotas)

Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia (UFSM / Santa Maria)

Prof. Dr. Rogério José Marczak (PROMEC - UFRGS / Porto Alegre)

Prof. Dr. Rogério José Marczak
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 20 de Fevereiro de 2014

AGRADECIMENTOS

Agradeço

À minha família, em especial aos meus pais, pelo apoio e incentivo não apenas durante a pesquisa, mas no decorrer de toda a vida. Ao meu companheiro Odilon, pela compreensão e palavras de carinho nos momentos difíceis.

Aos professores Bardo Bodmann e Marco Vilhena pela orientação e pelos conhecimentos transmitidos. Aos colegas do GENUC, especialmente à Cibele, à Debora e ao Marcelo, pelo companheirismo e sugestões pertinentes.

À CAPES pelo suporte financeiro. Ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes. E à todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

EFEITOS ESTOCÁSTICOS EM MODELOS DETERMINÍSTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE ATMOSFÉRICA

A presente dissertação apresenta uma análise da presença de componentes estocásticas na equação de advecção-difusão, e como estas influenciam a estabilidade da solução. Para tal, a equação de advecção-difusão determinística com fonte contínua idealizada é resolvida através da transformada de Fourier. Adiante, a equação determinística é combinada com componentes estocásticas na velocidade do vento, comprimento de rugosidade e coeficiente de difusão turbulenta vertical. Além disso, é considerada uma permeabilidade parcial nos contornos verticais, de modo que parte do poluente ultrapassa a camada limite atmosférica ou o solo, e outra parte reflete e retorna à atmosfera. Os resultados obtidos foram validados com os dados do experimento de Hanford.

Palavras-chave: equação de advecção-difusão, componentes estocásticas, reflexão parcial.

ABSTRACT

STOCHASTIC EFFECTS ON DETERMINISTIC MODELS FOR POLLUTANT DISPERSION IN THE ATMOSPHERIC BOUNDARY LAYER

The present work presents an analysis of the presence of stochastic components in the advection-diffusion equation and how they influence the stability of the solution. For this purpose, the deterministic advection-diffusion equation with idealized continuous source is solved by Fourier transform. Further, the deterministic equation is combined with stochastic components in the wind speed, the roughness and the vertical eddy diffusion coefficient. Moreover, partial permeability is considered in the vertical contours, in the sense that part of the pollutant leaks out of the atmospheric boundary layer or into the soil, and a part is reflected back into the atmosphere. Results were validated with the Hanford experimental data.

Keywords: advection-diffusion equation, stochastic components, partial reflection.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
3	MICROMETEOROLOGIA E DISPERSÃO DE POLUENTES	9
3.1	Camada limite atmosférica	9
3.2	Regimes de estabilidade	11
3.2.1	Camada limite convectiva	11
3.2.2	Camada limite residual	14
3.2.3	Camada limite estável	14
3.2.4	A estrutura da turbulência na camada limite convectiva	14
4	MODELO PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA ...	16
4.1	Modelos determinísticos e estocásticos	16
4.2	Descrições Euleriana e Lagrangeana	16
4.3	Modelos gaussianos	17
4.3.1	Modelo <i>puff</i> gaussiano	18
4.3.2	Modelo de pluma gaussiana	19
4.4	O modelo físico-matemático	20
4.5	O modelo com condição inicial instantânea	23
4.6	O modelo com “condição inicial contínua”	30
5	EFEITOS ESTOCÁSTICOS EM MODELOS DETERMINÍSTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA	31
5.1	Influência de variações para simular estocasticidade	31
5.2	Condições de contorno completamente reflexivas	32

5.3	Condições de contorno parcialmente reflexivas	34
6	DADOS PARA VALIDAÇÃO DO MODELO	36
6.1	Experimento de Hanford (Washington, EUA)	36
6.2	Parametrização da turbulência	37
6.3	Perfil de velocidade do vento	40
6.4	Índices estatísticos	41
7	RESULTADOS	43
7.1	Influência de variações para simular estocasticidade	43
7.1.1	Variações na velocidade média \bar{u}	45
7.1.2	Variações no comprimento de rugosidade z_0	51
7.1.3	Variações no coeficiente de difusão vertical K_z	57
7.2	Condições de contorno parcialmente reflexivas	63
8	CONCLUSÃO	71
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	73

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

c	espécie genérica que se conserva na atmosfera
C	variável dependente após aplicação da transformada de Fourier
\bar{c}	concentração média de um contaminante passivo no <i>puff</i> (g/m^3)
\bar{C}	concentração média de um contaminante passivo na pluma (g/m^3)
\bar{c}_x	fator da concentração média dependente de x e t
\bar{c}_y	fator da concentração média dependente de y e t
\bar{c}_z	fator da concentração média dependente de z e t
C_o	concentrações observadas experimentalmente (s/m^3)
C_p	concentrações preditas pelo modelo (s/m^3)
COR	coeficiente de correlação
D	constante de integração
$FA2$	fator de dois
FB	fração de inclinação
FS	desvio fracional padrão
f	frequência adimensional
f_c	parâmetro de Coriolis: $f_c = 1,46 \times 10^{-4} s^{-1}$
$(f_m)_i$	frequência do pico espectral (s)
$(f_m)_{n,i}$	frequência do pico espectral na estratificação neutra (s)
$F_i^E(n)$	espectro de energia euleriana normalizado pela variância da velocidade euleriana (s)
g	aceleração da gravidade (m/s^2)
G	constante
H_s	altura da fonte (m)
i	indica as velocidades u , v e w
k	constante de Von-Kármán
K_α	coeficiente de difusão, onde α indica as direções x , y e z (m^2/s)
K_x	coeficiente de difusão na direção x (m^2/s)
K_y	coeficiente de difusão na direção y (m^2/s)

K_z	coeficiente de difusão na direção z (m^2/s)
K_0	constante
K_1	coeficiente de difusão avaliado na altura z_1 (m^2/s)
L	comprimento de Obukhov (m)
m	constante relacionada com a instabilidade atmosférica
n	frequência (s^{-1})
n'	frequência adimensional
$NMSE$	erro quadrático médio normalizado
$N(0, 1)$	distribuição normal com média $\mu = 0$ e variância $\sigma^2 = 1$
p	constante relacionada com a rugosidade da superfície
Q	intensidade da fonte (g/s)
S	termo fonte
\bar{S}	termo fonte médio
$S_i^E(n)$	espectro de velocidade euleriana (m^2/s)
SF_6	hexafluoreto de enxofre
t	variável temporal (s)
t'	tempo após transformação de Galileu (s)
t_0	tempo inicial (s)
T	constante de tempo (s)
u	velocidade instantânea do vento na direção x (m/s)
\bar{u}	componente do vento médio orientado na direção x (m/s)
u'	componente turbulenta do vento na direção x (m/s)
u_*	velocidade de fricção na superfície (m/s)
U_1	velocidade do vento avaliada na altura z_1 (m/s)
U_*	escala de velocidade na camada limite (m/s)
$\overline{u'c'}$	fluxo turbulento do contaminante na direção longitudinal (g/sm^2)
v	velocidade instantânea do vento na direção y (m/s)
\bar{v}	componente do vento médio orientado na direção y (m/s)
v'	componente turbulenta do vento na direção y (m/s)
V_d	velocidade de deposição (m/s)
$\overline{v'c'}$	fluxo turbulento do contaminante na direção lateral (g/sm^2)

w	velocidade instantânea do vento na direção z (m/s)
\bar{w}	componente do vento médio orientado na direção z (m/s)
w'	componente turbulenta do vento na direção z (m/s)
w_*	escala de velocidade convectiva (m/s)
$\overline{w'c'}$	fluxo turbulento do contaminante na direção vertical (g/sm^2)
$(\overline{w\theta})_0$	fluxo de energia na forma de calor na superfície (m/s)
x	distância longitudinal da fonte (m)
x'	coordenada após transformação de Galileu (m)
x_0	coordenada no eixo x onde se encontra a fonte (m)
X	distância adimensional da fonte
y	distância lateral da fonte (m)
y'	coordenada após transformação de Galileu (m)
y_0	coordenada no eixo y onde se encontra a fonte (m)
z	altura acima da superfície (m)
z_b	altura que determina perfil de velocidade (m)
z_i	altura da camada limite convectiva (m)
$z_{i,e}$	altura da camada limite estável (m)
z_t	altura predeterminada (m)
z'	coordenada após transformação de Galileu (m)
z_0	comprimento de rugosidade (m)
z_1	altura de na qual K_1 e U_1 são avaliados (m)
ZnS	sulfeto de zinco

2. Caracteres Gregos

α	indica as direções x , y e z
α_z	vale 0 ou 1 de acordo com a altura da camada limite z_i
α_1	constante igual a 1,5
α_2	constante igual a 1,0
β_i	razão das escalas de tempo integrais Lagrangeana e Euleriana
β_z	vale 0 ou 1 de acordo com a altura da camada limite z_i
δ	funcional delta de Dirac
ΔK_z	flutuações estocásticas acrescidas em K_z (m^2/s)
$\Delta \bar{u}$	flutuações estocásticas acrescidas em \bar{u} (m/s)
Δz_0	flutuações estocásticas acrescidas em z_0 (m)
η	variável de apoio
Θ	temperatura potencial média
Λ	comprimento de Obukhov local (m)
μ	média da distribuição normal
σ	desvio padrão da distribuição normal
σ_i	desvio padrão da componente da velocidade turbulenta generalizado (m/s)
σ_o	desvio padrão observado
σ_p	desvio padrão predito
σ_x	parâmetro de dispersão longitudinal (m)
σ_y	parâmetro de dispersão lateral (m)
σ_z	parâmetro de dispersão vertical (m)
σ_α	parâmetro de dispersão generalizado (m)
τ	variável temporal (s)
Φ_i	função de similaridade local
Φ_u	função de similaridade local para $i = u$
Φ_v	função de similaridade local para $i = v$
Φ_w	função de similaridade local para $i = w$
Ψ_m	função de estabilidade
ω_c	parâmetro de reflexividade na camada limite atmosférica

ω_s parâmetro de reflexividade no solo

ÍNDICE DE FIGURAS

3.1	Divisão da troposfera [Stull, 1988].	9
3.2	Evolução diária da camada limite atmosférica [Stull, 1988].	12
4.1	Concentração (g/m^3) para $t = 2s$ observada no eixo x	28
4.2	Concentração (g/m^3) para $t = 5s$ observada no eixo x	28
4.3	Concentração (g/m^3) para $t = 2s$ observada no eixo y	29
4.4	Concentração (g/m^3) para $t = 5s$ observada no eixo y	29
5.1	Esquema simples para representar graficamente a reflexão no solo ($z = 0$) [Zannetti, 1990].	34
6.1	Perfil do coeficiente de difusão vertical K_z para o experimento de Hanford 01.	40
7.1	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) para o caso transiente.	44
7.2	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) para o caso estacionário.	44
7.3	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,01% em \bar{u}	45
7.4	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,025% em \bar{u}	45
7.5	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,05% em \bar{u}	46
7.6	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,075% em \bar{u}	46
7.7	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,01% em \bar{u} para o caso transiente.	47
7.8	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,075% em \bar{u} para o caso transiente.	47
7.9	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,3% em \bar{u}	48
7.10	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 1,0% em \bar{u}	48
7.11	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 5,0% em \bar{u}	49
7.12	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em \bar{u}	49

7.13	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,3% em \bar{u} para o caso estacionário.....	50
7.14	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 10,0% em \bar{u} para o caso estacionário.....	50
7.15	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,05% em z_0	51
7.16	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,1% em z_0	51
7.17	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,25% em z_0	52
7.18	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,35% em z_0	52
7.19	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,05% em z_0 para o caso transiente.....	53
7.20	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,35% em z_0 para o caso transiente.....	53
7.21	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 2,0% em z_0	54
7.22	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 5,0% em z_0	54
7.23	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em z_0	55
7.24	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 30,0% em z_0	55
7.25	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 2,0% em z_0 para o caso estacionário.	56
7.26	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 30,0% em z_0 para o caso estacionário.	56
7.27	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em K_z	57
7.28	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 30,0% em K_z	57
7.29	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 50,0% em K_z	58
7.30	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 75,0% em K_z	58
7.31	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 10,0% em K_z para o caso transiente.	59
7.32	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 75,0% em K_z para o caso transiente.	59
7.33	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 5,0% em K_z	60
7.34	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em K_z	60
7.35	Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 30,0% em K_z	61

7.36	Isolinhas da concentração ($10^{-4} sm^{-3}$) com flutuação de 50,0% em K_z	61
7.37	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 5,0% em K_z para o caso estacionário.	62
7.38	Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 50,0% em K_z para o caso estacionário.	62
7.39	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p sem reflexão e com uma reflexão completa.	64
7.40	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 42 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,005$	65
7.41	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 28 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,01$	66
7.42	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 42 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,005$	67
7.43	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 28 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,01$	68
7.44	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 28 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,2$ e $\omega_c = 0,01$	69

ÍNDICE DE TABELAS

6.1	Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford [Doran e Horst, 1985], [Doran et al., 1984].....	37
7.1	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 1,0$ e $\omega_c = 1,0$ (reflexão completa).	64
7.2	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,005$	65
7.3	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,01$	66
7.4	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,005$	67
7.5	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,01$	68
7.6	Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,2$ e $\omega_c = 0,01$	69

1. INTRODUÇÃO

A qualidade do ar de uma região é influenciada diretamente pelos níveis de poluição atmosférica, os quais estão vinculados a um complexo sistema de fontes emissoras estacionárias (indústrias, queima de lixo, emissões naturais, etc.) e móveis (veículos automotores, aviões, trens, etc.). Essa é elemento essencial para a qualidade de vida da população e do meio ambiente.

Um poluente pode ser definido como qualquer substância que esteja no ar em concentrações altas o suficiente para produzirem efeitos mensuráveis e danosos em seres humanos, animais, plantas ou materiais. Pode ser tanto de origem antropogênica, quanto proveniente de emissões naturais devido à decomposição microbiana ou de erupções vulcânicas.

A análise da dispersão de poluentes através de experimentos e simulações tornou-se relevante no âmbito de estabelecer regulamentações e normas para fontes poluentes em consequência do desenvolvimento industrial. Ademais, a qualidade do ar, especialmente na região da atmosfera onde os seres vivos se encontram, é fortemente relacionada à questão da saúde. Enquanto experimentos podem ser conduzidos pontualmente e para regiões limitadas, abordagens de natureza teórica permitem descrever campos de concentrações inteiros e a sua evolução.

Os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes são numerosos e tão complexos que não é possível descrevê-los sem um modelo matemático adequado. Assim, os modelos são instrumentos técnicos indispensáveis para a gestão ambiental. Atualmente, o fenômeno da difusão turbulenta na atmosfera não é formulado unicamente, no sentido de que não existe um modelo único que explique todos os fenômenos observados.

Para estimar o campo de concentração de poluentes, geralmente, faz-se uso da equação de advecção-difusão, que é obtida através da parametrização de fluxos turbulentos na equação da continuidade. A equação de advecção-difusão apresenta o problema de fechamento da turbulência, que pode ser solucionado com a teoria K, a qual é baseada na hipótese de transporte por gradiente, onde assume-se que os fluxos turbulentos de concen-

tração são proporcionais à magnitude do gradiente de concentração média. Esta teoria é a mais utilizada para o problema de fechamento, embora tenha suas limitações.

Os modelos podem se tornar intratáveis sob o ponto de vista formal e inacessíveis sob o ponto de vista fenomenológico, de modo que existe a necessidade em apresentar idealizações para viabilizar a descrição quantitativa da dispersão de poluentes na camada limite atmosférica. Uma das simplificações provém da questão de adotar um modelo estocástico com as distribuições associadas, em geral desconhecidas, ou um modelo determinístico, que apenas é capaz de gerar valores médios das concentrações enquanto os demais momentos estatísticos relevantes precisariam de sua própria equação constituinte.

Neste sentido, esta dissertação tem por objetivo analisar a influência de uma componente estocástica na estabilidade da solução. Evidentemente, surge a questão: Qual a distribuição mais adequada para introduzir estocasticidade no modelo determinístico? Porém, o presente estudo é considerado um passo inicial numa direção de, futuramente, enriquecer modelos determinísticos com características estocásticas, de forma que aspectos pertinentes não serão tratados neste trabalho, mas serão tópicos de projetos futuros.

Na discussão apresentada nesta dissertação, é analisada a influência da variação na velocidade do vento, no parâmetro de rugosidade e no coeficiente de difusão turbulenta para dispersão de poluentes oriunda de uma fonte contínua. Deste modo, serão apresentadas comparações entre as soluções dos modelos determinísticos com os alterados por uma componente estocástica. Os valores da intensidade estocástica são escolhidos de forma a manter, essencialmente, o formato da distribuição obtido pelo modelo determinístico, visto que este expressou concordância em comparação a alguns dados experimentais.

Introduzir elementos estocásticos no modelo implica, ao menos na dimensão vertical, à revisão dos contornos tipicamente empregados nos modelos. Muitas abordagens consideram a região entre o solo e o topo da camada limite como confinada, no entanto, dependendo do poluente em consideração, isto pode não ser uma simplificação adequada para o problema. Todavia, o fato de introduzir elementos estocásticos provoca um conflito nos contornos determinísticos e, conseqüentemente, estes precisam de modificações, onde considera-se uma permeabilidade parcial implementada por um “coeficiente de reflexão” nas extremidades da distribuição que ultrapassam o domínio de interesse, e representam um ingrediente simples no modelo. Este coeficiente de reflexão não tem interpretação física direta, mas descreve

uma parametrização para a probabilidade com que a substância volta para o domínio, ou seja, não escapa para alturas além do topo da camada limite ou não penetra no solo. Por esta razão, como segundo aspecto desta dissertação, a influência da reflexividade no solo e na camada limite serão consideradas, e também o seu efeito na dispersão de poluentes. Estes resultados são comparados com os dados do experimento de Hanford.

Para esta finalidade, esta dissertação encontra-se estruturada em 8 capítulos. No Capítulo 2 apresenta-se uma breve revisão bibliográfica sobre as soluções da equação de advecção-difusão encontradas na literatura competente. Explica-se no Capítulo 3 a micrometeorologia da camada limite atmosférica. Já no Capítulo 4 são descritos os modelos determinísticos e estocásticos, Eulerianos e Lagrangeanos, e de *puff* e pluma gaussiana. Assim como apresenta-se a dedução da equação de advecção-difusão e sua solução com condição inicial instantânea e “condição inicial contínua”.

No Capítulo 5 são apresentados os modelos estocásticos utilizados no decorrer da pesquisa. Os dados do experimento utilizado para validar os resultados, assim como a parametrização da turbulência e o perfil do vento encontram-se no Capítulo 6. Os resultados numéricos e estatísticos obtidos com o modelo situam-se no Capítulo 7. Por fim, no Capítulo 8 apresenta-se a conclusão e perspectivas para trabalhos futuros.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Existem diversas soluções da equação de advecção-difusão que podem ser encontradas na literatura especializada. Estas são, essencialmente, separadas em soluções numéricas e analíticas. Nas soluções numéricas ([Nieuwstadt e Van Ulden, 1978], [Lamb, 1978], [Carvalho, 1996]), porém, existem características que não podem ser observadas, pois alguns parâmetros não aparecem explicitamente na solução. Desta forma, apresenta-se neste capítulo uma revisão bibliográfica sobre as soluções analíticas da equação de advecção-difusão aplicadas à dispersão de poluentes encontradas na literatura.

A primeira solução da equação de advecção-difusão é a solução gaussiana, onde o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura e, usualmente, são consideradas as seguintes condições de contorno:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0 \quad \text{e} \quad z \longrightarrow \infty, \quad (2.1)$$

que correspondem ao fluxo nulo de poluentes na parte superior e inferior da camada limite atmosférica*.

Em 1923, Roberts [Roberts, 1923] apresentou uma solução bidimensional para fontes ao nível do solo, nos casos em que a velocidade do vento \bar{u} (m/s) e o coeficiente de difusão vertical K_z (m^2/s) seguem leis de potência como uma função da altura, ou seja,

$$\bar{u} = U_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \quad \text{e} \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^p \quad (2.2)$$

sendo z_1 (m) a altura na qual U_1 (m/s) e K_1 (m^2/s) são avaliados, m está relacionado com a instabilidade atmosférica e p com a rugosidade da superfície, ambos variam entre 0 e 1 [Irwin, 1979b].

Em 1955, Rounds [Rounds, 1955] obteve uma solução bidimensional válida para fontes elevadas com o mesmo perfil de vento acima, mas somente com perfis lineares de K_z .

*Maiores detalhes no Capítulo 3.

Já em 1957, Smith [Smith, 1957b] resolveu a equação bidimensional de transporte e difusão, sendo \bar{u} e K_z funções de potência da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt (1- expoente de K_z). No mesmo ano, Smith [Smith, 1957a] também apresentou uma solução para o caso de \bar{u} constante, mas com o seguinte K_z

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

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

Uma solução amplamente utilizada no Reino Unido para o transporte em longa escala de poluentes e utilizada na Europa para o transporte e deposição de contaminantes, foi apresentada por Scriven e Fisher [Scriven e Fisher, 1975], onde \bar{u} é considerado constante e K_z é

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

onde z_t (m) é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada superficial[†]). Esta solução permite (como condições de contorno) um fluxo líquido de material para o solo

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = V_d \bar{c} \quad \text{em} \quad z = 0, \quad (2.5)$$

onde V_d é a velocidade de deposição (m/s).

Em 1975, Yeh e Huang [Yeh e Huang, 1975] e Berlyand [Berlyand, 1975] apresentaram soluções para um problema bidimensional de fonte elevada com \bar{u} e K_z seguindo perfis de potência, com condição de contorno superior $K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$. Estas soluções foram obtidas em termos de funções de Green. Demuth, em 1978, [Demuth, 1978] apresentou uma solução, dada em termos de funções de Bessel, considerando uma camada verticalmente limitada ($K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ em $z = z_i$). Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de Yeh e Huang, Berlyand e Demuth têm sido adotados: KAPPAG [Tirabassi et al., 1986], KAPPAG-LT [Tirabassi et al., 1989], CISP [Tirabassi e Rizza, 1992] e MAOC [Tirabassi e Rizza, 1993]. Recentemente, Lin e Hildemann [Lin e Hildemann, 1997] estenderam as soluções de Yeh e Huang e Berlyand para o caso de deposição seca no solo. Estas soluções foram formuladas

[†]Maiores detalhes no Capítulo 3.

em termos de funções modificadas de Bessel.

No artigo de Van Ulden [Van Ulden, 1978] foi utilizada a teoria da similaridade de Monin-Obukhov para encontrar uma solução para a difusão vertical a partir de fontes contínuas próximas ao solo, supondo que \bar{u} e K_z seguem os perfis de similaridade. Seus resultados são similares aos de Roberts, porém ele obteve um modelo para fontes não superficiais, todavia aplicável para fontes dentro da camada superficial. Um modelo que utiliza esta solução é o SPM [Tirabassi e Rizza, 1995].

Em 1980, Nieuwstadt [Nieuwstadt, 1980] apresentou uma solução para um problema unidimensional dependente do tempo, 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 e u_* é a velocidade de fricção (m/s). Esta solução foi um caso particular da solução de Smith [Smith, 1957a]. Após um ano, Nieuwstadt e Haan [Nieuwstadt e Haan, 1981] utilizaram os polinômios de Jacobi para estender a solução para o caso de crescimento da altura da camada limite.

Koch [Koch, 1989] desenvolveu uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, na qual o vento e as difusividades seguem os perfis de potência, incluindo os efeitos de absorção de contaminante pelo solo.

Chrysikopoulos et al., em 1992, [Chrysikopoulos et al., 1992] apresentaram uma solução tridimensional para uma fonte aérea contínua ao nível do solo, com \bar{u} e K_z dados pela equação (2.2), incluindo um termo para deposição seca.

Em 1992, Van Ulden [Van Ulden, 1992] propôs uma solução aproximada para a dispersão de poluentes de contaminantes passivos liberados por uma fonte instantânea próxima ao solo, descrevendo o campo de concentração como uma soma de *puffs*. Tirabassi e Rizza [Tirabassi e Rizza, 1995] utilizaram esta solução no modelo chamado SPM - *Skewed Puff Model*. Em 1997, os mesmos autores desenvolveram um modelo *puff* não-gaussiano utilizando a expansão de Gram-Charlier para o campo de concentração e o sistema finito de equações para os momentos correspondentes [Tirabassi e Rizza, 1997]. Com base nesta metodologia, Scire et al. [Scire et al., 2000] apresentaram um modelo para aplicações sobre terreno complexo com turbulência não-homogênea, o qual foi denominado CALPUFF -

California Puff Model, que tem sido acoplado a modelos atmosféricos.

Sharan et al. [Sharan et al., 1996a], [Sharan et al., 1996b] desenvolveram modelos matemáticos para a dispersão tridimensional atmosférica. Foram utilizados coeficientes de difusão constantes e parametrizações em termos da distância da fonte, respectivamente. As soluções são apresentadas em termos de funções de Bessel e combinações lineares da função de Green.

Sharan e Yadav [Sharan e Yadav, 1998] descreveram o processo de dispersão em condições de ventos fracos utilizando coeficientes de difusão como função linear da distância da fonte. O modelo de Cirillo e Poli [Cirillo e Poli, 1992] forneceu resultados idênticos comparados com os dados do experimento de INEL (*Idaho National Engineering Laboratory*) [Sagendorf e Dickson, 1974]. Neste artigo, os autores comparam quatro modelos diferentes, sendo que o modelo de superposição de *puffs*[‡], o mesmo utilizado na presente dissertação, forneceu os melhores resultados.

Moura et al. [Moura et al., 1995] propuseram uma solução analítica para a equação unidimensional dependente do tempo, para a dispersão de contaminantes passivos em uma camada limite estável[§]. Para a obtenção dos resultados, foi aplicada a transformada de Laplace e foi utilizado um coeficiente de difusão K_z constante dado por Degrazia e Moraes [Degrazia e Moraes, 1992]. Adiante, Pires [Pires, 1996] apresentou uma solução similar para uma camada limite convectiva[¶], utilizando o coeficiente difusivo de Degrazia et al. [Degrazia et al., 1995]. Moreira [Moreira, 1996] foi além, propondo a solução para o caso bidimensional estacionário usando o mesmo artifício dos trabalhos anteriores também na camada limite convectiva. A técnica utilizada recebe o nome de ADMM - *Advection Diffusion Multilayer Method*. Esta tem sido amplamente utilizada para simular a dispersão de poluentes na atmosfera [Vilhena et al., 1998], [Degrazia et al., 2001], [Moreira et al., 2004], [Moreira et al., 2005a], [Moreira et al., 2005b], [Moreira et al., 2005c], [Buligon, 2004], [Buligon et al., 2006], [Ferreira Neto, 2003], [Costa, 2004] e [Costa et al., 2004].

Outras duas importantes técnicas na obtenção das soluções da equação de advecção-difusão são GITT - *Generalized Integral Transform Technique* e GILTT - *Generalized Integral Laplace Transform Technique* cujos trabalhos mais relevantes são: [Wortmann et al., 2005],

[‡]Maiores detalhes no Capítulo 4.

[§]Maiores detalhes no Capítulo 3.

[¶]Maiores detalhes no Capítulo 3.

[Moreira et al., 2006], [Buske et al., 2007a], [Buske et al., 2007b], [Tirabassi et al., 2008], [Buske et al., 2007c], [Tirabassi et al., 2009], [Moreira et al., 2009a], [Moreira et al., 2009b] e [Buske et al., 2010].

É possível observar que diversos métodos são aplicados para encontrar soluções analíticas da equação de advecção-difusão. Neste trabalho, porém, é de interesse particular a análise do comportamento da solução já existente, quando acrescidos momentos estocásticos em algumas variáveis da equação, e também reflexões do poluente na camada limite atmosférica e no solo.

Alguns trabalhos citados anteriormente discutem a deposição de poluentes no solo, porém, até o presente momento não existem produções que abordam os perfis de concentração no solo e acima dele, de modo que objetiva-se, com esta dissertação, obter uma nova contribuição na área.

3. MICROMETEOROLOGIA E DISPERSÃO DE POLUENTES

3.1 Camada limite atmosférica

As condições meteorológicas locais têm grande influência na concentração de poluentes em determinada região. É necessário o conhecimento dos fenômenos físicos que ocorrem na atmosfera para, então, avaliar a dispersão de poluentes na mesma.

Os 100 *km* da atmosfera mais próximos da Terra constituem a baixa atmosfera, também conhecida como homosfera. Ela é dividida em quatro partes e, em ordem de proximidade da Terra, são: troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera. No presente trabalho é de interesse fundamental a troposfera, pois é nela onde ocorrem os fenômenos físicos deste objeto de estudo.

A troposfera é a região da atmosfera que vai desde o solo até uma altitude de aproximadamente 11 *km*, e tem como característica apresentar uma diminuição da temperatura com a altura. Está dividida em duas partes (Figura 3.1), a *camada limite atmosférica*, que é a região a partir da superfície da Terra até cerca de 500 a 3000 *m* de altura, e *atmosfera livre*, que é o restante da troposfera. Na atmosfera livre o fluxo de ar não é turbulento, no entanto esta é influenciada pela camada limite atmosférica, que tem características predominantemente turbulentas.

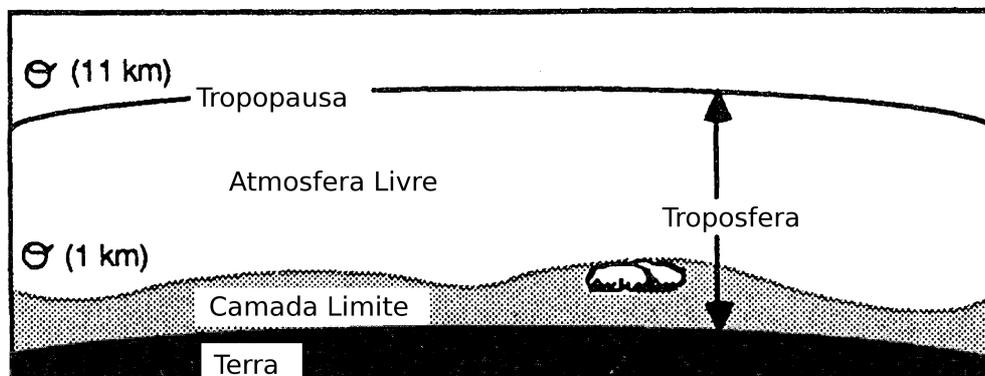


Figura 3.1: Divisão da troposfera [Stull, 1988].

A camada limite atmosférica é a região da troposfera que é influenciada diretamente pela presença da superfície da Terra e responde aos forçantes da superfície com uma escala de tempo de cerca de uma hora ou menos [Stull, 1988]. Nela, fluxos significativos de momentum, calor e matéria são transportados por movimentos turbulentos em uma escala da ordem da espessura da camada limite atmosférica, ou menor.

A temperatura varia significativamente durante o dia e entre o dia e a noite. Mudanças de temperatura são afetadas pelo calor específico do solo e do ar, e por processos de transferência de energia, tais como condução, radiação, turbulência mecânica, turbulência térmica e advecção. Alguns conceitos, válidos apenas para a teoria de camada limite atmosférica, caracterizam o comportamento nesta camada com o seu escoamento, e são listados a seguir.

- Calor específico é a energia necessária para aumentar 1°C da temperatura de 1 g de uma dada substância, sendo que cada substância tem seu próprio calor específico;
- Condução é a transferência de energia de uma molécula para outra em um meio (o condutor);
- Radiação é a transferência de energia por ondas eletromagnéticas, não sendo necessário um meio condutor;
- Convecção é o movimento predominantemente vertical que resulta no transporte e mistura de propriedades atmosféricas;
- Turbulência mecânica é a turbulência que se forma quando o vento passa por objetos salientes de uma superfície, produzindo vórtices, ou seja, turbulência gerada por vento cisalhante;
- Convecção forçada é o movimento vertical provocado por turbulência mecânica ou outros fatores mecânicos;
- Turbulência térmica é a turbulência que ocorre quando o Sol aquece o solo de forma desigual, formando termas;
- Convecção livre é o movimento vertical provocado por empuxo ou turbulência térmica;

- Advecção é a propagação horizontal do vento médio, e é responsável pela transferência de energia em pequenas e grandes escalas.

Os efeitos dinâmicos e térmicos descritos acima, juntamente com as características da superfície terrestre local e a época do ano, determinam a espessura da camada limite atmosférica. Nesta camada, o transporte é dominado pela advecção e pela turbulência. A turbulência é constituída de vários turbilhões que se sobrepõem, cujos tamanhos são variáveis (da ordem de 1 *mm* a 3000 *m* de diâmetro). A soma de todos estes turbilhões constitui o espectro de energia turbulenta.

Nas regiões de alta pressão, a camada limite atmosférica tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia. Normalmente, em um período de 24 horas, a camada limite atmosférica pode ser classificada quanto aos seus regimes de estabilidade como: camada limite convectiva, camada limite residual e camada limite estável.

3.2 Regimes de estabilidade

3.2.1 Camada limite convectiva

A camada limite convectiva é a camada que começa a ser formada após o nascer do sol. O aquecimento da superfície da Terra forma massas de ar quente que se elevam, modificando o topo da camada limite atmosférica. Essa estrutura convectiva dura o dia todo e cessa ao pôr do sol, quando o fluxo de calor torna-se negativo. No meio da tarde, a camada limite convectiva pode atingir a altura de 1000 a 2000 *m*. É possível definir camada limite convectiva como a região da baixa atmosfera que se estende do solo ($z = 0$) até a altura onde ocorre fluxo de calor negativo ($z = z_i$, onde z_i é a altura do topo da camada limite convectiva), ou seja, até a base de uma inversão térmica. A camada limite convectiva é caracterizada por uma forte mistura vertical gerada pelo fluxo de calor turbulento positivo, devido ao aquecimento solar da superfície.

A concentração de poluentes pode aumentar significativamente na camada limite convectiva, pois suas fontes geralmente estão próximas da superfície, além de serem transportados pelos turbilhões e massas que alcançam alturas cada vez maiores no decorrer do dia.

A camada limite convectiva é dividida em três camadas de acordo com o compor-

tamento da turbulência, da velocidade do vento e das escalas de temperatura, esta divisão pode ser observada na Figura 3.2.

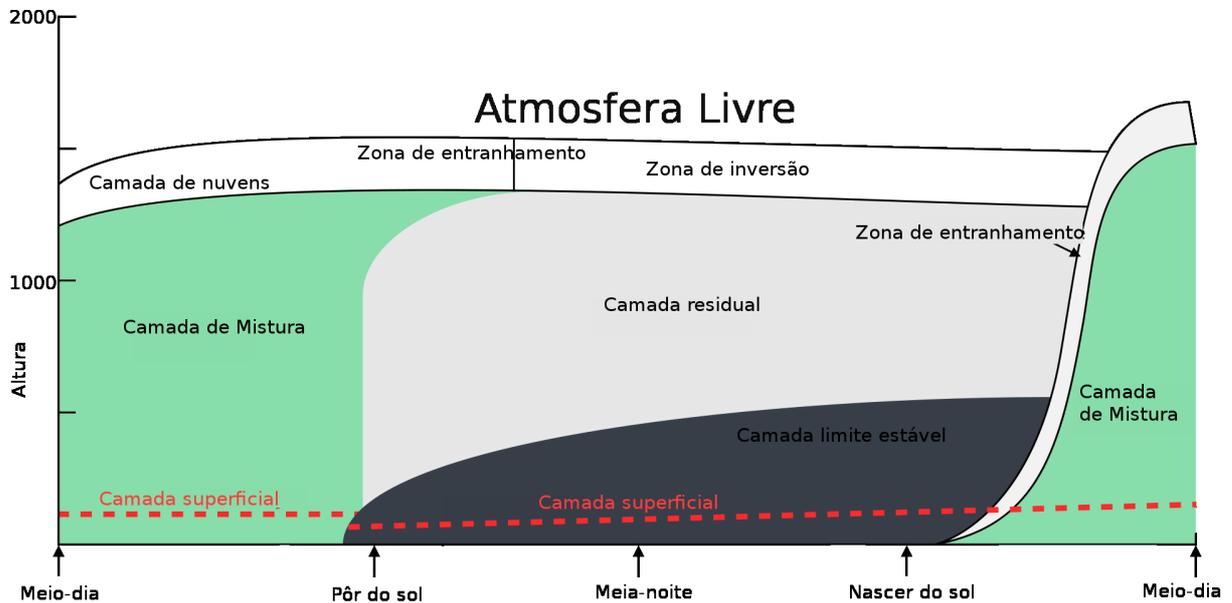


Figura 3.2: Evolução diária da camada limite atmosférica [Stull, 1988].

Camada superficial

A camada superficial é uma região de vento forte cisalhante que compreende os 10% inferiores da camada limite atmosférica. Dado que a espessura da camada limite atmosférica varia de 500 a 3000 m , a camada superficial tem cerca de 50 a 300 m de espessura. O perfil de temperatura na camada superficial é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura durante o dia, e por um aumento da temperatura com a altura durante a noite (inversão térmica). O fluxo de calor turbulento é aproximadamente constante e há grandes gradientes de temperatura e velocidade.

Na camada superficial predomina a turbulência mecânica e a mesma está restrita a alturas menores do que $z \leq |L|$, onde L é a altura limite vertical na qual os efeitos mecânicos não podem ser ignorados, também conhecido por comprimento de Obukhov (m),

que é expresso por:

$$L = -\frac{u_*^3}{k\frac{g}{\Theta}(\overline{w\theta})_0}, \quad (3.1)$$

onde u_* é a velocidade de fricção da superfície, k é a constante de von Kármán, g é a aceleração da gravidade (m/s^2), Θ é a temperatura potencial média e $(\overline{w\theta})_0$ é o fluxo de energia na forma de calor na superfície (m/s).

De acordo com Panofsky e Dutton [Panofsky e Dutton, 1984], quando os valores de $|L|$ estão entre 10 e 100 m e, portanto, $z_i/|L| \geq 10$, a camada limite convectiva é considerada bem desenvolvida. Esta razão pode ser considerada um *parâmetro de estabilidade*, pois expressa a importância da turbulência convectiva (fluxo de calor) em relação a turbulência mecânica (cisalhamento do vento). É possível, ainda, classificar a convecção como fraca, moderada ou alta, através da seguinte razão

- Convecção fraca: $\frac{z_i}{|L|} \leq 5$;
- Convecção moderada: $5 \leq \frac{z_i}{|L|} \leq 10$;
- Convecção alta: $\frac{z_i}{|L|} \geq 10$.

Camada de mistura

A camada de mistura é a região central da camada limite convectiva, localizada logo acima da camada superficial, e compreende a região entre $|L| < z < z_i$. Na camada de mistura os perfis verticais de velocidade de vento e temperatura são aproximadamente constantes em toda a camada, consequência da forte mistura produzida pela convecção. Devido a esta mistura, a turbulência nesta região pode ser considerada quase homogênea e insensível a z e a u_* . Logo, os parâmetros mais importantes para a descrição desta camada são z_i e a escala de velocidade convectiva w_* (m/s), que é expressa por

$$w_* = \left[\frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0 z_i \right]^{1/3}. \quad (3.2)$$

A escala de tempo convectiva z_i/w_* é da ordem de 10 a 20 minutos, este é um típico período de tempo para o ar circular entre a superfície e o topo da camada de mistura. As dimensões dos grandes turbilhões convectivos são expressas em função de z_i , e as velocidades

turbulentas são proporcionais a w_* . Valores típicos de z_i e w_* são, respectivamente, 1000 a 2000 m e 2 m/s [Weil e Brower, 1984].

Zona de entranhamento

Região de ar estável no topo da camada de mistura, onde existe entranhamento de ar da atmosfera livre para baixo e penetração convectiva das plumas térmicas* para cima. Nesta zona, a estrutura da turbulência pode ser dominada por efeitos de entranhamento, pelas características da camada de inversão e pela atmosfera estável acima.

3.2.2 Camada limite residual

A camada limite residual é formada por volta de meia hora antes do pôr do sol, quando as circulações convectivas (termas) cessam, permitindo que a turbulência decaia. A camada limite residual não permanece em contato com o solo, mas tem sua base modificada pelo avanço da camada limite estável, que surge durante a noite. A camada resultante é neutramente estratificada e a turbulência existente apresenta intensidade praticamente igual em todas as direções, com taxas de dispersão iguais tanto na horizontal quanto na vertical.

3.2.3 Camada limite estável

A camada limite estável é formada à noite, em decorrência do resfriamento da superfície terrestre, que provoca um fluxo de calor negativo e extrai energia cinética dos grandes turbilhões, permitindo que somente pequenos turbilhões sobrevivam. Logo, a turbulência na camada limite estável é menos intensa que na camada limite convectiva, e conseqüentemente, poluentes emitidos na camada limite estável se dispersam lentamente na vertical e mais rapidamente na horizontal (efeito dos ventos). A camada limite estável alcança alturas entre 100 e 300 m e é formada por pequenos turbilhões que agem localmente.

3.2.4 A estrutura da turbulência na camada limite convectiva

Na camada limite convectiva, o aquecimento solar da superfície terrestre gera fluxo de calor sensível turbulento, que dá origem a uma estrutura de plumas térmicas circundadas

*Ar quente que se eleva até a base de uma inversão térmica.

por ar mais frio, que desce do topo das nuvens em direção ao solo. Para condições suficientemente instáveis, estas estruturas são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional.

A área da camada limite convectiva é ocupada por, aproximadamente, 40% de corrente térmica de ar ascendente (*updrafts*) e 60% por ar mais frio que desce (*downdrafts*). Pela lei de conservação de massa, o ar quente subindo tem uma velocidade maior que o ar frio que desce. A circulação convectiva, incluindo o *downdraft* e o *updraft*, tem escalas horizontais de $1,5z_i$ [Caughey e Palmer, 1979]. Velocidades verticais em termos podem alcançar 5 m/s ou mais, embora *updrafts* de 1 a 2 m/s sejam os mais comuns.

4. MODELO PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

4.1 Modelos determinísticos e estocásticos

Os modelos matemáticos que descrevem os fenômenos físicos podem ser determinísticos ou estocásticos. Aqueles que não contêm nenhuma variável aleatória são classificados como determinísticos, ou seja, a solução pode ser calculada de forma exata desde que se tenha conhecimento dos dados do problema e suas condições iniciais. Em geral, um sistema determinístico é modelado analiticamente.

Os modelos estocásticos contêm variáveis que são descritas por termos aleatórios, o que impossibilita o cálculo exato da solução, pois cada evento gera resultados diferentes, também considerados aleatórios. Na modelagem de dispersão de poluentes na atmosfera este modelo é aceito como mais próximo da realidade, pois os termos aleatórios podem ser considerados como uma descrição das flutuações, que estão presentes no fenômeno físico e não podem ser descritas pelo modelo determinístico, que descreve meramente um valor médio.

O presente trabalho, inicialmente, utilizará um modelo determinístico na descrição do fenômeno físico. Após, serão introduzidos termos aleatórios na equação determinística, como uma tentativa de representar o fenômeno de maneira mais realista.

4.2 Descrições Euleriana e Lagrangeana

As principais abordagens na análise do fenômeno de dispersão são as descrições Euleriana e Lagrangeana. A diferença fundamental entre as duas classes de modelos é que o sistema de referência Euleriano é fixo (em relação à Terra) enquanto o sistema de referência Lagrangeano segue a velocidade instantânea do fluido.

A aproximação Euleriana tem como principal característica o fato de considerar o movimento do fluido relacionado a um sistema de referência fixo no espaço (como a Terra, por exemplo). Estes modelos são mais adaptados para problemas complexos, como a dispersão de

poluentes sobre topografia irregular ou a difusão de poluentes não-inertes. Eles são baseados na resolução, em uma grade espaço-temporal fixa, da equação da conservação da massa da espécie química expressa em termos da concentração [Zannetti, 1990], que poderá ser vista na Seção 4.4.

Os modelos Lagrangeanos descrevem o movimento de um conjunto de partículas que seguem passivamente no escoamento. Estas partículas são movidas seguindo o movimento turbulento, descrevendo trajetórias aleatórias. Para formalizar este comportamento, as velocidades das partículas estão sujeitas a um forçante aleatório seguindo uma distribuição característica. Por consequência disto, estes modelos são do tipo estocástico, ou seja, as grandezas físicas responsáveis pelo deslocamento das partículas são especificadas em termos probabilísticos. A partir da distribuição espacial das partículas em um certo instante de tempo é possível determinar a concentração do poluente emitido [Mello, 2010].

4.3 Modelos gaussianos

O modelo gaussiano clássico é o mais utilizado entre os modelos de dispersão de poluentes na atmosfera, pois pode ser aplicado em diversas condições (tais como fontes isoladas, cidades, tráfego veicular, topografia complexa, etc.) e pode ser modificado de modo a estender a sua aplicabilidade em condições não-estacionárias e não-homogêneas, sendo esta extensão a equação de advecção-difusão [Tirabassi, 2005].

Este modelo é baseado na solução exata da equação de advecção-difusão, quando a velocidade do vento e o coeficiente de difusão turbulenta são constantes com a altura, de forma que a solução é forçada a representar situações reais através de parâmetros empíricos, conhecidos como “sigmas”. Pode ser estacionário, conhecido como modelo pluma, ou transiente, denominado modelo *puff*. O nome do modelo advém do fato que a distribuição dos poluentes é descrita pela curva gaussiana, descoberta pelo astrônomo e matemático Carl Friedrich Gauss (1777-1855).

Cabe ressaltar que este modelo não incorpora efeitos da mudança de direção e intensidade do vento e considera a taxa de emissão de contaminante constante com o tempo. Além disso, baseia-se em parâmetros empíricos que podem variar conforme as características da região (por exemplo: topografia, rugosidade do solo, proximidade do mar, etc).

Por este motivo, será apresentada uma abordagem onde a velocidade do vento, o

coeficiente de difusão vertical e o comprimento de rugosidade terão efeitos de flutuação descritos por termos aleatórios, como uma tentativa de aproximar o modelo do fenômeno físico.

As variações dos modelos gaussianos se distinguem essencialmente pela técnica utilizada para o cálculo dos parâmetros de dispersão (sigmas) em função da estabilidade atmosférica e da distância da fonte emissora. Para isto, existem dois métodos principais, um deles utiliza classes de estabilidade atmosférica e funções semi-empíricas para cada classe; o outro faz uso de funções adimensionais construídas através de medidas disponíveis da intensidade da turbulência.

Existem diversos esquemas para o cálculo dos parâmetros de dispersão como função das classes de estabilidade e da distância da fonte. Algumas classificações de estabilidade baseadas em velocidade do vento, período do dia, insolação e/ou cobertura de nuvens foram propostas por Pasquill e Smith [Pasquill e Smith, 1983] e Irwin [Irwin, 1979a]. Zannetti [Zannetti, 1990] estabeleceu as classes utilizando medidas do desvio padrão da velocidade do vento, do gradiente vertical de temperatura e do número de Richardson. Enquanto Briggs [Briggs, 1973] propõe os parâmetros de dispersão baseados nas curvas de Pasquill [Pasquill, 1962].

No presente trabalho os parâmetros de dispersão e, conseqüentemente, os coeficientes de difusão turbulentos foram formulados a partir da teoria da difusão de Taylor [Taylor, 1922] e do espectro de energia cinética turbulenta, conforme será mostrado na Seção 6.2.

4.3.1 Modelo *puff* gaussiano

Os modelos *puff* foram desenvolvidos para simular o comportamento de emissões não-estacionárias em condições de dispersão não-homogêneas. Arya [Arya, 1999] propôs um modelo gaussiano para difusão de um *puff*, para um sistema de referência em movimento (modelo Lagrangeano), com sua origem localizada no centro do *puff*. A equação que formula este modelo é

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right), \quad (4.1)$$

onde σ_x , σ_y e σ_z são os parâmetros de dispersão (m) longitudinal, lateral e vertical, respectivamente, x e y são as distâncias (m) longitudinal e lateral da fonte, z é a altura vertical

acima do solo (m) e Q é a intensidade da fonte (g/s).

Para um sistema de referência com movimento relativo (Euleriano), podemos aplicar a transformação de Galileu entre as coordenadas (x, y, z, t) e (x', y', z', t') , com as velocidades relativas u, v e w (m/s) nas direções longitudinal, lateral e vertical, respectivamente, de forma que

$$x' = x - (x_0 + ut) \quad (4.2a)$$

$$y' = y - (y_0 + vt) \quad (4.2b)$$

$$z' = z - (H_s + wt) \quad (4.2c)$$

$$t' = t, \quad (4.2d)$$

onde x_0 e y_0 são as coordenadas no plano cartesiano da localização da fonte (m) e H_s é a altura da fonte (m). Logo, a equação para difusão de um *puff* é dada por

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{(x - x_0 - ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y - y_0 - vt)^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z - H_s - wt)^2}{2\sigma_z^2}\right). \quad (4.3)$$

4.3.2 Modelo de pluma gaussiana

Quando um contaminante é emitido por uma fonte pontual a uma taxa fixa, por um período de tempo finito, a difusão pode ser descrita por um modelo de fonte pontual contínua idealizado. Uma fonte contínua pode ser considerada como uma sequência de *puffs* instantâneos emitidos um após o outro em pequenos intervalos de tempo $d\tau$ [Arya, 1999]. Deste modo, a concentração total é dada pela superposição dos *puffs* emitidos, e é descrita como

$$\bar{C}(x, y, z, t) = \int_0^t \bar{c}(x, y, z, t - \tau) d\tau. \quad (4.4)$$

A solução mais conhecida da pluma gaussiana é dada por [Zannetti, 1990]

$$\bar{C}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z\bar{u}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H_s}{\sigma_z}\right)^2\right], \quad (4.5)$$

onde \bar{u} é a componente do vento médio horizontal (m/s). Nota-se que tal equação é estacionária, pois é independente do tempo. Pode ser obtida através da integração analítica da equação de advecção-difusão, sob algumas simplificações de condições homogêneas. Neste trabalho, para obtenção da pluma gaussiana é utilizada a hipótese de superposição de *puffs* utilizando a solução analítica da equação de advecção-difusão, conforme Seção 4.6.

4.4 O modelo físico-matemático

A difusão atmosférica é modelada pela equação da continuidade, também conhecida por equação de conservação de massa. Considere uma espécie genérica c que se conserva na atmosfera, então a equação da continuidade é dada por [Blackadar, 1997]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(uc)}{\partial x} + \frac{\partial(vc)}{\partial y} + \frac{\partial(wc)}{\partial z} = S, \quad (4.6)$$

onde S é o termo fonte e u, v e w são as componentes das velocidades instantâneas do vento (m/s) nas direções x ($-\infty < x < \infty$), y ($-\infty < y < \infty$) e z ($0 < z < z_i$), respectivamente. A componente de velocidade u depende somente da altura z , enquanto as componentes v e w não têm dependência em x, y ou z . Desta forma, podemos reescrever (4.6) como

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} + v\frac{\partial c}{\partial y} + w\frac{\partial c}{\partial z} = S. \quad (4.7)$$

Devido aos efeitos da turbulência, que é irregular e quase randômica, utiliza-se a decomposição de Reynolds para expressar as variáveis de interesse como a soma de suas médias de *ensemble* e flutuações, denotadas por uma barra superior e uma linha, respectivamente [Stull, 1988]. Desta forma,

$$c = \bar{c} + c' \quad (4.8a)$$

$$u = \bar{u} + u' \quad (4.8b)$$

$$v = \bar{v} + v' \quad (4.8c)$$

$$w = \bar{w} + w'. \quad (4.8d)$$

Substituindo as equações (4.8) em (4.7), obtém-se

$$\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial t} + (\bar{u} + u')\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial x} + (\bar{v} + v')\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial y} + (\bar{w} + w')\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial z} = S. \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u} + u')(\bar{c} + c')}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v} + v')(\bar{c} + c')}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{w} + w')(\bar{c} + c')}{\partial z} = S. \quad (4.10)$$

Operando a equação (4.10) e tomando sua média, obtemos

$$\frac{\partial(\overline{\bar{c} + c'})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\bar{u}c' + \bar{u}'c + u'\bar{c} + u'c'})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{\bar{v}c' + \bar{v}'c + v'\bar{c} + v'c'})}{\partial y} + \frac{\partial(\overline{\bar{w}c' + \bar{w}'c + w'\bar{c} + w'c'})}{\partial z} = \bar{S}. \quad (4.11)$$

De acordo com as propriedades das médias de Reynolds, sabemos que para duas variáveis quaisquer a e b , pode-se escrever

$$\overline{a + b} = \bar{a} + \bar{b} \quad (4.12a)$$

$$\overline{\bar{a}} = \bar{a} \quad (4.12b)$$

$$\overline{\bar{a}b} = \bar{a}\bar{b}, \quad (4.12c)$$

além disso, sabemos que $\bar{a}' = 0$, $\bar{b}' = 0$, porém $\overline{a'b'} \neq 0$ [Stull, 1988].

Então, considerando que $\bar{c}' = \bar{u}' = \bar{v}' = \bar{w}' = 0$, $\overline{u'c'} \neq 0$, $\overline{v'c'} \neq 0$ e $\overline{w'c'} \neq 0$, a equação (4.11) torna-se

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} = \bar{S}, \quad (4.13)$$

de forma que \bar{c} representa a concentração média do contaminante passivo (g/m^3); \bar{u} , \bar{v} e \bar{w} são, respectivamente, as componentes de vento médio (m/s) orientadas nas direções x , y e

z (m); e $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ correspondem aos fluxos turbulentos do contaminante (g/sm^2) nas direções longitudinal, latitudinal e vertical, respectivamente.

É possível observar que a equação (4.13) apresenta o problema de fechamento da turbulência, pois contém quatro variáveis desconhecidas ($\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$, $\overline{w'c'}$ e \bar{c}), de forma que não é possível resolvê-la sem alguma simplificação. Para solucionar este problema, utiliza-se a hipótese de transporte por gradiente, também conhecida por teoria K. Esta hipótese, em analogia com a lei de Fick da difusão molecular, assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média [Seinfeld e Pandis, 2006]. Logo,

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (4.14a)$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \quad (4.14b)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (4.14c)$$

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta (m^2/s) nas direções x , y e z , respectivamente. Tais coeficientes, no fechamento de primeira ordem, contêm toda a informação da complexidade da turbulência, por este motivo, é considerado um modelo determinístico.

A teoria K tem sido amplamente utilizada como base matemática para simular a dispersão de poluentes [Arya, 1999], porém só podemos aplicá-la quando a difusão do contaminante dispersado é muito maior que o tamanho dos turbilhões envolvidos no processo difusivo, ou seja, para grandes tempos de viagem [Mangia et al., 2002].

Substituindo as equações (4.14) na equação (4.13), obtém-se a equação de advecção-difusão com fechamento Fickiano para turbulência, para um sistema de coordenadas cartesianas, em que a direção x coincide com a direção do vento médio, que é dada por [Arya, 1999]

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \bar{S}. \quad (4.15)$$

Na equação (4.15), o primeiro termo do lado esquerdo é dependente do tempo e, portanto, contabiliza o estado não-estacionário. Os três termos restantes do lado esquerdo correspondem ao transporte por advecção. No lado direito, os três primeiros termos descrevem a difusão turbulenta, e o termo \bar{S} representa uma fonte.

4.5 O modelo com condição inicial instantânea

Neste trabalho, consideraremos os coeficientes de difusão K_x e K_y constantes, enquanto K_z varia seccionalmente com a altura, ou seja, a distância do solo até a altura desejada será dividida em diversas camadas e, em cada uma destas camadas, K_z será localmente constante. Portanto, a equação (4.15) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \bar{S}. \quad (4.16)$$

Considere, agora, uma fonte pontual de altura H_s , que libera instantaneamente um poluente a uma taxa de emissão constante Q (g/s) em um tempo $t = 0$ s. Desta forma, podemos descrever o termo fonte como uma condição inicial instantânea, e o problema é reescrito como

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2}, \quad (4.17a)$$

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = Q \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - H_s), \quad (4.17b)$$

onde x_0 e y_0 são as coordenadas da fonte no plano cartesiano e δ são os funcionais delta de Dirac.

Seinfeld e Pandis [Seinfeld e Pandis, 2006] propuseram uma solução analítica para a equação (4.17a) com condição inicial (4.17b). Considere $\bar{c}(x, y, z, t) = \bar{c}_x(x, t) \bar{c}_y(y, t) \bar{c}_z(z, t)$. Desta forma, a equação (4.17a) torna-se

$$\frac{\partial \bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}{\partial z^2}. \quad (4.18)$$

E portanto,

$$\begin{aligned} \bar{c}_y \bar{c}_z \frac{\partial \bar{c}_x}{\partial t} + \bar{c}_x \bar{c}_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial t} + \bar{c}_x \bar{c}_y \frac{\partial \bar{c}_z}{\partial t} + \bar{u} \bar{c}_y \bar{c}_z \frac{\partial \bar{c}_x}{\partial x} + \bar{v} \bar{c}_x \bar{c}_z \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial y} + \bar{w} \bar{c}_x \bar{c}_y \frac{\partial \bar{c}_z}{\partial z} \\ = K_x \bar{c}_y \bar{c}_z \frac{\partial^2 \bar{c}_x}{\partial x^2} + K_y \bar{c}_x \bar{c}_z \frac{\partial^2 \bar{c}_y}{\partial y^2} + K_z \bar{c}_x \bar{c}_y \frac{\partial^2 \bar{c}_z}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Ao multiplicar a equação (4.19) por $\frac{1}{\bar{c}_x \bar{c}_y \bar{c}_z}$, obtém-se a equação

$$\frac{1}{\bar{c}_x} \frac{\partial \bar{c}_x}{\partial t} + \frac{1}{\bar{c}_y} \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial t} + \frac{1}{\bar{c}_z} \frac{\partial \bar{c}_z}{\partial t} + \frac{\bar{u}}{\bar{c}_x} \frac{\bar{c}_x}{\partial x} + \frac{\bar{v}}{\bar{c}_y} \frac{\bar{c}_y}{\partial y} + \frac{\bar{w}}{\bar{c}_z} \frac{\bar{c}_z}{\partial z} = \frac{K_x}{\bar{c}_x} \frac{\partial^2 \bar{c}_x}{\partial x^2} + \frac{K_y}{\bar{c}_y} \frac{\partial^2 \bar{c}_y}{\partial y^2} + \frac{K_z}{\bar{c}_z} \frac{\partial^2 \bar{c}_z}{\partial z^2}, \quad (4.20)$$

e através do método de separação de variáveis [Özisk, 1974], pode ser separada em três equações, assim como a condição inicial (4.17b):

$$\frac{\partial \bar{c}_x}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_x}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_x}{\partial x^2} \quad (4.21a)$$

$$\frac{\partial \bar{c}_y}{\partial t} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}_y}{\partial y} = K_y \frac{\partial^2 \bar{c}_y}{\partial y^2} \quad (4.21b)$$

$$\frac{\partial \bar{c}_z}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}_z}{\partial z} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_z}{\partial z^2} \quad (4.21c)$$

$$\bar{c}_x(x, 0) = Q^{1/3} \delta(x - x_0) \quad (4.22a)$$

$$\bar{c}_y(y, 0) = Q^{1/3} \delta(y - y_0) \quad (4.22b)$$

$$\bar{c}_z(z, 0) = Q^{1/3} \delta(z - H_s). \quad (4.22c)$$

A intensidade da fonte Q não precisa, necessariamente, ser separada desta forma. Pode-se utilizar qualquer produto que resulte em Q , foi tomado $Q^{1/3}$ supondo um domínio físico isotrópico.

Cada uma dessas equações (4.22) pode ser resolvida pela transformada de Fourier e tem solução similar. Apesar de os limites na coordenada z não serem infinitos ($z \in [0, z_i]$),

pode-se tratar os limites infinitos como infinitas reflexões sucessivas, tanto no topo da camada limite atmosférica ($z = z_i$) quanto no solo ($z = 0$), desta forma, está justificado o uso da transformada de Fourier nesta coordenada e as reflexões serão mostradas na Seção 5.2.

A transformada de Fourier de $\bar{c}_x(x, t)$ é dada por

$$C(\alpha, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{c}_x(x, t) e^{-i\alpha x} dx. \quad (4.23)$$

Portanto, a transformada de Fourier da equação (4.21a) e de sua condição inicial (4.22a) são

$$\frac{\partial C}{\partial t} + i\alpha\bar{u}C = -\alpha^2 K_x C \quad (4.24a)$$

$$C(\alpha, 0) = \frac{Q^{1/3}}{(2\pi)^{1/2}} e^{-i\alpha x_0}. \quad (4.24b)$$

Resolvendo a equação diferencial ordinária (4.24a), obtemos

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -(\alpha^2 K_x + i\alpha\bar{u})C \quad (4.25)$$

$$C(\alpha, t) = D e^{-(\alpha^2 K_x + i\alpha\bar{u})t}, \quad (4.26)$$

onde D é a constante de integração. Utilizando a condição inicial (4.24b) em (4.26)

$$\frac{Q^{1/3}}{(2\pi)^{1/2}} e^{-i\alpha x_0} = D e^{-(\alpha^2 K_x + i\alpha\bar{u})0} \quad (4.27)$$

$$D = \frac{Q^{1/3}}{(2\pi)^{1/2}} e^{-i\alpha x_0}. \quad (4.28)$$

Logo, a solução do problema transformado é

$$C(\alpha, t) = \frac{Q^{1/3}}{(2\pi)^{1/2}} e^{-[\alpha^2 K_x t + i\alpha(x_0 + \bar{u}t)]}. \quad (4.29)$$

A transformada inversa de Fourier de $C(\alpha, x)$ é dada por

$$\bar{c}_x(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} C(\alpha, t) e^{i\alpha x} d\alpha. \quad (4.30)$$

Portanto, a transformada inversa da equação (4.29) é

$$\bar{c}_x(x, t) = \frac{Q^{1/3}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-[\alpha^2 K_x t - i\alpha(x-x_0-\bar{u}t)]} d\alpha. \quad (4.31)$$

E, completando o quadrado do expoente

$$\begin{aligned} & \alpha^2 K_x t - i\alpha(x-x_0-\bar{u}t) - \frac{(x-x_0-\bar{u}t)^2}{4K_x t} + \frac{(x-x_0-\bar{u}t)^2}{4K_x t} \\ &= \left(\alpha(K_x t)^{1/2} - \frac{i(x-x_0-\bar{u}t)}{2(K_x t)^{1/2}} \right)^2 + \frac{(x-x_0-\bar{u}t)^2}{4K_x t}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Tome $\eta = \alpha(K_x t)^{1/2} - \frac{i(x-x_0-\bar{u}t)}{2(K_x t)^{1/2}}$ e $d\eta = (K_x t)^{1/2} d\alpha$ [Seinfeld e Pandis, 2006]. Então,

$$\bar{c}_x(x, t) = \frac{Q^{1/3}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2} e^{\frac{-(x-x_0-\bar{u}t)^2}{4K_x t}} \frac{1}{(K_x t)^{1/2}} d\eta \quad (4.33)$$

$$\bar{c}_x(x, t) = \frac{Q^{1/3}}{2\pi} \frac{e^{\frac{-(x-x_0-\bar{u}t)^2}{4K_x t}}}{(K_x t)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\eta^2} d\eta. \quad (4.34)$$

É sabido que esta integral é igual a $\pi^{1/2}$, portanto, a solução da equação (4.21a) com sua condição inicial (4.22a) é

$$\bar{c}_x(x, t) = \frac{Q^{1/3}}{2(\pi K_x t)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(x-x_0-\bar{u}t)^2}{4K_x t} \right]. \quad (4.35)$$

Analogamente, pode-se obter as soluções das equações (4.21b) e (4.21c) com, respectivamente, suas condições iniciais (4.22b) e (4.22c), que são expressas por

$$\bar{c}_y(y, t) = \frac{Q^{1/3}}{2(\pi K_y t)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(y-y_0-\bar{v}t)^2}{4K_y t} \right] \quad (4.36)$$

$$\bar{c}_z(z, t) = \frac{Q^{1/3}}{2(\pi K_z t)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(z - H_s - \bar{w}t)^2}{4K_z t} \right]. \quad (4.37)$$

E, a solução geral da equação (4.17a) com condição inicial (4.17b) é

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z t^3}} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - \bar{u}t)^2}{4K_x t} - \frac{(y - y_0 - \bar{v}t)^2}{4K_y t} - \frac{(z - H_s - \bar{w}t)^2}{4K_z t} \right]. \quad (4.38)$$

Pode-se observar que tal solução é gaussiana, pois as equações (4.38) e (4.3) são similares, de forma que os parâmetros de dispersão de (4.3) são expressos em (4.38) como $\sigma_x^2 = 2K_x t$, $\sigma_y^2 = 2K_y t$ e $\sigma_z^2 = 2K_z t$.

Como exemplo, considere os gráficos da concentração para o modelo com condição inicial instantânea geradas a partir da equação (4.38) para os tempos $t = 2 \text{ s}$ e $t = 5 \text{ s}$, e parâmetros $Q = 1 \text{ g/s}$, $\bar{u} = 1 \text{ m/s}$, $\bar{v} = \bar{w} = 0$, $K_x = K_y = K_z = 0,1 \text{ m}^2/\text{s}$, $x_0 = y_0 = 0$, $z = H_s = 50 \text{ m}$, $0 < x < 10 \text{ m}$ e $0 < y < 10 \text{ m}$. Comparando-se a Figura 4.1 com a Figura 4.2, pode-se notar que o centro da gaussiana no eixo x desloca-se de acordo com o tempo, pois, neste caso, a média da gaussiana em x é dada por $\mu_x = \bar{u}t$. Além disso, as propriedades da gaussiana determinam que a área abaixo da curva permanece sempre igual a 1, de forma que quando a concentração diminui com o tempo, a distância que ela alcança em x aumenta. Isto ocorre porque expressamos o parâmetro de dispersão como $\sigma_x^2 = 2K_x t$, que é dependente do tempo.

Fazendo-se a mesma análise comparativa entre a Figura 4.3 e a Figura 4.4, verifica-se que o centro da gaussiana nos dois casos localiza-se em $y = 0$, pois, neste caso, a média é $\mu_y = \bar{v}t = 0$. E, o mesmo efeito que ocorre no eixo x com o decréscimo da concentração, ocorre também no eixo y .

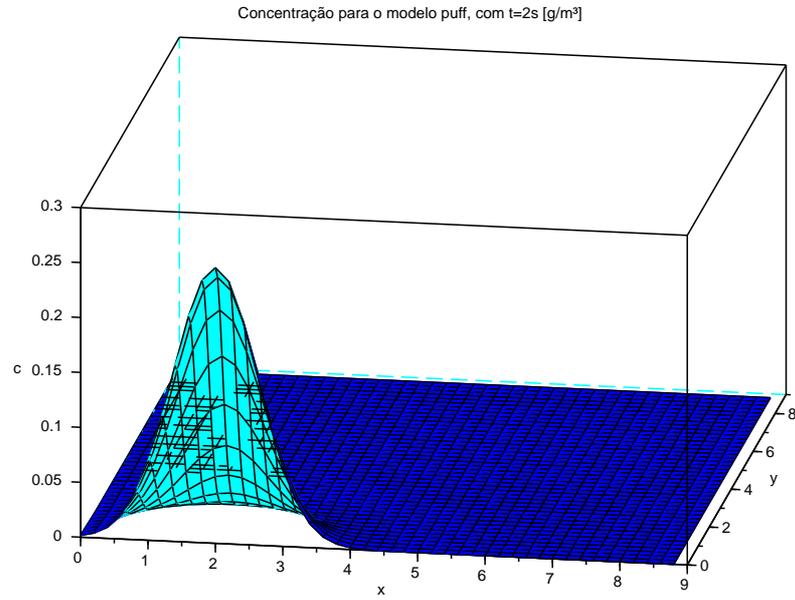


Figura 4.1: Concentração (g/m^3) para $t = 2s$ observada no eixo x .

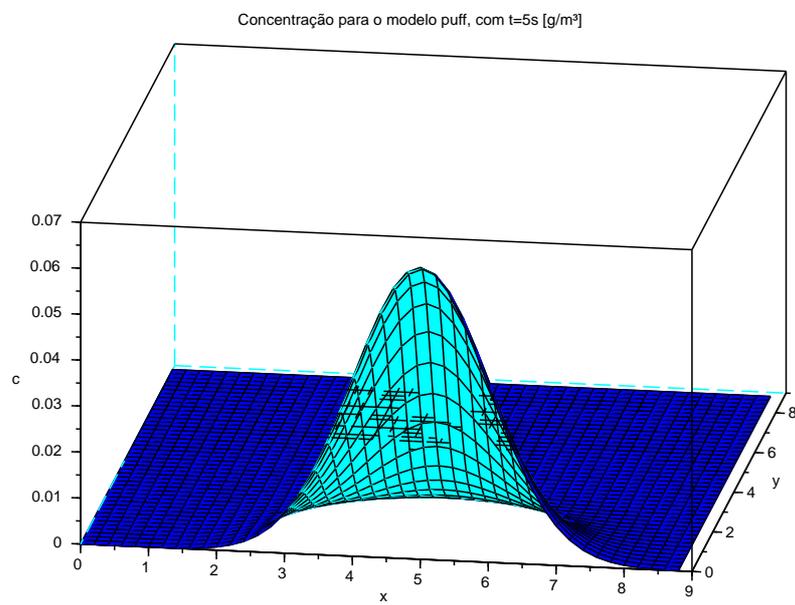


Figura 4.2: Concentração (g/m^3) para $t = 5s$ observada no eixo x .

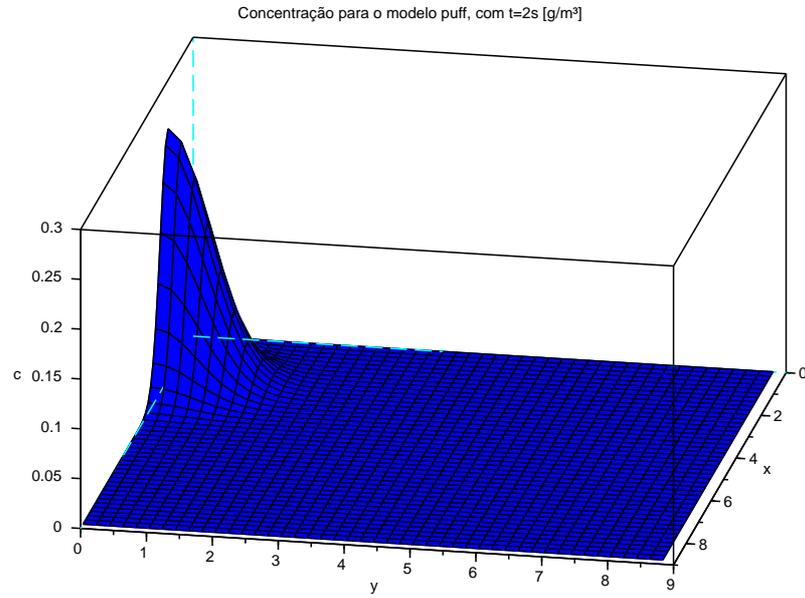


Figura 4.3: Concentração (g/m^3) para $t = 2s$ observada no eixo y .

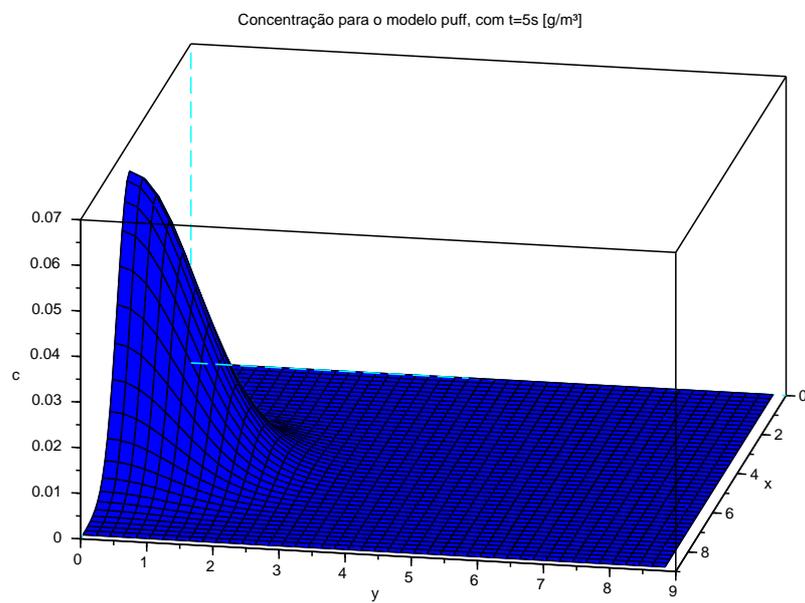


Figura 4.4: Concentração (g/m^3) para $t = 5s$ observada no eixo y .

4.6 O modelo com “condição inicial contínua”

O modelo de dispersão de poluentes com emissão instantânea possui como solução a equação (4.38), porém no presente trabalho, buscamos a solução para o modelo de dispersão em pluma. Para obtermos tal solução, trataremos a pluma como uma sequência de *puffs* emitidos em um intervalo de tempo muito pequeno $d\tau$. Desta forma, a equação para a concentração da pluma em um determinado tempo t pode ser expressa como

$$\bar{C}(x, y, z, t) \propto \int_0^t \bar{c}(x, y, z, t - \tau) d\tau. \quad (4.39)$$

Note que na relação acima existe a necessidade de introduzir uma constante de tempo, pois a integração no tempo gera uma discordância nas unidades da concentração. Desta maneira, considere um T (s) constante. Então, a equação para a pluma é dada por

$$\begin{aligned} \bar{C}(x, y, z, t) = \frac{1}{T} \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t - \tau)^3}} \times \\ \exp \left[-\frac{(x - x_0 - \bar{u}(t - \tau))^2}{4K_x(t - \tau)} - \frac{(y - y_0 - \bar{v}(t - \tau))^2}{4K_y(t - \tau)} - \frac{(z - H_s - \bar{w}(t - \tau))^2}{4K_z(t - \tau)} \right] d\tau, \end{aligned} \quad (4.40)$$

onde \bar{c} denota a concentração para o *puff* e \bar{C} denota a concentração para a pluma. Cabe salientar que esta solução é gaussiana apenas localmente, pois neste caso K_z é constante (para cada altura). Globalmente a solução deixa de ser gaussiana pois a superposição de gaussianas locais não é gaussiana, e também devido às variações de K_z .

5. EFEITOS ESTOCÁSTICOS EM MODELOS DETERMINÍSTICOS PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

A partir deste momento, o objetivo principal desta parte do trabalho deixa de ser a solução analítica da equação (4.40) e se torna a investigação da estabilidade da solução sob condições estocásticas. Estas condições podem ser generalizadas como o acréscimo de flutuações estocásticas em algumas das variáveis da equação, e também reflexões parciais do poluente na camada limite atmosférica e no solo.

5.1 Influência de variações para simular estocasticidade

A equação de advecção-difusão (4.15) é considerada determinística, pois seus termos contêm toda a informação da complexidade da turbulência, que é considerada altamente irregular e não pode ser descrita com precisão por um modelo determinístico. Os modelos de dispersão de poluentes são, em geral, determinísticos, sendo que os dados obtidos por estes modelos são comparados com dados experimentais sem considerar quaisquer efeitos de natureza estocástica. Deste modo, para observarmos a influência de contribuições estocásticas na solução, serão introduzidos momentos estocásticos nas variáveis \bar{u} , K_z e z_0 , tal que

$$\bar{u} \rightarrow \bar{u} + \Delta\bar{u}, \quad (5.1a)$$

$$z_0 \rightarrow z_0 + \Delta z_0, \quad (5.1b)$$

$$K_z \rightarrow K_z + \Delta K_z, \quad (5.1c)$$

onde $\Delta\bar{u} \sim N(0, 1)$, $\Delta z_0 \sim N(0, 1)$ e $\Delta K_z \sim N(0, 1)$, sendo que $N(0, 1)$ é uma distribuição normal com média $\mu = 0$ e variância $\sigma^2 = 1$.

Assim, as flutuações introduzidas na equação determinística, representadas por Δ , são definidas por uma distribuição normal, e equivalem a uma porcentagem das variáveis

consideradas na mesma.

O procedimento adotado para simular tais flutuações foi o seguinte:

1. Cria-se um conjunto de números aleatórios baseados na função densidade de probabilidade da distribuição normal com média $\mu = 0$ e variância $\sigma^2 = 1$, $f(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$, normalizados no intervalo $[-1,1]$;
2. Para cada passo em x e y utiliza-se um destes números aleatórios para gerar as flutuações como: $\Delta z_0 = z_0 \times \text{aleatório} \times \text{porcentagem desejada}$, $\Delta K_z = K_z \times \text{aleatório} \times \text{porcentagem desejada}$ e $\Delta \bar{u} = \bar{u} \times \text{aleatório} \times \text{porcentagem desejada}$.

O valor de z_0 utilizado para calcular Δz_0 foi obtido através do experimento de Hanford* e é constante, enquanto os valores de \bar{u} e K_z são calculados a partir do perfil de vento e da parametrização da turbulência, que serão apresentados no próximo capítulo.

As variáveis z_0 , K_z e \bar{u} não foram escolhidas ao acaso para serem observadas quando acrescidas flutuações. Os modelos e experimentos utilizam comprimento de rugosidade fixo, porém os terrenos, em geral, têm geografia irregular, de forma que este comprimento pode ser modelado de maneira mais precisa. Devido a estas condições, z_0 é uma variável que requer flutuações para ser melhor descrita. Já o coeficiente de difusão vertical K_z tornou o modelo determinístico devido ao fechamento Fickiano da turbulência e \bar{u} tem variações que podem ser descritas por flutuações.

5.2 Condições de contorno completamente reflexivas

Para justificar o mapeamento do intervalo infinito $z \in (-\infty, \infty)$ para o finito $z \in [0, z_i]$, determina-se as imagens da distribuição gaussiana, o que permite avaliar a contribuição da distribuição após a reflexão.

A gaussiana original tem seu centro no eixo z localizado em $z = H_s$, então a sequência que começa com reflexão primeira em H_s e posterior em z_i , tem a sequência

*Maiores detalhes no Capítulo 6.

de seus centros conforme

$$\begin{aligned}
H_s \rightarrow & -H_s, H_s + 2z_i, -H_s - 2z_i, H_s + 4z_i, -H_s - 4z_i, \dots, \\
& \dots, \underbrace{-H_s - 2nz_i, H_s + 2nz_i}_{n\text{-ésima reflexão em } 0 \text{ e } z_i}, \dots \quad \forall n \in \mathbb{N}
\end{aligned} \tag{5.2}$$

A sequência correspondente com a primeira reflexão em z_i

$$\begin{aligned}
H_s \rightarrow & -H_s + 2z_i, H_s - 2z_i, -H_s + 4z_i, H_s - 4z_i, \dots, \\
& \dots, \underbrace{-H_s + 2nz_i, H_s - 2nz_i}_{n\text{-ésima reflexão em } 0 \text{ e } z_i}, \dots \quad \forall n \in \mathbb{N}^*.
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Portanto, existem quatro sequências onde as reflexões no limite inferior tem índice ímpar, e no limite superior, par

$$\left. \begin{aligned} H_s & \rightarrow -H_s - 2nz_i \\ H_s & \rightarrow H_s + 2nz_i \end{aligned} \right\} \forall n \in \mathbb{N} \tag{5.4}$$

e, as reflexões no limite inferior com índice par e as no limite superior com índice ímpar

$$\left. \begin{aligned} H_s & \rightarrow H_s - 2nz_i \\ H_s & \rightarrow -H_s + 2nz_i \end{aligned} \right\} \forall n \in \mathbb{N}^*. \tag{5.5}$$

Note que as sequências foram representadas para que os índices percorram os números naturais e não representem o número de reflexão. Por este motivo, pode-se combinar estas quatro sequências em duas

$$\left. \begin{aligned} H_s & \rightarrow -H_s - 2nz_i \\ H_s & \rightarrow H_s + 2nz_i \end{aligned} \right\} \forall n \in \mathbb{Z}. \tag{5.6}$$

Desta forma, a equação para a concentração de um *puff* (4.38) com reflexão nos contornos pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\bar{c}(x, y, z, t) = & \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z t^3}} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - \bar{u}t)^2}{4K_x t} - \frac{(y - y_0 - \bar{v}t)^2}{4K_y t} \right] \\
\times \sum_{n=-\infty}^{\infty} & \left\{ \exp \left[-\frac{(z - H_s - 2nz_i - \bar{w}t)^2}{4K_z t} \right] + \exp \left[-\frac{(z + H_s + 2nz_i - \bar{w}t)^2}{4K_z t} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{5.7}$$

E a equação para a concentração da pluma (4.40) com reflexão completa nos contornos pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \bar{C}(x, y, z, t) = \frac{1}{T} \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \left\{ \frac{1}{\sqrt{(t-\tau)^3}} \exp \left[-\frac{[x-x_0-\bar{u}(t-\tau)]^2}{4K_x(t-\tau)} \right. \right. \\ \left. \left. -\frac{[y-y_0-\bar{v}(t-\tau)]^2}{4K_y(t-\tau)} \right] \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\exp \left(-\frac{[z-H_s-2nz_i-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z t} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \exp \left(-\frac{[z+H_s+2nz_i-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z t} \right) \right] \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (5.8)$$

A Figura 5.1 ilustra uma reflexão no solo ($H_s \rightarrow -H_s$), neste caso $n = 0$, e é comumente utilizada na descrição do *puff* gaussiano.

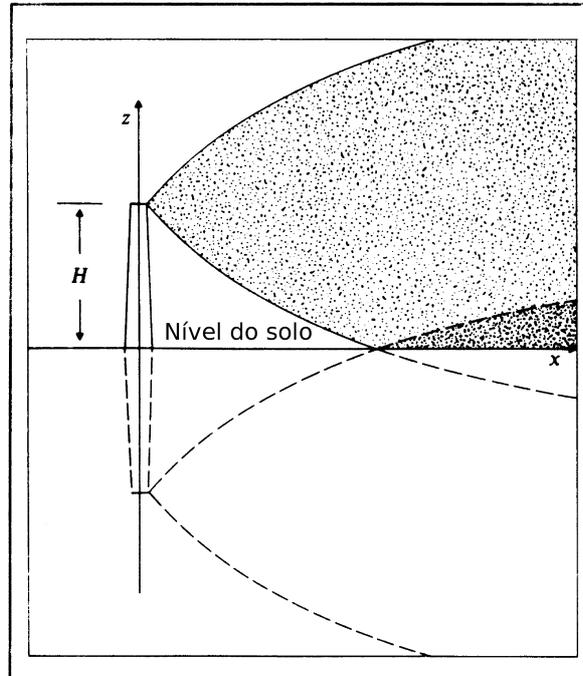


Figura 5.1: Esquema simples para representar graficamente a reflexão no solo ($z = 0$) [Zannetti, 1990].

5.3 Condições de contorno parcialmente reflexivas

Um aspecto ainda não levado em consideração em estudos anteriores é uma possível infiltração do poluente no solo ou na água, e também a passagem de certa quantidade do material que ultrapassa o limite superior da camada limite atmosférica.

Para isto, serão introduzidos nas soluções que consideram as reflexões (5.7) e (5.8) os termos ω_c e ω_s , que são, respectivamente, os parâmetros de reflexão na camada limite atmosférica e no solo, e descrevem a quantidade de poluente refletida nos mesmos. No caso de reflexão completa, temos $\omega_c = 1$ e $\omega_s = 1$, que corresponde a 100% de reflexão tanto na camada limite quanto no solo. Então, seguindo o mesmo critério de reflexão da Seção 5.2, obtemos

$$\left. \begin{aligned} H_s &\rightarrow -\omega_s H_s - 2n\omega_c z_i \\ H_s &\rightarrow \omega_s H_s + 2n\omega_c z_i \end{aligned} \right\} \forall n \in \mathbb{Z}. \quad (5.9)$$

Desta forma, a equação para a concentração de um *puff* (4.38) com reflexão parcial nos contornos pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \bar{c}(x, y, z, t) &= \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z t^3}} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - \bar{u}t)^2}{4K_x t} - \frac{(y - y_0 - \bar{v}t)^2}{4K_y t} \right] \\ &\times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left[-\frac{(z - \omega_s H_s - 2n\omega_c z_i - \bar{w}t)^2}{4K_z t} \right] + \exp \left[-\frac{(z + \omega_s H_s + 2n\omega_c z_i - \bar{w}t)^2}{4K_z t} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

E a equação para a concentração da pluma (4.40) com reflexão parcial nos contornos pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \bar{C}(x, y, z, t) &= \frac{1}{T} \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \left\{ \frac{1}{\sqrt{(t-\tau)^3}} \exp \left[-\frac{[x - x_0 - \bar{u}(t-\tau)]^2}{4K_x(t-\tau)} \right. \right. \\ &\left. \left. - \frac{[y - y_0 - \bar{v}(t-\tau)]^2}{4K_y(t-\tau)} \right] \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\exp \left(-\frac{[z - \omega_s H_s - 2n\omega_c z_i - \bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z t} \right) \right. \right. \\ &\left. \left. + \exp \left(-\frac{[z + \omega_s H_s + 2n\omega_c z_i - \bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z t} \right) \right] \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (5.11)$$

6. DADOS PARA VALIDAÇÃO DO MODELO

Uma utilização correta dos modelos de transporte e difusão na atmosfera não pode prescindir de um estudo sobre suas capacidades em representar corretamente situações reais. Quando possível, deve-se verificar a confiabilidade do modelo utilizado com os dados, cenários topográficos e meteorológicos próprios da área de seu emprego [Tirabassi, 2005].

Assim, neste capítulo, apresenta-se os dados experimentais, parametrização do coeficiente de difusão, expressão para o parâmetro de dispersão lateral, perfil de vento e os índices estatísticos utilizados neste trabalho de dissertação.

6.1 Experimento de Hanford (Washington, EUA)

O experimento difusivo de Hanford foi conduzido de maio a junho de 1983, em uma região semi-árida de sul a leste do estado de Washington, EUA, em um terreno geralmente plano. A descrição detalhada do experimento foi fornecida por Doran e Horst [Doran e Horst, 1985]. É um experimento de fonte baixa realizado durante condições estáveis a quase-neutras. Por ser um experimento estável, a altura da camada limite atmosférica aqui considerada será a altura da camada limite estável, denotada por $z_{i,e}$.

Ao todo 6 experimentos foram realizados. Em cada experimento o tempo de liberação foi em torno de 30 minutos, exceto no experimento 5 que foi de 22 minutos. Os coletores foram posicionados em círculos concêntricos com uma distância angular de 8° , 4° , 4° , 2° e 3° de raio de 100, 200, 800, 1600 e 3200 m , respectivamente (Domínio: 3200 m de distância da fonte). Dois poluentes, um que não deposita (SF_6) e um que deposita (ZnS), foram liberados simultaneamente de uma altura de 2 m . No presente trabalho, foram utilizados somente os dados do SF_6 , pois não foi considerada a deposição no solo. A taxa de liberação média foi de 0,3 g/s . Os dados meteorológicos foram obtidos tomando medidas nas alturas de 1, 2, 4, 8, 16 e 32 m em uma torre de 122 m localizada aproximadamente a 100 m para o norte do ponto de liberação [Doran et al., 1984]. Os valores dos parâmetros da camada limite atmosférica são apresentados na Tabela 6.1. A rugosidade do terreno era

de 3 *cm*.

Tabela 6.1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford [Doran e Horst, 1985], [Doran et al., 1984].

	\bar{u} (2 m)	u_*	L	$z_{i,e}$
Expt	(ms^{-1})	(ms^{-1})	(m)	(m)
01	3,63	0,40	166	269
02	1,42	0,26	44	112
03	2,02	0,27	77	151
04	1,50	0,20	34	86
05	1,41	0,26	59	129
06	1,54	0,30	71	152

A altura da camada limite estável $z_{i,e}$ não foi fornecida no experimento, de forma que foi utilizada a relação $z_{i,e} = 0,4(u_*L/f_c)^{1/2}$ [Zilitinkevich, 1972], na qual f_c representa o parâmetro de Coriolis: $f_c = 1,46 \times 10^{-4} s^{-1}$.

6.2 Parametrização da turbulência

A fim de complementar a modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera, é necessário utilizar uma parametrização turbulenta adequada, pois esta descreve a física da turbulência, relacionando os fenômenos naturais com os modelos matemáticos.

Os parâmetros de dispersão são modelados de acordo com os regimes de estabilidade da camada limite atmosférica. Degrazia e Moraes [Degrazia e Moraes, 1992] propuseram um modelo para o coeficiente de difusão turbulenta vertical (K_z) para condições estáveis, formulado a partir da teoria da difusão de Taylor [Taylor, 1922] e do espectro de energia cinética turbulenta, onde K_z é função da distância da fonte. Um modelo equivalente para camada limite convectiva foi proposto por Degrazia et al. [Degrazia et al., 2001].

O parâmetro de dispersão generalizado σ_α (m), proposto por Pasquill e Smith [Pasquill e Smith, 1983] é dado por

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin^2(\pi n t / \beta_i)}{n^2} dn, \quad (6.1)$$

com $\alpha = x, y, z$ e $i = u, v, w$, onde $F_i^E(n)$ é o espectro de energia Euleriana (s) normalizado pela variância da velocidade Euleriana σ_i^2 (m^2/s^2), β_i é definido como a razão das escalas de tempo integrais Lagrangeana e Euleriana, n é a frequência (s^{-1}) e t é o tempo de viagem (s).

Uma expressão que descreve a evolução dos coeficientes de difusão K_α (m^2/s) ao longo do tempo foi apresentada por Batchelor [Batchelor, 1949] e é escrita como

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt}. \quad (6.2)$$

Substituindo (6.1) em (6.2), obtém-se

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin(2\pi n t / \beta_i)}{n} dn, \quad (6.3)$$

A equação para o espectro de velocidade Euleriana sob condições estáveis pode ser expressa como função das escalas de velocidade [Sorbjan, 1986]

$$\frac{n S_i^E(n)}{U_*^2} = \frac{0,644 \Phi_i [f / (f_m)_i]}{1 + 1,5 [f / (f_m)_i]^{5/3}}, \quad (6.4)$$

onde

- Φ_i é a função de similaridade local, e $\Phi_u = 6,0$, $\Phi_v = 3,3$ e $\Phi_w = 2,5$ [Sorbjan, 1986];
- $f = \frac{nz}{\bar{u}(z)}$ é a frequência adimensional;
- $\bar{u}(z) = U$ é a velocidade média do vento horizontal na altura z_n (m/s);
- $(f_m)_i = (f_m)_{n,i} \left(1 + 3,7 \frac{z}{\Lambda}\right)$ é a frequência do pico espectral;
- $(f_m)_{n,i}$ é a frequência do pico espectral na estratificação neutra, onde $(f_m)_{n,u} = 0,045$, $(f_m)_{n,v} = 0,22$ e $(f_m)_{n,w} = 0,33$;
- $\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{z_{i,e}}\right)^{1,5\alpha_1 - \alpha_2}$ é o comprimento de Obukhov local (m), onde $\alpha_1 = 1,5$ e $\alpha_2 = 1,0$ [Nieuwstadt, 1984];
- $U_* = u_*(1 - z/z_{i,e})^{\alpha_1/2}$ é a escala de velocidade na camada limite (m/s);
- u_* é a velocidade de fricção (m/s);

- z é a altura acima do solo (m).

A integral da equação (6.4), sobre todo o domínio de frequências, resulta na variância da velocidade turbulenta Euleriana, que é descrita por

$$\sigma_i^2 = 0,644\Phi_i U_*^2 \frac{z}{U(f_m)_i} \int_0^\infty \frac{1}{1 + 1,5[nz/U(f_m)_i]^{5/3}} dn, \quad (6.5)$$

e resulta em

$$\sigma_i^2 = 0,9982\Phi_i U_*^2. \quad (6.6)$$

A variância da velocidade turbulenta Euleriana é utilizada para normalizar o espectro, de forma que o espectro Euleriano normalizado pode ser escrito como

$$F_i^E(n) = \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2} = \frac{0,644[f/(f_m)_i]}{0,9982n\{1 + 1,5[f/(f_m)_i]^{5/3}\}}. \quad (6.7)$$

Substituindo as equações (6.6) e (6.7) em (6.3) e considerando $\beta_i = U\sqrt{\pi}/4\sigma_i$ e $U_* = u_*(1 - z/z_{i,e})^{\alpha_1/2}$ [Sorbjan, 1986], obtém-se o coeficiente de difusão generalizado

$$K_\alpha = \frac{0,644u_*(1 - z/z_{i,e})^{\alpha_1/2}\Phi_i^{1/2}z}{8(0,9982\pi)^{1/2}(f_m)_i} \times \int_0^\infty \frac{\sin [8(0,9982\pi\Phi_i)^{1/2}(1 - z/z_{i,e})^{\alpha_1/2}(f_m)_i n' X z_{i,e}/(1,5)^{3/5}z]}{1 + n'^{5/3}} \frac{dn'}{n'}, \quad (6.8)$$

onde $X = \frac{xu_*}{Uz_{i,e}}$ é a distância adimensional e $n' = (1,5)^{3/2} \frac{nz}{U(f_m)_i}$ é a frequência adimensional.

No presente trabalho, temos interesse particular no coeficiente de difusão vertical, ou seja, $\alpha = z$ e $i = w$. Então,

$$K_z = \frac{0,644u_*(1 - z/z_{i,e})^{\alpha_1/2}1,58z}{8\sqrt{\pi}(f_m)_w} \times \int_0^\infty \frac{\sin [8\sqrt{\pi}1,58(1 - z/z_{i,e})^{\alpha_1/2}(f_m)_w n' X z_{i,e}/(1,5)^{3/5}z]}{1 + n'^{5/3}} \frac{dn'}{n'}. \quad (6.9)$$

O perfil deste coeficiente para o experimento de Hanford 01 pode ser observado na Figura 6.1, sendo que para os demais experimentos este perfil é similar. O mesmo coeficiente pode também ser obtido por meio de uma formulação algébrica [Degrazia et al., 1996]. Para os coeficientes de difusão longitudinal K_x e lateral K_y foram considerados valores constantes,

sendo $K_x = 0,01 \text{ m}^2/\text{s}$ e $K_y = 0,01 \text{ m}^2/\text{s}$.

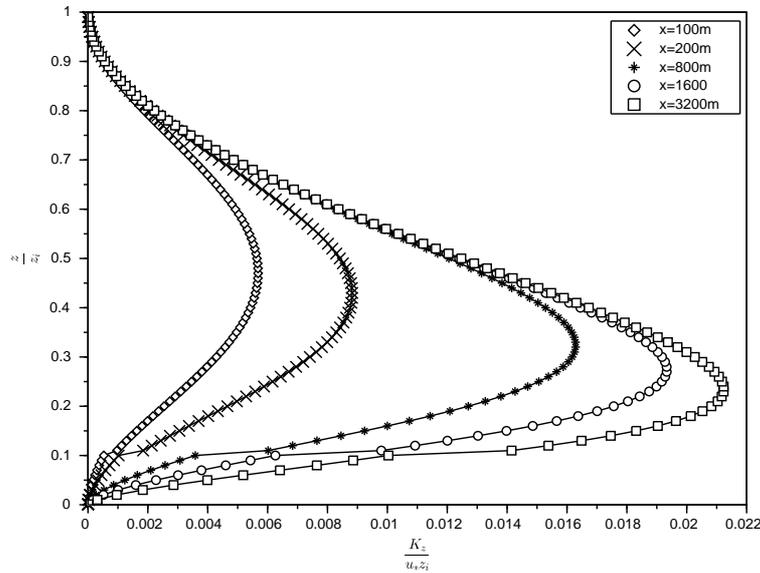


Figura 6.1: Perfil do coeficiente de difusão vertical K_z para o experimento de Hanford 01.

6.3 Perfil de velocidade do vento

O perfil de velocidade do vento na direção x foi parametrizado utilizando a teoria de similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML [Berkowicz et al., 1986], e é definido conforme a altura z .

Seja $z_b = \min(|L|; 0,1z_{i,e})$, então

$$U = \frac{u_*}{k} [\ln(z/z_0) - \Psi_m(z/L) + \Psi_m(z_0/L)], \quad z \leq z_b \quad (6.10a)$$

$$U = \bar{u}(z), \quad z > z_b, \quad (6.10b)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade e Ψ_m a função de estabilidade expressa em termos da relação de Businger, que para o perfil estável é dada por

$$\Psi_m = -4,7 \frac{z}{L}. \quad (6.11)$$

6.4 Índices estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados no experimento de Hanford é realizada através de índices estatísticos presentes na literatura especializada. Estes índices foram desenvolvidos por Hanna em 1989 [Hanna, 1989] e são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental Americana (USEPA), pela Força Aérea Americana (*US Air Force*), pelo Instituto Americano do Petróleo (API), bem como pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera após o *Workshop “Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessments in Europe”*, realizado na Bélgica em 1994.

As notações utilizadas para os índices o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas no experimento e previstas pelo modelo, C é a concentração de poluentes, e σ é o desvio padrão. Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

1. Erro quadrático médio normalizado (*Normalized mean square error*): $NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}$.

Informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. É uma estatística adimensional, e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.

2. Coeficiente de correlação (*Correlation coefficient*): $COR = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}$.

Descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para uma boa concordância entre modelo e observações, o seu valor deve ser 1.

3. Fator de dois: FA2.

Fração de dados que estão entre $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$, ou seja,

$$\frac{\text{quantidade de valores que satisfazem a desigualdade}}{\text{quantidade total de experimentos}}.$$

Quanto mais próximo de 1 este valor estiver, maior é a confiabilidade do modelo. Cumpre enfatizar que este fator exclui pequenas concentrações com maior probabilidade que grandes, o que não necessariamente faz sentido sob ponto de visto físico.

4. Fração de inclinação (*Fractional bias*): $FB = \frac{\overline{C_o - C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}$.

Informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

5. Desvio fracional padrão (*Fractional standard deviation*): $FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)}$.

O valor ótimo é zero. Para modelos determinísticos este valor difere de zero pois o fenômeno físico, ou seja, observado é de natureza estocástica, enquanto o modelo determinístico gera apenas um valor médio.

Cabe salientar que o índice FA2 somente foi incluído por ser de uso tradicional, pois não é um critério adequado para validação de modelos. O mais adequado seria a utilização de um intervalo de confiança em torno da bissetriz no gráfico das concentrações observadas no experimento *versus* as concentrações previstas pelo modelo ($C_o \times C_p$), de forma que não houvesse sistematicamente maior probabilidade de excluir concentrações pequenas do que grandes.

7. RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentados os resultados numéricos e estatísticos obtidos no decorrer da pesquisa. Cabe salientar que não serão apresentados todos os resultados obtidos, sendo enfatizados os mais relevantes. Nos cálculos da concentração de poluentes, utilizou-se a parametrização da turbulência e os dados meteorológicos do experimento de Hanford discutidos no Capítulo 6. Para a obtenção dos resultados numéricos, utilizou-se a linguagem de programação C. O computador utilizado nas simulações foi um HP G42, Intel Core i3, processadores de 2.27 GHz, 2,8 GB de memória RAM e sistema operacional Ubuntu 13.10.

7.1 Influência de variações para simular estocasticidade

Para a simulação destes resultados, utilizou-se o experimento de Hanford 01, com distância inicial $x = 800 \text{ m}$ e $y = 0 \text{ m}$, e afastamento posterior de 20 metros em cada uma das direções. Nesta seção não foram calculados os índices estatísticos, pois o objetivo central é a comparação do mesmo experimento com diferentes flutuações.

O experimento 01 foi executado com tempo de liberação de 30 minutos ($t = 1800s$). Para este caso, é considerado estacionário, pois o aumento deste tempo não modifica a solução. Apenas para análise de modelo, foi também considerado o caso transiente, com $t = 205s$. Todas as concentrações estão normalizadas pela intensidade da fonte Q .

Os gráficos apresentados a seguir, Figura 7.1 e Figura 7.2, são as isolinhas da solução da equação para pluma sem flutuação (4.40), para os casos transiente e estacionário, respectivamente.

As figuras apresentadas nas Seções 7.1.1, 7.1.2 e 7.1.3, são as isolinhas da concentração para os casos transiente (Figuras 7.3 a 7.6, 7.15 a 7.18 e 7.27 a 7.30) e estacionário (Figuras 7.9 a 7.12, 7.21 a 7.24 e 7.33 a 7.36), quando são introduzidas as flutuações descritas pelas equações (5.1a), (5.1b) e (5.1c). Estas isolinhas devem ser comparadas com os casos onde não há flutuação (Figuras 7.1 e 7.2). Flutuações menores que as apresentadas não manifestaram efeitos significativos, enquanto valores maiores que os apresentados excediam

o efeito esperado.

São apresentados também gráficos de espalhamento (Figuras 7.7, 7.8, 7.13, 7.14, 7.19, 7.20, 7.25, 7.26, 7.31, 7.32, 7.37 e 7.38) para as concentrações mínimas e máximas expostas em cada caso, onde deve-se observar o comportamento do espalhamento das concentrações ao redor da bissetriz traçada no gráfico.

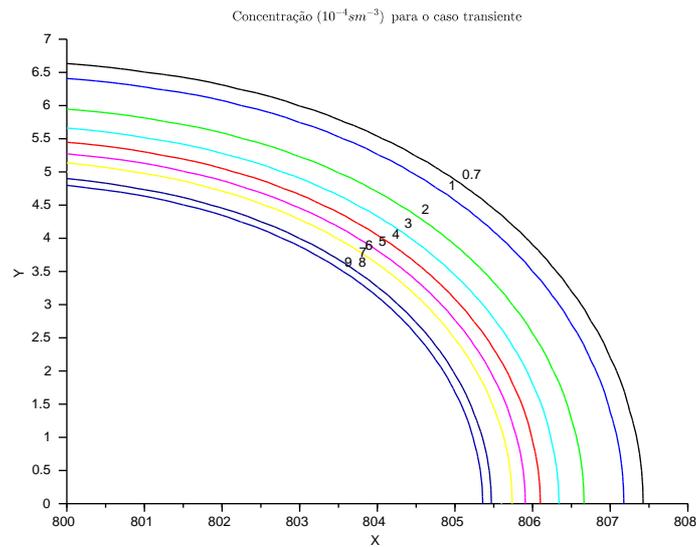


Figura 7.1: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) para o caso transiente.

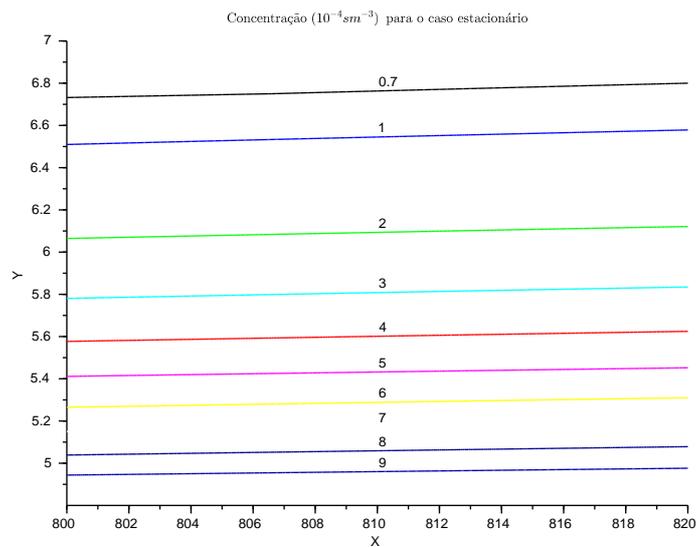


Figura 7.2: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) para o caso estacionário.

7.1.1 Variações na velocidade média \bar{u}

Caso Transiente

A menor flutuação aqui apresentada é de 0,01% de \bar{u} , enquanto a maior flutuação é de 0,075% de \bar{u} .

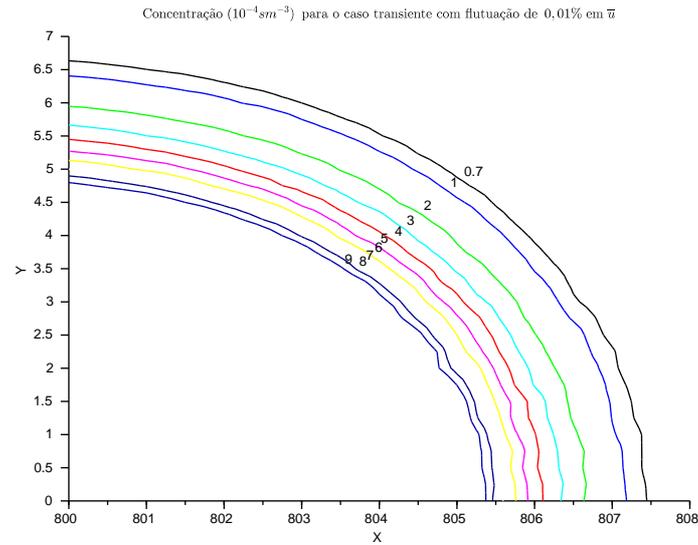


Figura 7.3: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,01% em \bar{u} .

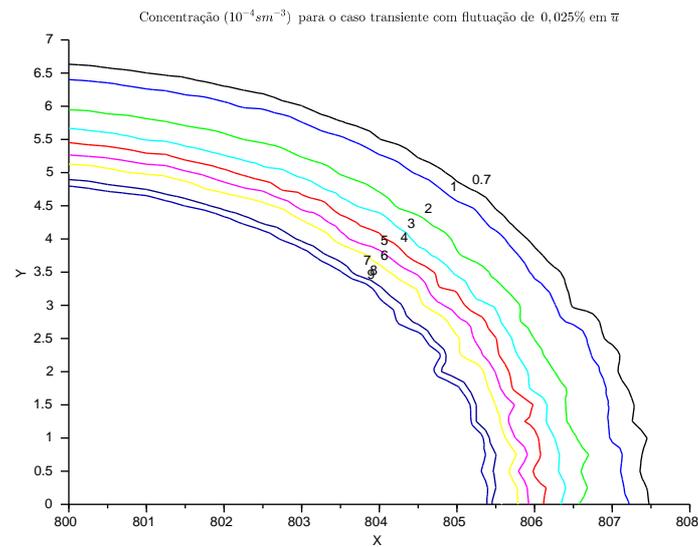


Figura 7.4: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,025% em \bar{u} .

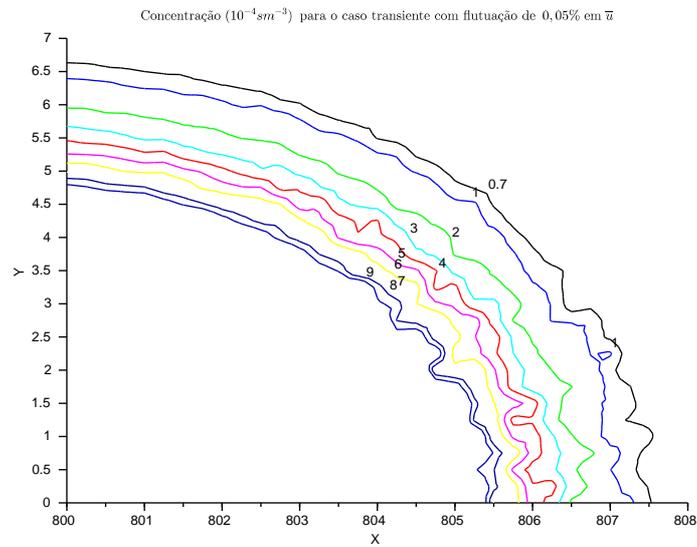


Figura 7.5: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,05% em \bar{u} .

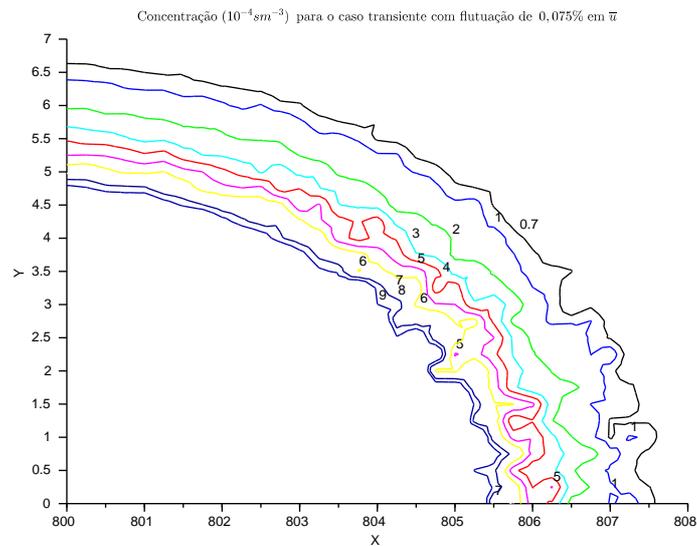


Figura 7.6: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,075% em \bar{u} .

Apresenta-se também os gráficos de espalhamento das flutuações mínima (0,01%) e máxima (0,075%).

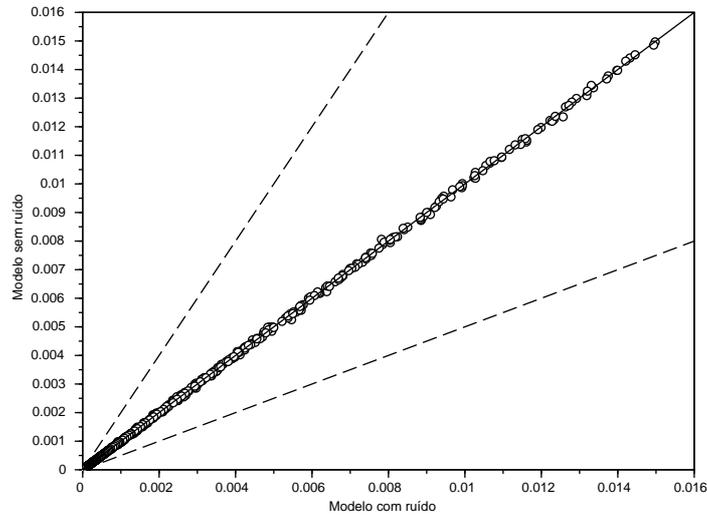


Figura 7.7: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,01% em \bar{u} para o caso transiente.

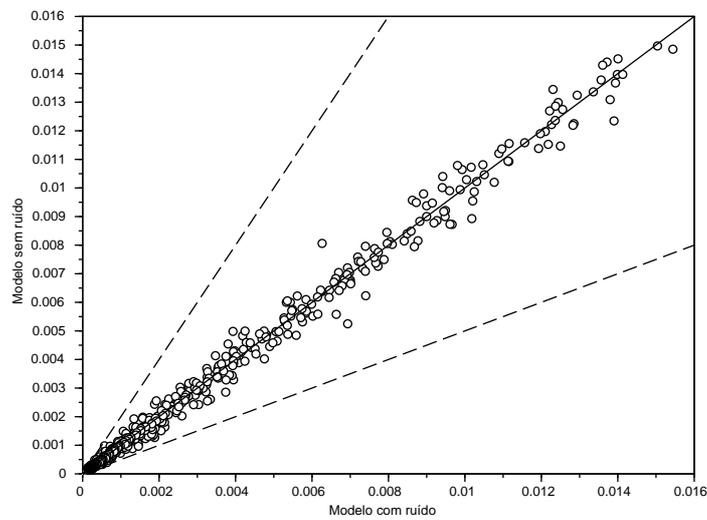


Figura 7.8: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,075% em \bar{u} para o caso transiente.

Caso Estacionário

Para o caso estacionário, a menor flutuação apresentada é de 0,3% de \bar{u} , e a maior flutuação é de 10,0% de \bar{u} .

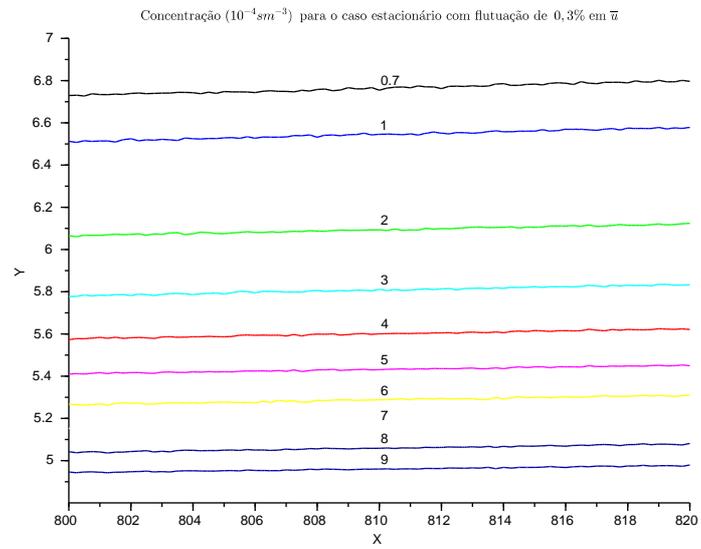


Figura 7.9: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,3% em \bar{u} .

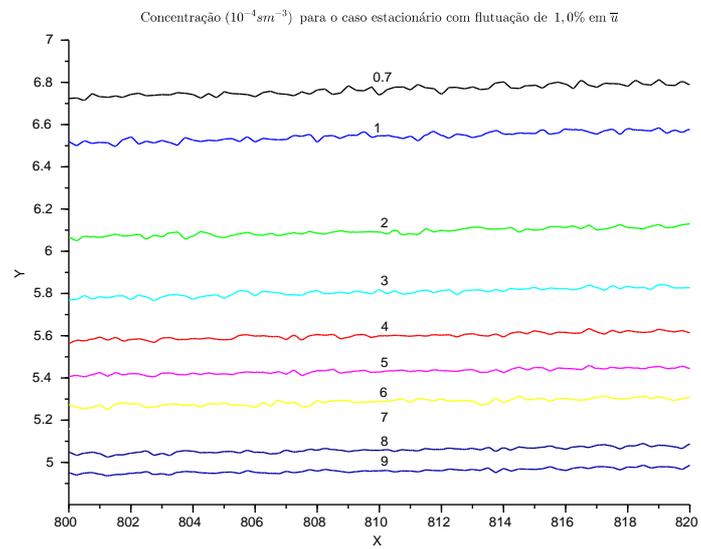


Figura 7.10: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 1,0% em \bar{u} .

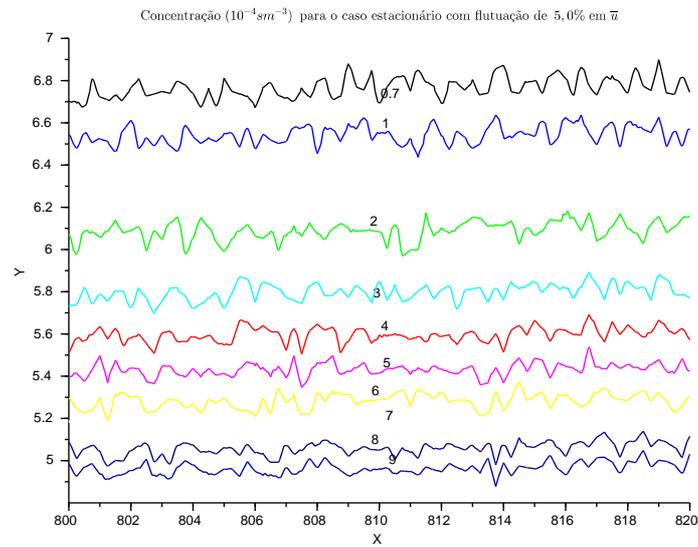


Figura 7.11: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 5,0% em \bar{u} .

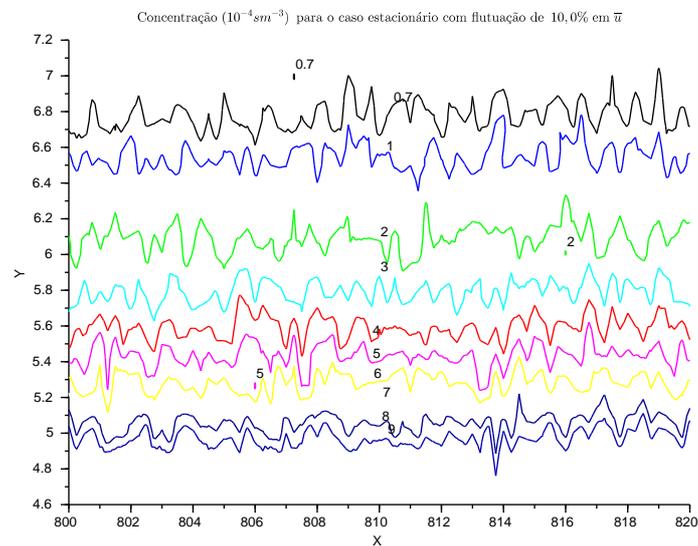


Figura 7.12: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em \bar{u} .

E os gráficos de espalhamento das flutuações mínima (0,3%) e máxima (10,0%)

utilizadas.

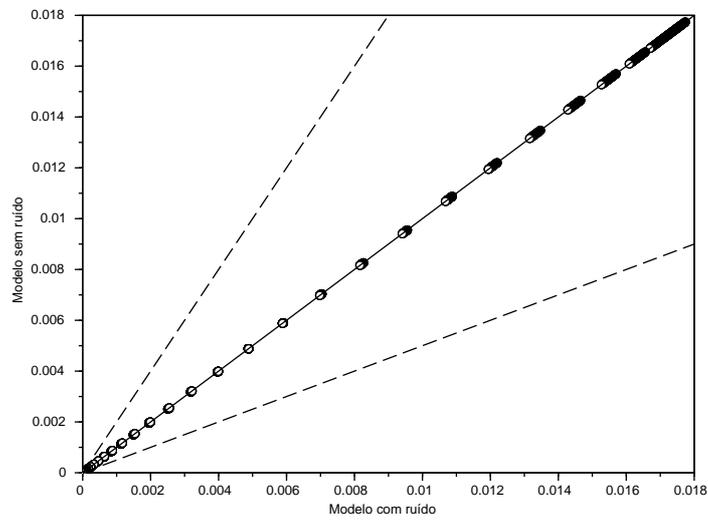


Figura 7.13: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,3% em \bar{u} para o caso estacionário.

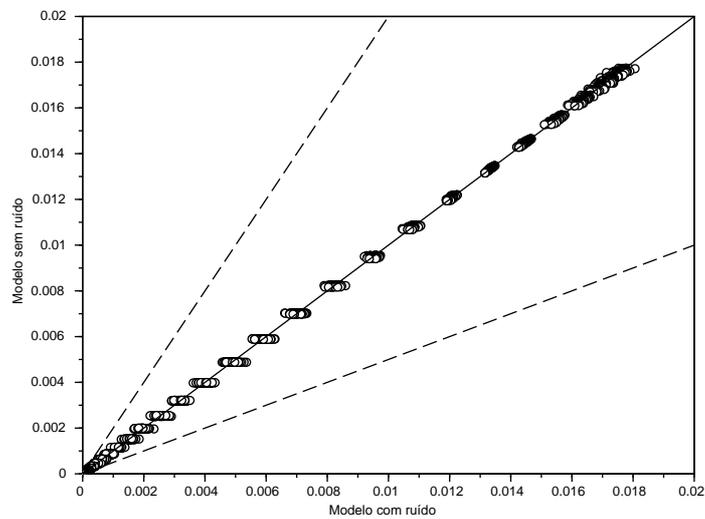


Figura 7.14: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 10,0% em \bar{u} para o caso estacionário.

7.1.2 Variações no comprimento de rugosidade z_0

Caso Transiente

Já no caso das variações no comprimento de rugosidade z_0 , a menor flutuação aqui apresentada é de 0,05% de z_0 . E a maior flutuação é de 0,35%.

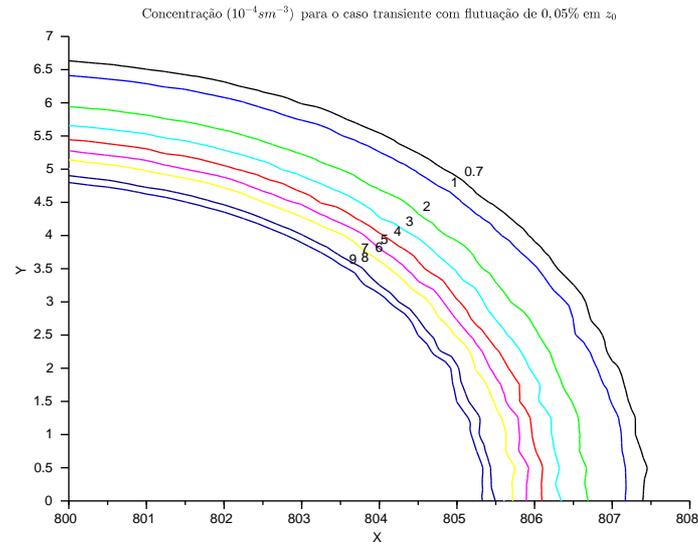


Figura 7.15: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,05% em z_0 .

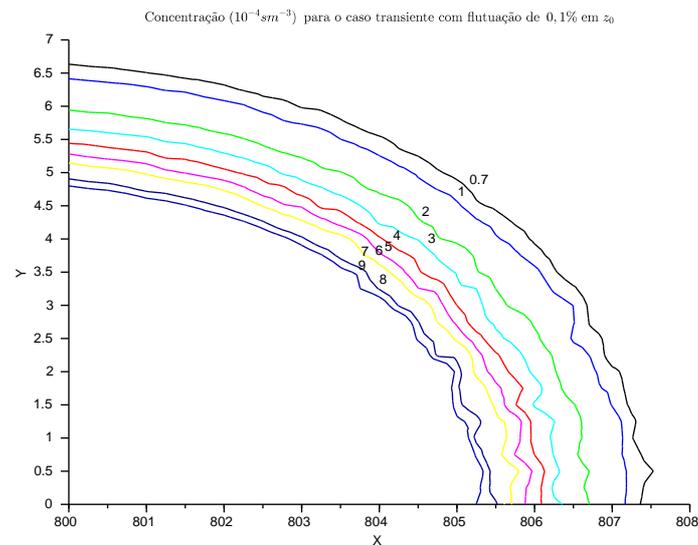


Figura 7.16: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,1% em z_0 .

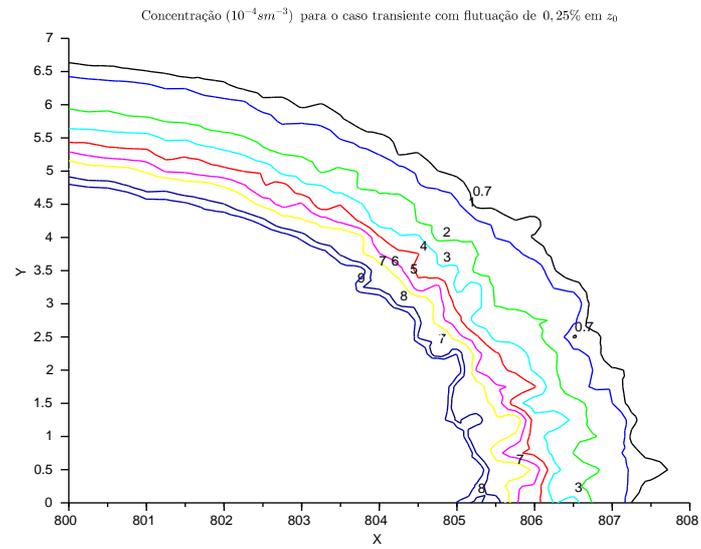


Figura 7.17: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,25% em z_0 .

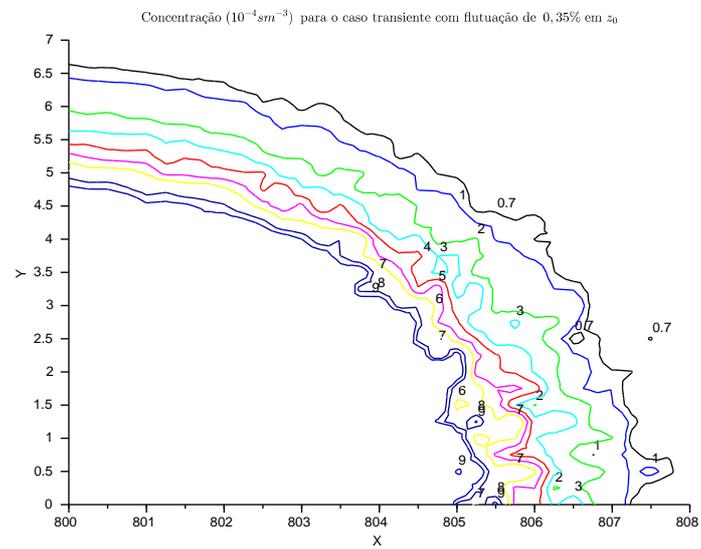


Figura 7.18: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 0,35% em z_0 .

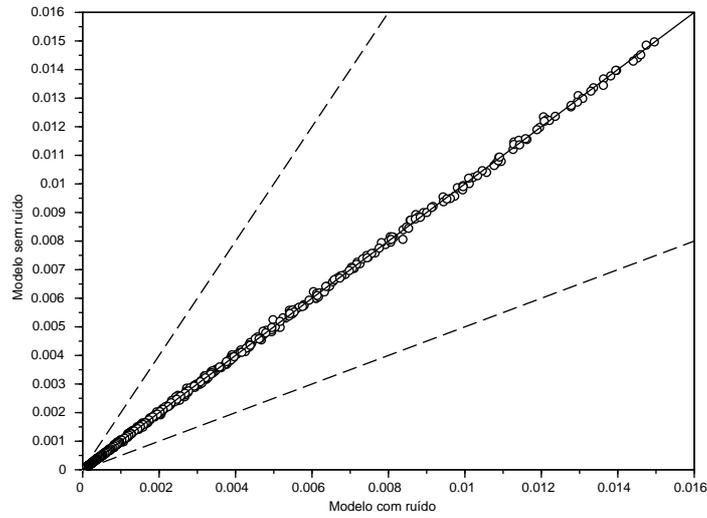


Figura 7.19: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,05% em z_0 para o caso transiente.

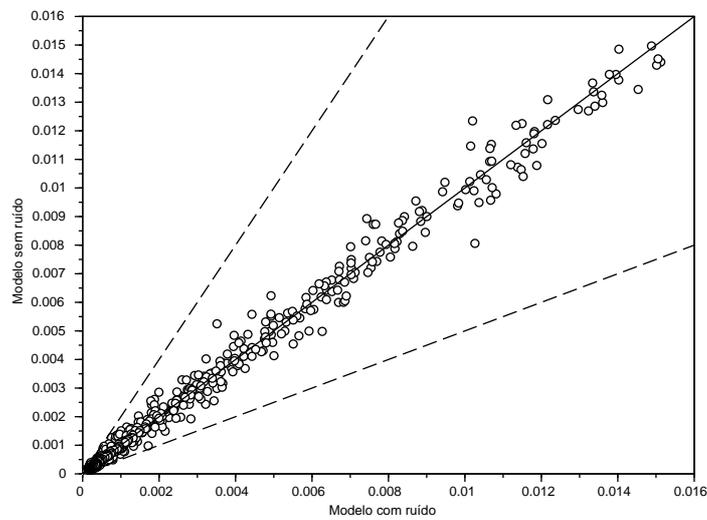


Figura 7.20: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 0,35% em z_0 para o caso transiente.

Caso Estacionário

E para o caso estacionário, a menor flutuação aqui apresentada é de 2,0% de z_0 . Já a maior flutuação é de 30,0% de z_0 .

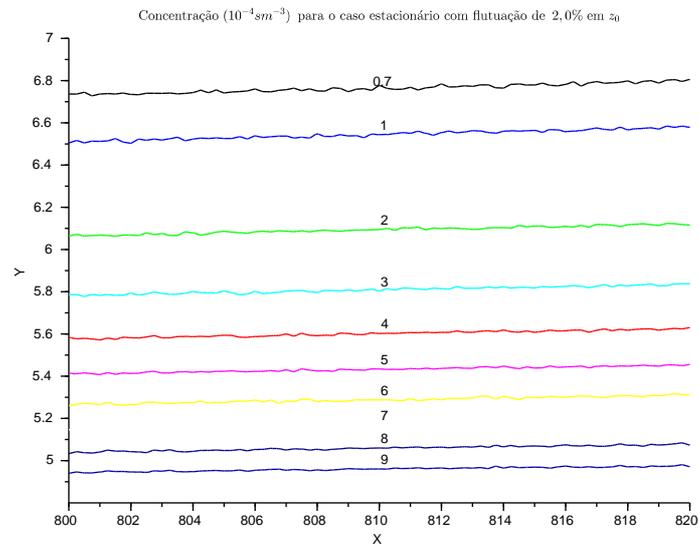


Figura 7.21: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 2,0% em z_0 .

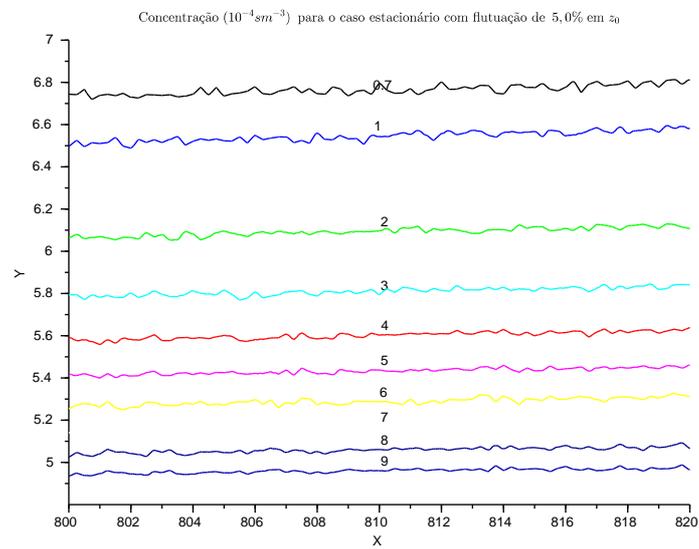


Figura 7.22: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 5,0% em z_0 .

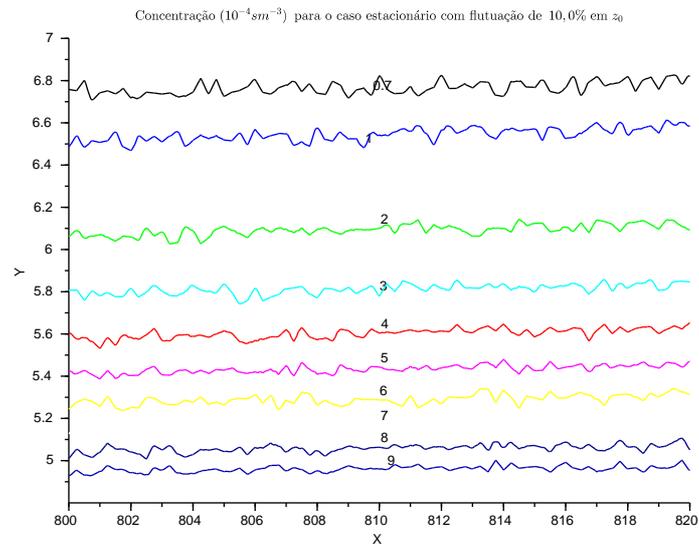


Figura 7.23: Isolinas da concentração ($10^{-4} sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em z_0 .

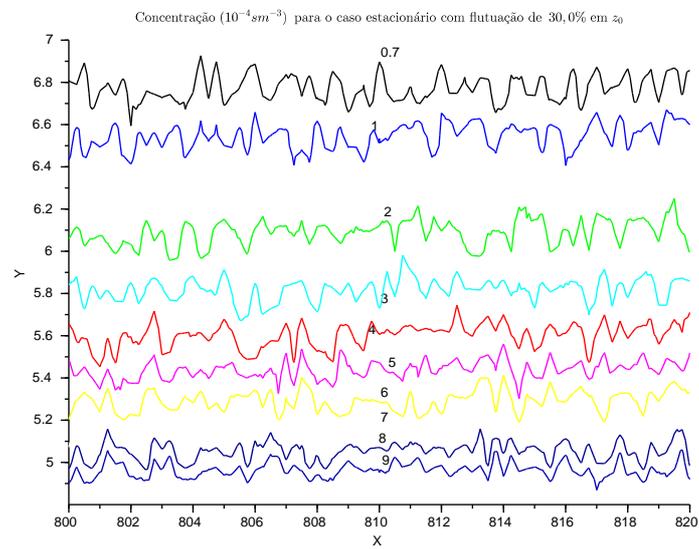


Figura 7.24: Isolinas da concentração ($10^{-4} sm^{-3}$) com flutuação de 30,0% em z_0 .

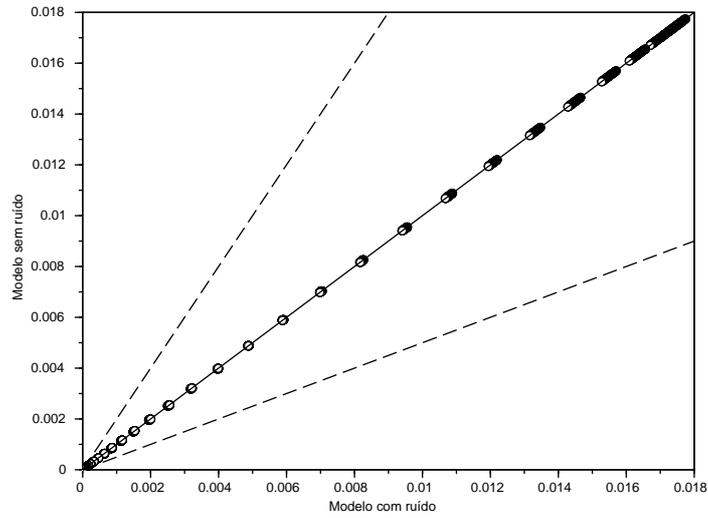


Figura 7.25: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 2,0% em z_0 para o caso estacionário.

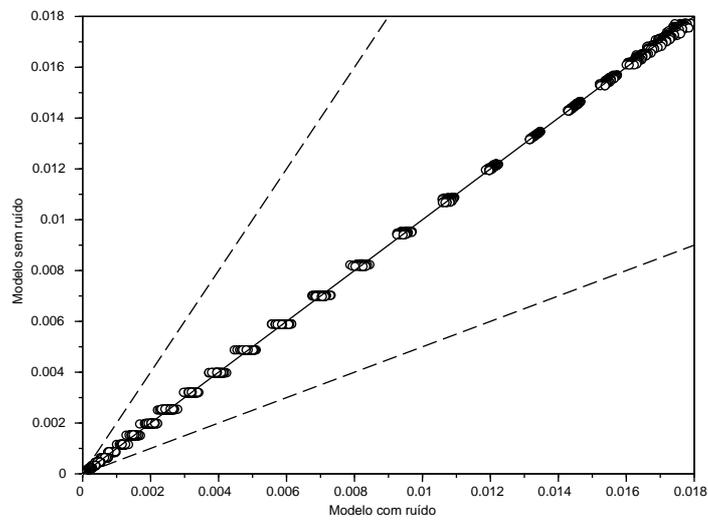


Figura 7.26: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 30,0% em z_0 para o caso estacionário.

7.1.3 Variações no coeficiente de difusão vertical K_z

Caso Transiente

No caso transiente de variações em K_z , a menor flutuação apresentada é de 10,0% de K_z . Já a maior flutuação é de 75,0% de K_z .

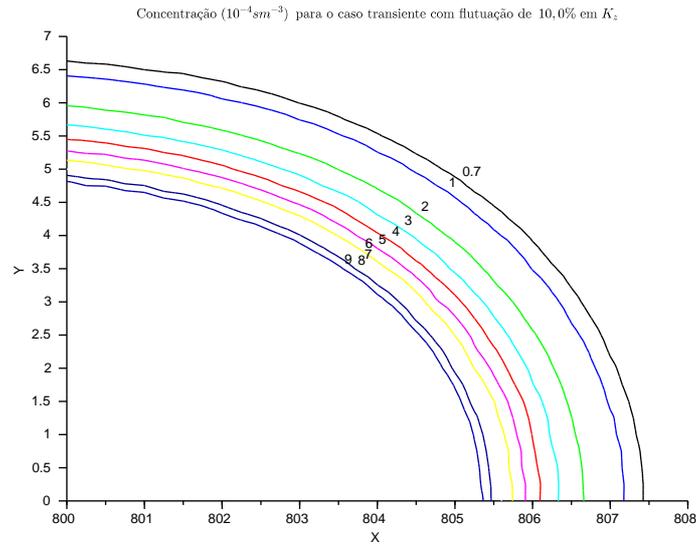


Figura 7.27: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em K_z .

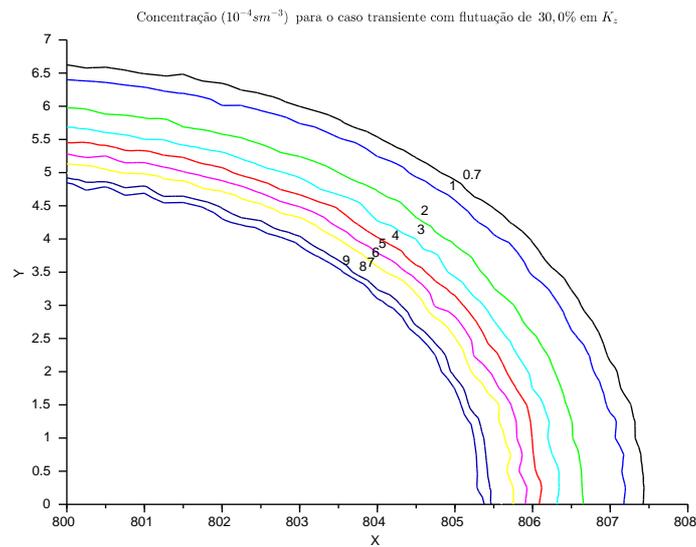


Figura 7.28: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 30,0% em K_z .

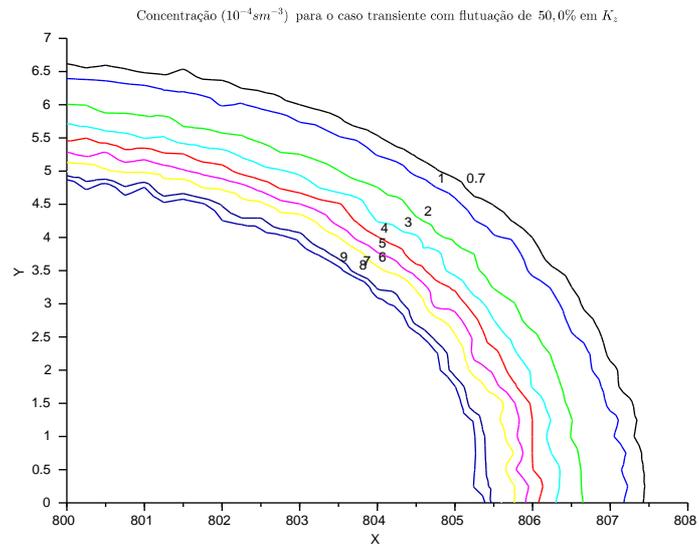


Figura 7.29: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 50,0% em K_z .

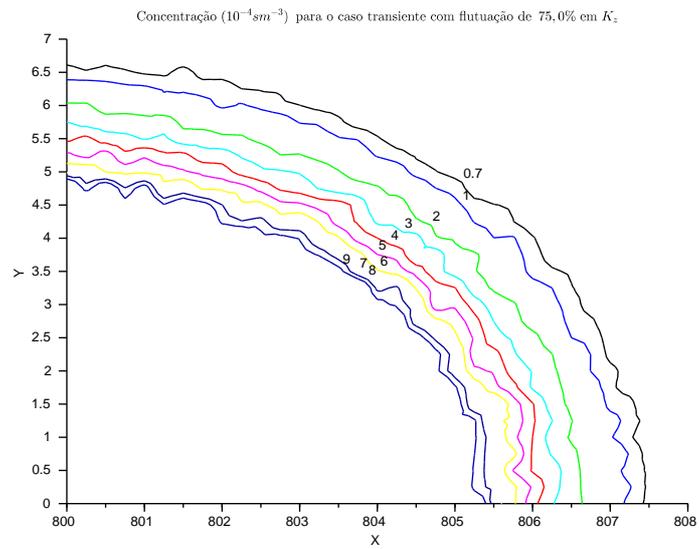


Figura 7.30: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 75,0% em K_z .

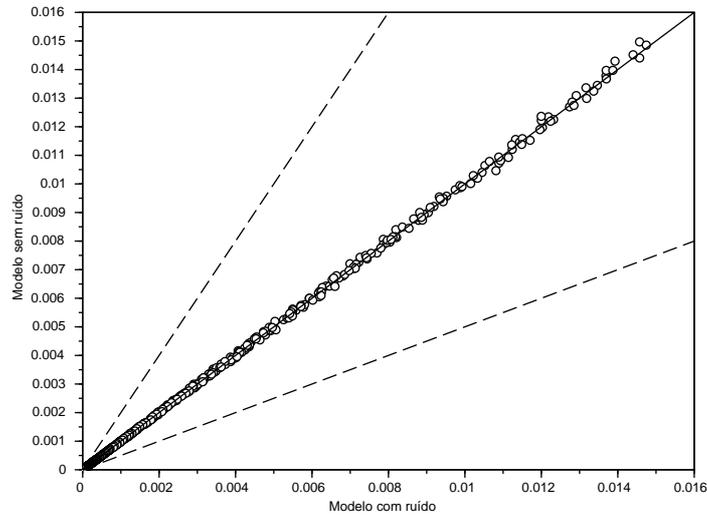


Figura 7.31: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 10,0% em K_z para o caso transitente.

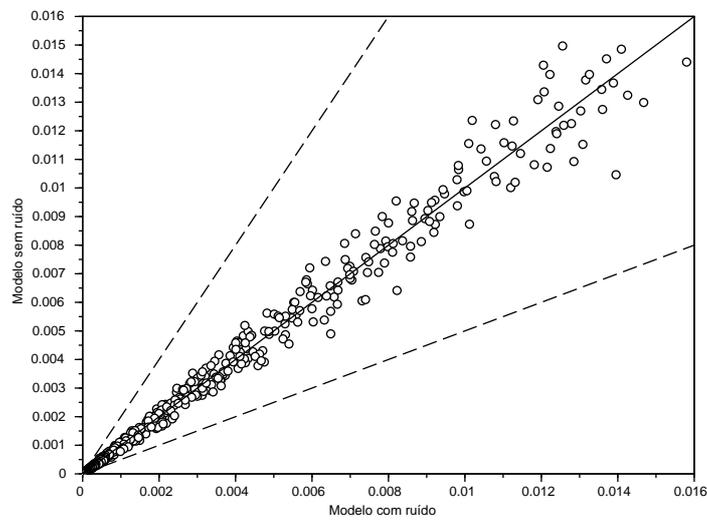


Figura 7.32: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 75,0% em K_z para o caso transitente.

Caso Estacionário

Já no caso estacionário, a menor flutuação apresentada é de 5,0% de K_z . E a maior flutuação é de 50,0% de K_z .

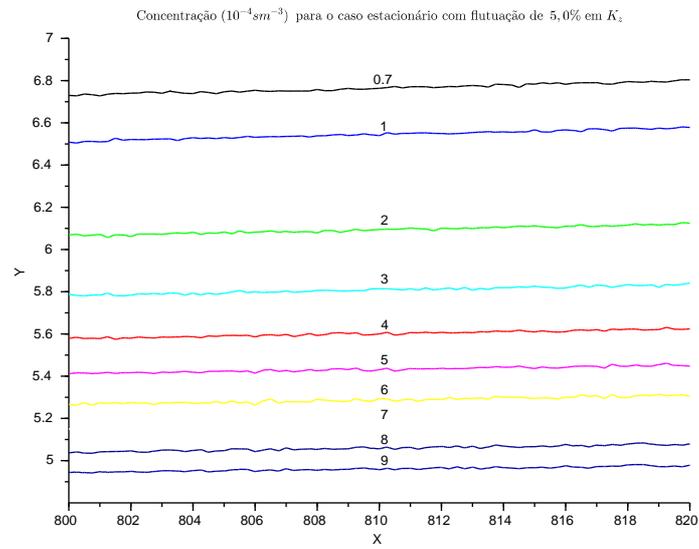


Figura 7.33: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 5,0% em K_z .

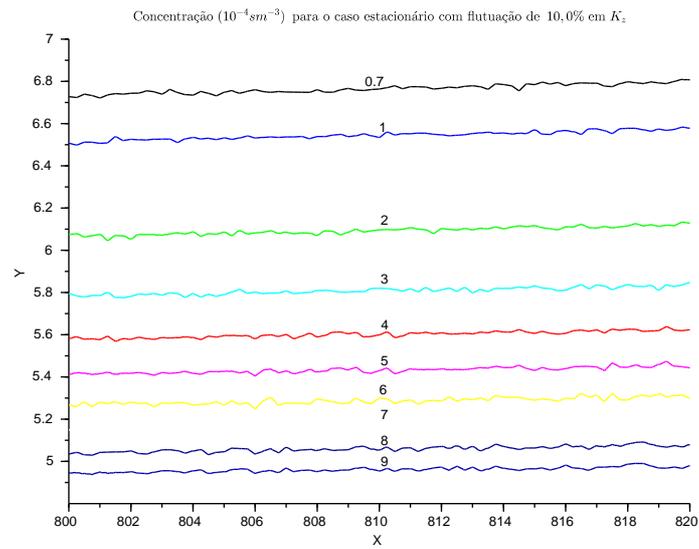


Figura 7.34: Isolinhas da concentração ($10^{-4}sm^{-3}$) com flutuação de 10,0% em K_z .

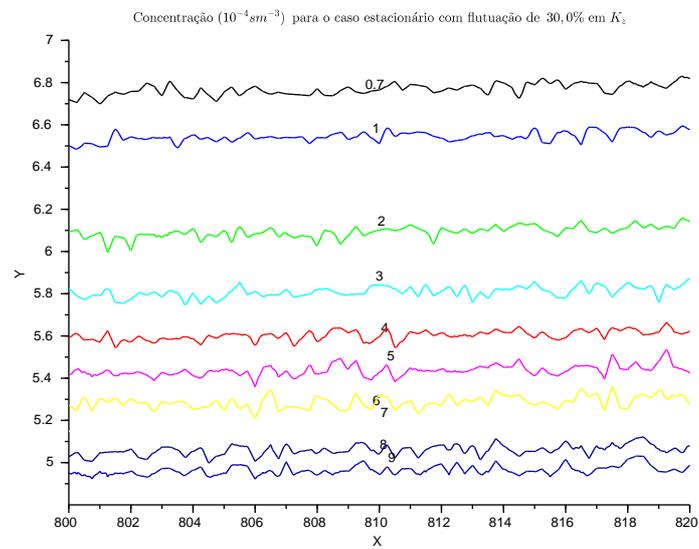


Figura 7.35: Isolinhas da concentração ($10^{-4} sm^{-3}$) com flutuação de 30,0% em K_z .

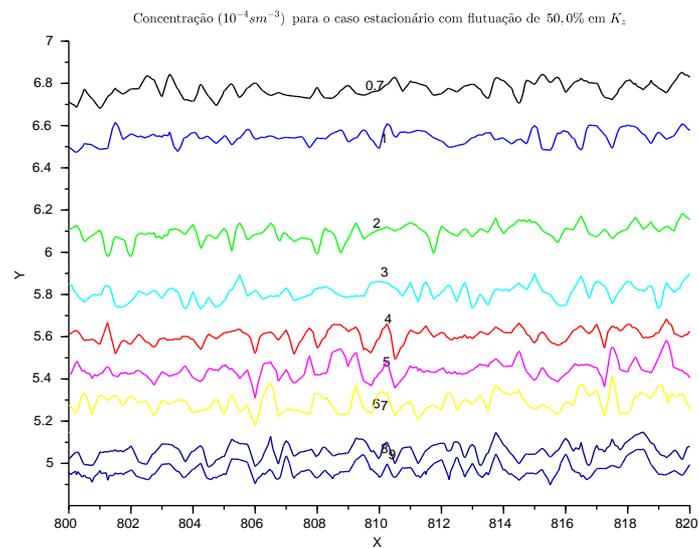


Figura 7.36: Isolinhas da concentração ($10^{-4} sm^{-3}$) com flutuação de 50,0% em K_z .

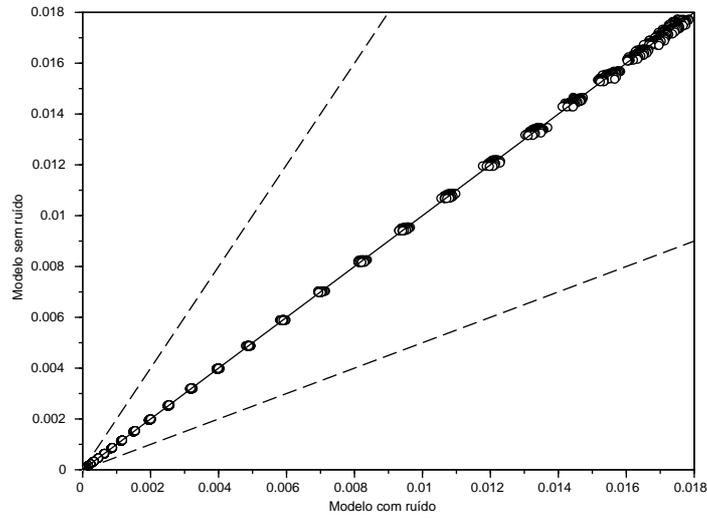


Figura 7.37: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 5,0% em K_z para o caso estacionário.

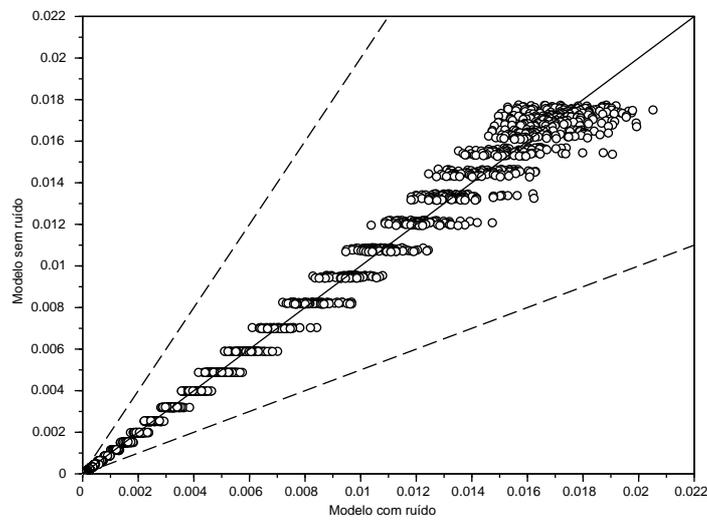


Figura 7.38: Gráfico de espalhamento das concentrações sem flutuação (sem ruído) e com flutuação (com ruído) de 50,0% em K_z para o caso estacionário.

Observando as figuras recém expostas, é possível concluir que não se deve apenas considerar os valores médios, mas também as flutuações, pois estas podem ter efeito significativo. As consequências das flutuações dependem de como o valor é calculado e qual

influência tem na solução, por exemplo, K_z aparece diretamente na equação, já z_0 aparece na equação para o perfil de velocidade do vento. A envoltória que se abre nas Figuras 7.32 e 7.38 reflete a estrutura linear do modelo.

Nas figuras de espalhamento para o caso estacionário 7.13, 7.14, 7.25, 7.26, 7.37 e 7.38 nota-se que para cada valor do modelo sem ruído existe uma distribuição para o modelo com ruído, este espalhamento ao redor da bissetriz é uma indicação de que os valores espalhados devem ser interpretados como flutuações, devido à natureza estocástica do fenômeno físico. Isto é mais um indicativo de que as flutuações podem contribuir significativamente para a modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera.

Para uma melhor visualização das flutuações foi utilizado porcentagens maiores em alguns casos estacionários em comparação com os casos transientes, isto pode ocorrer porque o transporte de flutuações ocorre no estado transiente.

O parâmetro de rugosidade z_0 tem papel fundamental quando se trata da dispersão de poluentes na atmosfera e, até o presente momento, é modelado por um valor fixo, porém esta aproximação não está correta, visto que os terrenos têm geografia irregular. Assim, ao explorar-se a sensibilidade da distribuição em relação ao modelo determinístico, pode-se utilizar engenharia reversa para determinar um z_0 mais adequado.

7.2 Condições de contorno parcialmente reflexivas

Para a simulação destes resultados, utilizou-se o conjunto completo dos experimentos de Hanford com exceção das distâncias $x = 100 m$ e $x = 200 m$, pois quanto maior a distância da fonte, maior o número de reflexões que ocorrem. Nesta seção foram calculados os índices estatísticos, comparando-se a primeira, a última e algumas reflexões intermediárias. Outras reflexões foram omitidas nas tabelas, pois não há grande variação em seus índices estatísticos.

Isto ocorre porque há a necessidade de se incluir mais reflexões quanto menor a altura a camada limite estável $z_{i,e}$, além disso, o experimento 04 possui uma altura de camada limite baixa em comparação aos demais experimentos. Desta maneira, enquanto na maioria dos experimentos as reflexões finais não contribuem mais com a concentração, para o experimento 04 estas reflexões são relevantes, mas no conjunto dos experimentos, não contribui para modificar os índices estatísticos.

Primeiramente, são apresentados os resultados de uma reflexão completa, para

fins de comparação. A segunda reflexão completa apresentou as mesmas concentrações da primeira. É possível observar que apesar de haver uma melhoria na solução com a reflexão completa, o resultado ainda não é satisfatório.

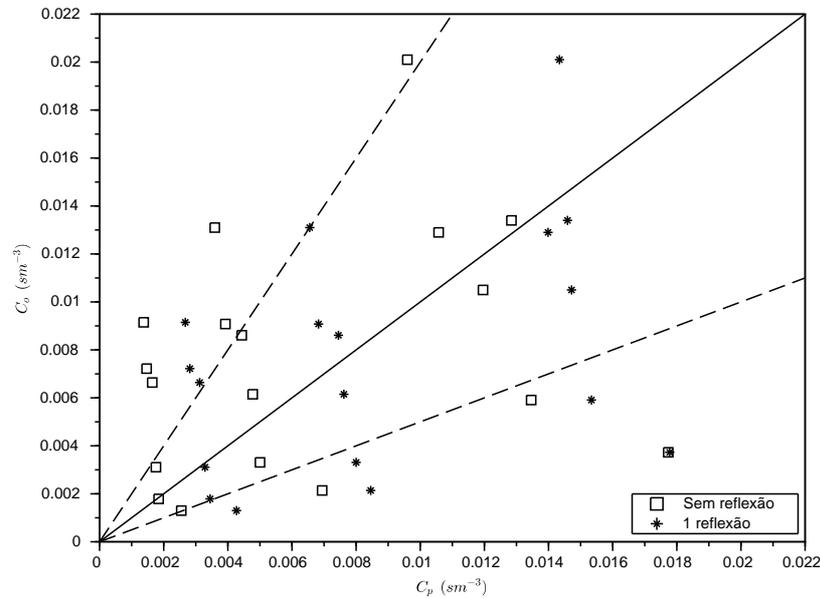


Figura 7.39: Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p sem reflexão e com uma reflexão completa.

Tabela 7.1: Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 1,0$ e $\omega_c = 1,0$ (reflexão completa).

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Sem reflexão	0,74	0,252	0,5	0,179	-0,064
Com 1 reflexão	0,452	0,379	0,556	-0,117	-0,025

A seguir, são apresentados os resultados para as reflexões parciais. Os valores utilizados para os parâmetros de reflexão no solo ω_s e na camada limite ω_c estão indicados nas legendas das figuras e das tabelas, assim como o número total de reflexões utilizado em cada caso.

Tabela 7.2: Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,005$.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Com 1 reflexão	1,235	0,517	0,5	0,733	0,775
Com 2 reflexões	0,5	0,616	0,778	0,39	0,441
Com 3 reflexões	0,271	0,69	0,778	0,204	0,279
Com 4 reflexões	0,176	0,745	0,778	0,094	0,191
Com 5 reflexões	0,129	0,783	0,833	0,023	0,137
Com 6 reflexões	0,105	0,81	0,833	-0,024	0,104
Com 7 reflexões	0,091	0,829	0,889	-0,058	0,083
Com 8 reflexões	0,082	0,842	0,889	-0,082	0,007
Com 14 reflexões	0,069	0,875	0,889	-0,143	0,051
Com 20 reflexões	0,069	0,881	0,889	-0,158	0,047
Com 30 reflexões	0,07	0,882	0,889	-0,164	0,043
Com 42 reflexões	0,071	0,882	0,889	-0,164	0,043

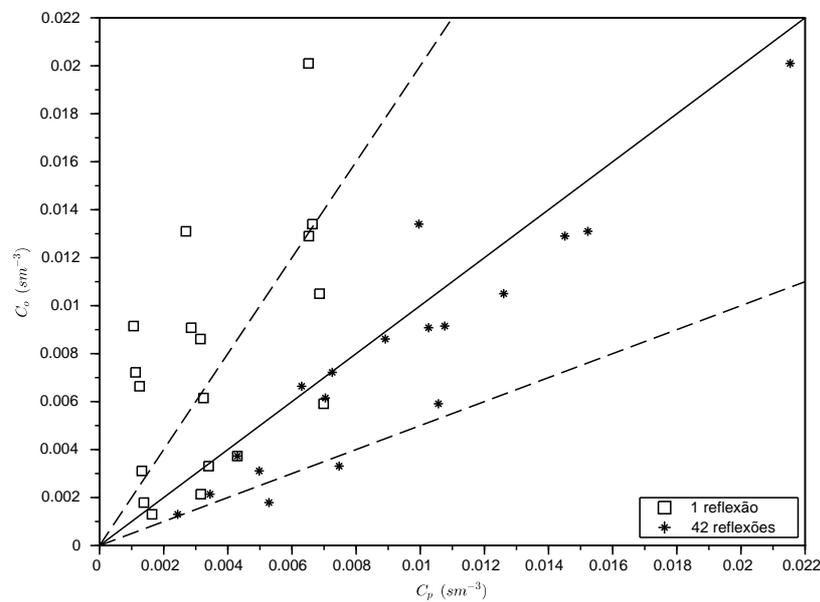


Figura 7.40: Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 42 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,005$.

Tabela 7.3: Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,01$.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Com 1 reflexão	0,391	0,659	0,778	0,322	0,362
Com 2 reflexões	0,16	0,768	0,778	0,099	0,186
Com 3 reflexões	0,098	0,821	0,833	0,002	0,118
Com 4 reflexões	0,077	0,847	0,889	-0,046	0,093
Com 10 reflexões	0,06	0,879	0,889	-0,113	0,073
Com 20 reflexões	0,061	0,88	0,889	-0,119	0,07
Com 28 reflexões	0,061	0,88	0,889	-0,119	0,07

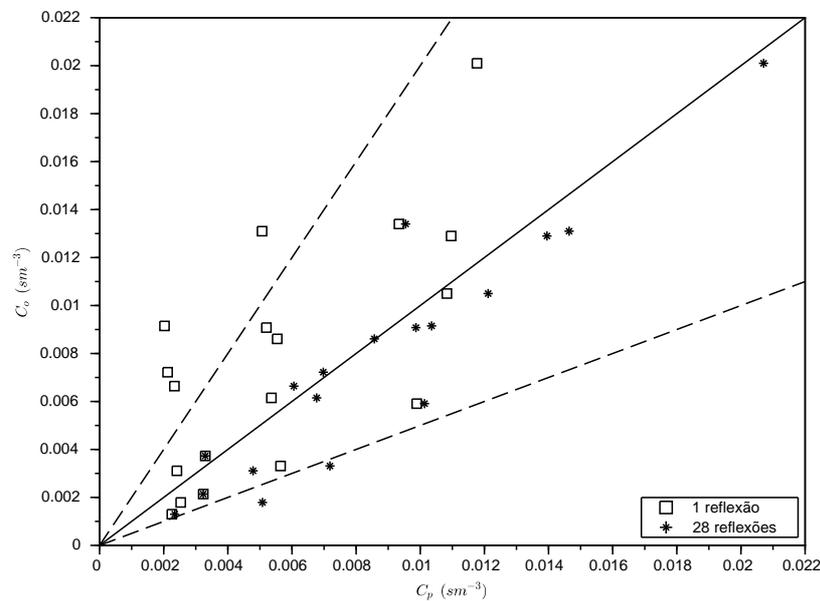


Figura 7.41: Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 28 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,05$ e $\omega_c = 0,01$.

Tabela 7.4: Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,005$.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Com 1 reflexão	1,237	0,515	0,5	0,733	0,776
Com 2 reflexões	0,501	0,615	0,778	0,39	0,442
Com 3 reflexões	0,271	0,69	0,778	0,204	0,28
Com 4 reflexões	0,176	0,745	0,778	0,094	0,192
Com 5 reflexões	0,129	0,783	0,833	0,023	0,138
Com 6 reflexões	0,105	0,81	0,833	-0,025	0,105
Com 7 reflexões	0,091	0,829	0,889	-0,058	0,084
Com 8 reflexões	0,083	0,842	0,889	-0,082	0,07
Com 14 reflexões	0,069	0,876	0,889	-0,143	0,052
Com 20 reflexões	0,069	0,881	0,889	-0,158	0,047
Com 30 reflexões	0,07	0,882	0,889	-0,163	0,044
Com 42 reflexões	0,071	0,882	0,889	-0,164	0,044

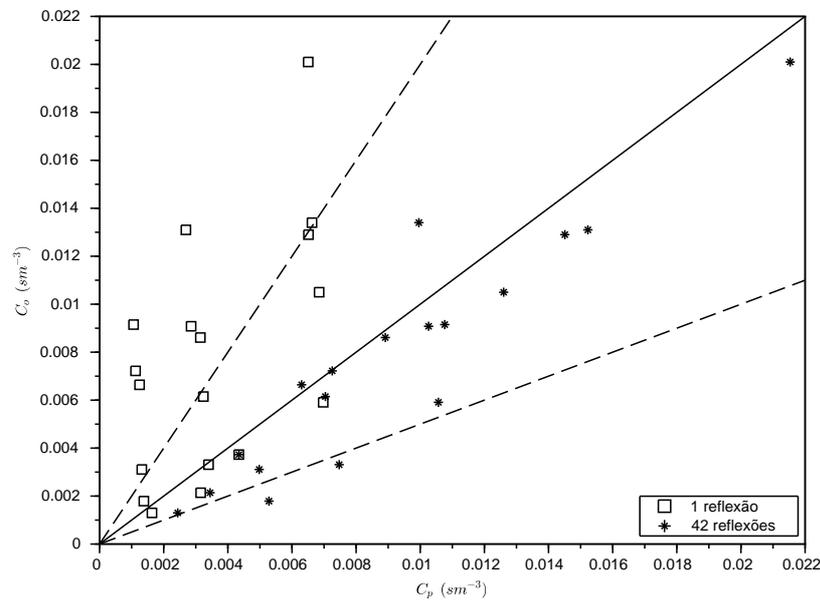


Figura 7.42: Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 42 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,005$.

Tabela 7.5: Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,01$.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Com 1 reflexão	0,391	0,659	0,778	0,322	0,364
Com 2 reflexões	0,159	0,768	0,778	0,099	0,187
Com 3 reflexões	0,098	0,82	0,833	0,002	0,119
Com 4 reflexões	0,076	0,847	0,889	-0,047	0,094
Com 10 reflexões	0,06	0,879	0,889	-0,113	0,074
Com 20 reflexões	0,061	0,88	0,889	-0,119	0,071
Com 28 reflexões	0,061	0,88	0,889	-0,119	0,071

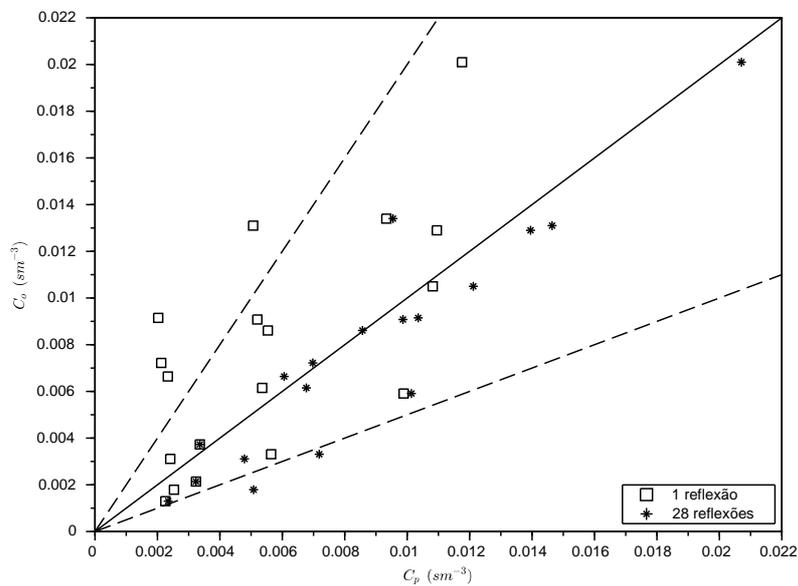


Figura 7.43: Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 28 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,1$ e $\omega_c = 0,01$.

Tabela 7.6: Avaliação estatística do modelo utilizando-se o experimento de Hanford, com $\omega_s = 0,2$ e $\omega_c = 0,01$.

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Com 1 reflexão	0,393	0,657	0,778	0,323	0,371
Com 2 reflexões	0,16	0,767	0,778	0,098	0,192
Com 3 reflexões	0,098	0,821	0,833	0,0009	0,124
Com 4 reflexões	0,077	0,848	0,889	-0,048	0,098
Com 10 reflexões	0,061	0,881	0,889	-0,115	0,077
Com 20 reflexões	0,061	0,881	0,889	-0,121	0,074
Com 28 reflexões	0,061	0,881	0,889	-0,121	0,074

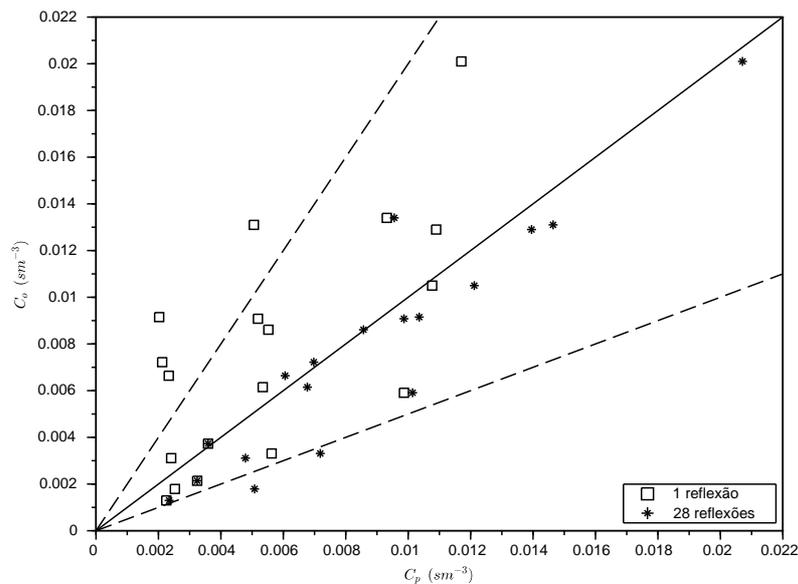


Figura 7.44: Gráfico de espalhamento das concentrações observadas C_o e previstas pelo modelo C_p com uma e 28 reflexões parciais utilizando-se os parâmetros $\omega_s = 0,2$ e $\omega_c = 0,01$.

É possível observar tanto nos índices estatísticos quanto nos gráficos de espalhamento que quando se atinge o número máximo de reflexões (após as quais não há mais contribuição nas concentrações) as concentrações obtidas estão muito próximas dos valores medidos, independentemente dos valores adotados para ω_s e ω_c . Além disso, o número de reflexões é determinado pelo parâmetro ω_c , ou seja, as reflexões na camada limite, pois ao modificar

o parâmetro ω_s o número de reflexões não alterou. Esta afirmação somente é válida para os valores de ω_s e ω_c apresentados neste trabalho, não é possível afirmar que é válido para quaisquer valores, pois estes resultados não foram simulados.

Sendo assim, os modelos que utilizam fluxo zero nos contornos ($K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$) podem estar desprezando uma parcela de concentração que geraria melhores resultados, desta forma, deve-se considerar a inclusão destas reflexões para aperfeiçoar o modelo.

8. CONCLUSÃO

Na presente dissertação, foi apresentada uma análise de efeitos estocásticos inseridos num modelo determinístico. Primeiramente analisou-se a influência de efeitos estocásticos na velocidade do vento, na rugosidade, e na difusividade turbulenta na dispersão de poluentes. Cumpre mencionar que a rugosidade influencia no perfil vertical de vento e, portanto, se manifesta indiretamente na difusividade turbulenta. Para comparação, variações na difusividade foram também analisadas. Os resultados obtidos apresentam efeitos de flutuação que podem ser considerados significativos. Estes resultados não foram comparados com dados experimentais, assim como não foi realizado o estudo de qual distribuição é mais adequada para simular o fenômeno. Assim sendo, considera-se imprescindível a continuação destes estudos.

Como segundo aspecto e consequência da presença de efeitos estocásticos no modelo determinístico, possíveis implicações nas condições de contorno da dimensão vertical foram avaliadas. Para esta finalidade, os resultados obtidos tanto para diferentes parâmetros reflexivos quanto para números de reflexões consideradas foram comparados com os dados experimentais da campanha Hanford. Em todas as realizações observa-se que com o aumento do número de reflexões e utilizando reflexividades não perfeitas, as concentrações geradas se aproximam significativamente dos dados observados. Este fato contradiz a hipótese de confinamento, onde o fluxo vertical ou as concentrações nos contornos são zero [Buske et al., 2007c]. É interessante mencionar também que o valor do índice estatístico FB é positivo para um número pequeno de reflexões e se torna sistematicamente negativo com o aumento do número de reflexões (Tabelas 7.1 a 7.6), este fato pode indicar a falta de um aspecto físico no modelo.

A autora desta dissertação está ciente do fato que a questão da estocasticidade é considerada apenas em sua forma mais simples. O quesito de qual distribuição é mais adequada e deve ser empregada para gerar as realizações estocásticas não foi discutido. Contudo, uma análise no que se refere à utilização da comparação das concentrações oriundas

do modelo determinístico com os dados experimentais, pode ser aplicada para determinar estas distribuições [Bodmann, 2013], porém ultrapassa o objetivo do presente trabalho.

Ademais, outras variações podem ser consideradas, além da variação do vento ao longo de uma dimensão, que tem relevância em cenários com vento fraco, onde o efeito meandro se manifesta. Objetiva-se estudar estas variações em trabalhos futuros.

Por fim, destaca-se a pertinência em estabelecer estudos acerca da reflexividade nos contornos, que deveriam ser determinados a partir de um modelo próprio e não imposto *ad hoc*, como utilizado no atual trabalho. Todavia, isto não invalida os resultados do trabalho apresentado, que tinha como objetivo apresentar as perspectivas que surgem quando a natureza estocástica está também presente no modelo para descrever a dispersão de poluentes na camada limite atmosférica. Deste modo, pretende-se prosseguir com trabalhos novos nesta direção.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Arya, S. P., 1999. **“Air pollution meteorology and dispersion”**. Oxford University Press, New York.

Batchelor, G. K., 1949. “Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis”, **Australian Journal of Scientific Research**, vol. 2, pp. 437–450.

Berkowicz, R. R., Olesen, H. R., and Torp, U., 1986, **“The danish gaussian air pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications”**, volume 10, pages 453–481. Plenum Publishing Corporation, New York.

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

Blackadar, A. K., 1997. **“Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences”**. Springer-Verlag.

Bodmann, B., 2013, Processos Estocásticos. Notas de aula da disciplina oferecida pelo PROMEC - Modelos determinísticos e estocásticos de dispersão em 2013/2.

Briggs, G. A., 1973, Diffusion estimation for small emissions in environmental research laboratories. Annual Report ATDL-79, USAEC, Oak Ridge, Tennessee.

Buligon, L., 2004. **“Solução da equação de advecção-difusão unidimensional transiente para o estudo da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária”**, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre.

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., 2007a, “**An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach**”, pages 27–36. *Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications*, Organized by: C. Constanda; S. Potapenko, Birkhauser, Boston.

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

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**”, pages 33–40. *Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications*, Organized by: C. Constanda; M. E. Pèrez; S. Potapenko, Birkhauser, Boston.

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

Caughey, S. J. and Palmer, S. G., 1979. “Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer”, **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, vol. 105, pp. 811–827.

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

Cirillo, M. C. and Poli, A. A., 1992. “An inter comparison of semi empirical diffusion models under low wind speed, stable conditions”, **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 765–774.

Costa, C. P., 2004. “**Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária**”, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre.

Costa, C. P., Moreira, D. M., and Vilhena, M. T., 2004. “Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na camada limite convectiva”, **Proceedings do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**.

Degrazia, G. A., Moraes, O., and Oliveira, A. P., 1995. “An analytical formulation for mixing length scales in a convective PBL”, 21th **Int. Technical Meeting on Air Pollution and its Application, 6-10 Nov. , Baltimore**.

Degrazia, G. A. and Moraes, O. L. L., 1992. “A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer”, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 58, pp. 205–214.

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., Vilhena, M. T., and Moraes, O. L. L., 1996. “An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion”, **Il Nuovo Cimento**, vol. 19C, pp. 399–403.

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

Doran, J. C., Abbey, O. B., Buck, J. W., Glover, D. W., Horst, T. W., Lee, R. N., and D., L. F., 1984, Field validation of Exposure Assessment Models. Technical Report EPA-600/S3-84/092, Data Environmental Sciences Research Lab, Research Triangle Park.

Doran, J. C. and Horst, T. W., 1985. “An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements”, **Atmospheric Environment**, vol. 19, pp. 939–951.

Ferreira Neto, P. V., 2003. “**Desenvolvimento de um modelo de dispersão de poluentes para o estudo de impacto ambiental em fontes isoladas**”, Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Ambiental, ULBRA, Canoas.

Hanna, S. R., 1989. “Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods”, **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1385–1395.

Irwin, J. S., 1979a. “Estimating plume dispersion - a recommended generalized scheme”, **Proceedings of the fourth symposium on turbulence, diffusion and air pollution - AMS**, pages 62–69.

Irwin, J. S., 1979b. “A theoretical variation of the wind profile power-law exponent as a function of surface roughness and stability”, **Atmospheric Environment**, vol. 13, pp. 191–194.

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.

Lamb, R. G., 1978. “A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective planetary boundary layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 1297–1304.

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

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

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

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. 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 Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation”, **Environmental Modelling and Software**, vol. 20, pp. 1159–1165.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., and Buske, D., 2009a, “**On the GILTT Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer**”, volume 1, pages 179–202. *Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications*, Organized by: D. Moreira; M. Vilhena, CRC Press, Boca Raton, Florida.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D., and T., T., 2009b. “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., Buske, D., and Tirabassi, T., 2006. “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., Carvalho, J. 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.

Moura, A., Vilhena, M., and Degrazia, G., 1995. “Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável”, **Proceedings do Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**.

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., 1984. “The turbulent structure of the stable, nocturnal boundary layer”, **Journal of the Atmospheric Sciences**, vol. 41, pp. 2202–2216.

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.

Nieuwstadt, F. T. M. and Van Ulden, A. P., 1978. “A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 12, pp. 2119–2124.

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

Panofsky, H. A. and Dutton, J. A., 1984. “**Atmospheric Turbulence**”. John Wiley & Sons, New York.

Pasquill, F., 1962. “**Atmospheric Diffusion**”. D. Van Nostrand Company, Ltd, London.

Pasquill, F. and Smith, F. B., 1983. “**Atmospheric Diffusion**”. Halsted Press, New York, 3 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.

Roberts, O. F. T., 1923. “The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere”, **Proceedings of the Royal Society of London**, vol. 104, pp. 640–654.

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

Sagendorf, J. F. and Dickson, C. R., 1974, Diffusion under low wind-speed, inversion conditions. Technical Memorandum ERL ARL-52, U. S. National Oceanics and Atmospherics Administration.

Scire, J. S., Strimaitis, D. G., and Yamartino, R. J., 2000, A user's guide for the CALPUFF Dispersion Model. Technical Memorandum Version 5.0, Earth Tech Inc. 196, Concord, MA, USA.

Scriven, R. A. and Fisher, B. E. 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.

Seinfeld, J. H. and Pandis, S. N., 2006. "**Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change**". John Wiley & Sons, New Jersey, 2 edition.

Sharan, M., Singh, M. P., and Yadav, A. K., 1996a. "A mathematical model for the dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance", **Atmospheric Environment**, vol. 30, pp. 1137–1145.

Sharan, M., Singh, M. P., Yadav, A. K., Agarwal, P., and Nigam, S., 1996b. "A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions", **Atmospheric Environment**, vol. 30, pp. 1209–1220.

Sharan, M. and Yadav, A. K., 1998. "Simulation of experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model", **Atmospheric Environment**, vol. 32, pp. 3481–3492.

Smith, F. B., 1957a, Convection-diffusion processes below a stable layer. Technical Report 1048, Meteorological Research Committee, London.

Smith, F. B., 1957b. "The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere", **Journal of Fluid Mechanics**, vol. 2, pp. 49–76.

Sorbjan, Z., 1986. “Local similarity of spectral and cospectral characteristics in the stable-continuous boundary layer”, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 35, pp. 257–275.

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

Taylor, G. I., 1922. “Diffusion by continuous movements”, **Proceedings of the London Mathematical Society**, vol. 20, pp. 196–212.

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

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 In Press.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1992. “An analytical model for a screen evaluation of the environmental impact from a single point source”, **Il Nuovo Cimento**, vol. 15c, pp. 181–190.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1993. “An air pollution model for complex terrain”, **Proceeding of Air Pollution Conference, Monterrey, México**, pages 149–156.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1995. “A practical model for the dispersion of skewed puffs”, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 34, pp. 989–993.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1997. “Boundary layer parameterization for a non-Gaussian puff model”, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 36, pp. 1031–1037.

Tirabassi, T., Tagliazucca, M., and Paggi, P., 1989. “A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 857–862.

Tirabassi, T., Tagliazucca, M., and Zannetti, P., 1986. “A non-Gaussian plume dispersion model: description and evaluation against tracer measurements”, **JAPCA**, vol. 36, pp. 592–596.

Tirabassi, T., Tiesi, A., Buske, D., Vilhena, M. T., and Moreira, D. M., 2009. “Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection-diffusion equation”, **Atmospheric Environment**, vol. 43, pp. 2221–2227.

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

Van Ulden, A. P., 1992. “A surface layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground”, **Atmospheric Environment**, vol. 26A, pp. 681–692.

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

Weil, J. C. and Brower, R. P., 1984. “An update gaussian plume model for tall stacks”, **JAPCA**, vol. 34, pp. 818–827.

Wortmann, S., Vilhena, M. T., Moreira, D., and Buske, D., 2005. “A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL”, **Atmospheric Environment**, vol. 39, 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.

Zannetti, P., 1990. “**Air Pollution Modeling**”. Springer Science Bussiness Media, New York.

Zilitinkevich, S. S., 1972. “On the determination of the height of the Ekman boundary layer”, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 3, pp. 141–145.