

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

SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE
PLANETÁRIA: UM MODELO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO

por

Debora Lidia Gisch

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Junho de 2018

SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA LIMITE
PLANETÁRIA: UM MODELO DETERMINÍSTICO-ESTOCÁSTICO

por

Debora Lidia Gisch
Mestre em Engenharia Mecânica

Tese 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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann

Aprovada por:

Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia : PPGFISICA / UFSM

Prof. Dr. Guilherme Jahnecke Weymar PPGMM / UFPel

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho PPGMM / UFPel

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 15 Junho de 2018

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor Bardo Bodmann que me apoiou em todos os momentos, me orientou e compartilhou o seu conhecimento comigo contribuindo para a realização deste trabalho e para a formação de uma nova pesquisadora. Também agradeço ao professor Marco Vilhena por ter me oferecido a oportunidade de participar do grupo de pesquisa que tenho tanto orgulho. Aproveito para agradecer aos meus colegas que foram uma peça importante onde ajudas, conselhos, trocas de ideias e o companheirismo estiveram sempre presente.

A Linhares Geração SA e a Tevisa SA pelo suporte financeiro dado através de bolsas do programa de P&D Aneel. Além disso construíram um *cluster*, infraestrutura imprescindível para a simulação dos modelos de forma otimizada.

A CMPC Celulose Riograndense, agradeço por fornecer dados para validação do modelo de dispersão de poluentes, informações valiosas para o desenvolvimento de novas propostas de modelos.

Ao PROMEC e a UFRGS pela oportunidade de fazer o doutorado em um programa conceituado de uma universidade renomada que possui um ensino de alto nível e gratuito. Também agradeço o aporte financeiro oferecido pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

A minha família agradeço por todo o apoio para realizar meu sonho, ao meu esposo por estar ao meu lado em todos os momentos e sempre com um discurso otimista que deixava minha vida mais leve para continuar a enfrentar os desafios de cabeça erguida.

RESUMO

Questões ambientais estão no centro das discussões nas últimas décadas. A poluição atmosférica, causada pela expansão pós-revolução industrial fez surgir a necessidade de aprender a descrever, usando modelos matemáticos, esse fenômeno. Com esse conhecimento pode-se propor soluções que mitiguem a poluição e os danos colaterais causados ao ambiente. A dispersão de poluentes modelada por soluções analíticas, a partir das equações de advecção-difusão oferecem um conhecimento sobre cada componente que constrói a equação, característica inexistente em outras abordagens, como a numérica. Entretanto ela era incapaz de descrever propriedades que se referem à turbulência, as estruturas coerentes, causadas por componentes não-lineares suprimidas por construção das equações governantes do modelo. Este trabalho estudou uma forma de recuperar características associadas à turbulência através de uma componente fundamental em estruturas coerentes, a fase. Essa é incluída no modelo que passa a descrever manifestações da turbulência em processos de dispersão através de flutuações de pequena escala na concentração da solução do modelo sesquilinear, que é determinístico-estocástico. No decorrer do trabalho há um estudo através de variações de parâmetros para compreender os efeitos da fase no modelo. Ele também foi aplicado ao experimento de Copenhague e a dois cenários reais com a intenção de compreender o modelo frente à variáveis micrometeorológicas assim como aprimorá-lo para simular a dispersão de poluentes oriundos de fontes de forma realística.

Palavras-chave: Dispersão de Poluentes; Equação de Advecção-Difusão; Estruturas Coerentes; Modelo Determinístico-Estocástico.

ABSTRACT

Environmental issues have been at the center of discussions in the last few decades. Atmospheric pollution, caused by post-industrial revolution, has increased the necessity to describe, using mathematical models, this phenomenon. With this knowledge is possible to propose solutions mitigating the pollution and collateral damages caused in the environment. The pollutant dispersion modeled by analytical solutions, from advection-diffusion equations, offers a knowledge about each component that constructs the equation, a characteristic that does not exist in other approaches, such as numerical. However it was unable to describe properties that refer to turbulence, coherent structures, caused by non-linear components suppressed by constructing the model governing equations. This work studied a way to recover characteristics associated with turbulence through a fundamental component in coherent structures, the phase. This is included in the model which describes manifestations of turbulence in the dispersion process through the presence of small-scale concentration fluctuations in the sesquilinear model, which is deterministic-stochastic. In the course of this work there is a study through variations of parameters to understand the phase effects in the model. It was also applied to Copenhagen experiment and to two real scenarios with the intention of understanding the model regarding micrometeorological variables as well as improving it to simulate the pollutant dispersion from sources in a realistic way.

Keywords: Pollutant Dispersion; Advection-Diffusion Equation; Deterministic-Stochastic; Coherent Structures.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão Bibliográfica	3
1.2	Objetivos	10
1.3	Organização do Trabalho	10
2	ATMOSFERA TERRESTRE	12
2.1	Estratos da Atmosfera Terrestre	12
2.1.1	Exosfera	12
2.1.2	Termosfera	13
2.1.3	Mesosfera	13
2.1.4	Estratosfera	13
2.1.5	Troposfera	14
2.2	Camada Limite Planetária	15
2.2.1	Camada Limite Convectiva	16
2.2.2	Camada Residual Noturna	17
2.2.3	Camada Limite Estável	17
2.3	Regimes de Estabilidade da Atmosfera	18
3	TURBULÊNCIA E AS ESTRUTURAS COERENTES	21
3.1	Interpretação Física de um Parâmetro Complexo	23
4	EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO	27
4.1	A Equação de Advecção-Difusão Simplificada	27
4.2	Solução da Equação Advecção-Difusão Simplificada	30
4.3	Interpretação das Integrais Resultantes da Convolução	39
4.4	Reintrodução da Não-Linearidade	40
4.5	Condições de Fonte	43
4.5.1	Fonte Delta	43
4.5.2	Fonte Gaussiana	43

4.6	Parametrização da Turbulência	45
4.6.1	Perfil Trigonométrico Simétrico	45
4.6.2	Perfil Trigonométrico de CLE	45
4.6.3	Perfil Trigonométrico de CLC	45
4.6.4	Perfis por Aproximantes de PADÉ	46
5	AVALIAÇÃO DO MODELO SESQUILINEAR	48
5.1	Experimento de Copenhagen	49
5.2	Cenário Linhares Geração S.A.	51
5.2.1	A Usina Termoelétrica	53
5.3	Cenário CMPC Celulose Riograndense	55
5.3.1	A Indústria de Celulose	58
5.3.2	Dados Micrometeorológicos da CMPC para o Modelo	60
5.4	Indicadores Estatísticos	66
5.4.1	Erro Quadrático Médio Normalizado	67
5.4.2	Correlação	67
5.4.3	Desvio Padrão Fracional	67
6	RESULTADOS	68
6.1	O Modelo Sesquilinear e seu Comportamento	69
6.1.1	Comparação do Modelo com K_z Real e Complexo	70
6.1.2	Comportamento do Modelo ao Variar o Coeficiente Vertical K_z	72
6.1.3	Comportamento do Modelo ao Variar Coeficiente Transversal K_y	75
6.1.4	Avaliando a Concentração ao Longo Eixo x	77
6.1.5	A Velocidade e o Meandro para Baixas Velocidades	79
6.1.6	Comportamento da Distribuição Frente a Mudança de Perfil do Coeficiente Vertical	82
6.2	Aplicação do Modelo ao Experimento de Copenhagen	88
6.2.1	Avaliação do Comportamento K_{za} e K_{zb}	88
6.2.2	Exploração dos Dados Micrometeorológicos do Experimento de Copenhagen	90
6.2.3	Análise do Modelo Sesquilinear com o Perfil Vertical Simétrico	94
6.2.4	Experimento de Copenhagen aplicado ao Perfil Trigonométrico CLC	102

6.3	Gradiente de Concentração da Termoelétrica Linhares S.A Simulado em Diferentes Condições de Fonte	103
6.4	Simulações da Indústria Celulose Riograndense CMPC	114
7	CONCLUSÕES	124
7.1	Sugestões para Trabalhos Futuros	127
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	128
APÊNDICE A	Dados Micrometeorológicos Termoelétrica Linhares SA.	139
APÊNDICE B	Dados Micrometeorológicos CMPC Celulose Riograndense	141

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Estratificação da atmosfera segundo o perfil de temperatura absoluta. [Adaptado de Arya, 1999]	14
Figura 2.2	Estrutura da troposfera que contém a CLP. [Adaptado de Stull, 1988]	15
Figura 2.3	Evolução temporal da CLP no período de um dia. [Adaptado de Stull, 1988]	16
Figura 2.4	Forma da pluma de acordo com a estabilidade da atmosfera. [Adaptado de Arya, 1999]	19
Figura 3.1	Esquema de vórtices turbulentos em grande escala onde a escala de comprimento horizontal é muito maior que a altura. [Adaptado de Ghidaoui e Lam, 2013]	22
Figura 3.2	Espaço-tempo.	25
Figura 4.1	Perfis da parte real do coeficiente de difusão turbulenta assumindo $K_{za} = 1$	47
Figura 5.1	Representação esquemática do experimento de Copenhagen. [Fonte: Gryning e Lyck, 2002]	49
Figura 5.2	Unidades de conservação de Linhares - ES. [Dados obtidos em MMA-Geoprocessamento, 2018]	52
Figura 5.3	Áreas prioritárias para conservação de Linhares - ES. Essas áreas prioritárias foram o resultados da 1ª atualização - foram reconhecidas mediante portaria N°9, de 23 de janeiro de 2007. [Dados obtidos em MMA-AP, 2007]	53
Figura 5.4	Imagens da usina Linhares S.A., um dos cenários de simulação deste modelo. [Fonte: Programa do <i>Google Earth</i>]	54
Figura 5.5	Altitude do terreno no entorno da usina com a localização da altura das fontes e da usina frente ao relevo da região. Dados retirado do perfil de elevação fornecido pelo <i>Google Earth</i> com uma resolução de 500 m x 500 m. A escala máxima da altitude é 27 metros, já a de x e y 15 mil metros cada.	55

Figura 5.6	Unidades de conservação no entorno da Celulose Riograndense. [Dados obtidos em SEMA, 2018]	57
Figura 5.7	Áreas prioritárias para conservação no entorno da Celulose Riograndense no bioma Pampa. As áreas prioritárias são os resultados da 1ª atualização - foram reconhecidas mediante Portaria N°9, de 23 de janeiro de 2007. [Dados obtidos em MMA-AP, 2007]	58
Figura 5.8	Região de 36 km ² no entorno da CMPC Celulose Riograndense. . .	59
Figura 5.9	Variação da velocidade u (m/s) no conjunto de 34h.	60
Figura 5.10	Variação da altura z_i (m) no conjunto de 34h.	61
Figura 5.11	Distribuição de velocidade para o período de 34h na região da CMPC.	62
Figura 5.12	Variação da velocidade u (m/s) no conjunto de 43h contínuas. . .	62
Figura 5.13	Variação da altura z_i (m) nas 43h.	63
Figura 5.14	Distribuição de velocidade para o período de 43h na região da CMPC.	64
Figura 5.15	Variação da velocidade u (m/s) nas 29h contínuas.	65
Figura 5.16	Variação da altura z_i (m) nas 29h.	65
Figura 5.17	Distribuição da velocidade para o período de 29h na região da CMPC.	66
Figura 6.1	Distribuição da concentração com 5 mil, 10 mil e 15 mil auto- valores para fonte delta.	68
Figura 6.2	Esquema espacial do modelo sesquilinear onde $y_p = 0,1$ (m) é a distância entre as fontes.	70
Figura 6.3	Comparação da distribuição da concentração em $x = 5$ (m) para modelo com K_z real e K_z complexo, com e sem a presença da fase.	71
Figura 6.4	Distribuição da concentração vinculado ao aumento da parte real de K_z onde $K_{zb} = 0$, $x = 10$ (m) e $t = 14$ (s).	73

Figura 6.5	Mapa da distribuição em $C(y, z)$ (g/m^3) mostra aumento da distribuição da concentração vinculado ao aumento tanto para a parte real e a imaginária de K_z para K_{zb} diferentes onde $x = 10$ (m) e $t = 14$ (s).	74
Figura 6.6	Variação do coeficiente transversal K_y para dois valores diferentes em $x = 10$ (m) no modelo sem introdução da fase.	75
Figura 6.7	Variação do coeficiente transversal K_y para dois valores diferentes em $x = 10$ (m) no modelo com introdução da fase.	76
Figura 6.8	Distribuições espaciais temporais $C(x, t)$ para comparar dois valores para o coeficiente transversal K_y avaliados em três alturas diferentes.	77
Figura 6.9	Avaliação do comportamento do modelo durante o afastamento longitudinal da fonte.	78
Figura 6.10	Distribuição da concentração para velocidade de vento fraco.	80
Figura 6.11	Distribuição da concentração para velocidade de vento forte.	81
Figura 6.12	Distribuições de concentração $C(x,y)$ aplicando perfil de comportamento simétrico, Equação 4.131 para tempos e alturas diferentes.	83
Figura 6.13	Distribuições de concentração $C(x,y)$ aplicando perfil de características de CLE, Equação 4.132, para tempos e alturas diferentes.	85
Figura 6.14	Distribuições de concentração $C(x,y)$ aplicando perfil de características de CLC, Equação 4.133, para tempos e alturas diferentes.	87
Figura 6.15	Comportamento do modelo ao variar o parâmetro, K_{za} da parte real, do coeficiente de difusão da Equação 4.131 aplicado ao experimento 9 de Copenhagen.	89
Figura 6.16	Comportamento do modelo ao variar o parâmetro, K_{zb} da parte complexa, do coeficiente de difusão da Equação 4.131 aplicado ao experimento 9 de Copenhagen.	90
Figura 6.17	Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhagen de convecção alta.	91

Figura 6.18	Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhagen de convecção baixa.	92
Figura 6.19	Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhagen de convecção moderada.	93
Figura 6.20	Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhagen considerando casos convecção alta (CA) e baixa (CB).	94
Figura 6.21	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p), para o experimento de Copenhagen sem a fase ($Kzb = 0$) em preto e com a fase ($Kzb \neq 0$) em azul. O número indica qual dos nove experimentos ele representa.	99
Figura 6.22	Isolinhas do comportamento K_{za} e K_{zb} vinculado ao mínimo quadrado do experimento 6 de Copenhagen de convecção baixa.	100
Figura 6.23	Isolinhas do comportamento K_{za} e K_{zb} vinculado ao mínimo quadrado do experimento 3 de Copenhagen de convecção alta.	101
Figura 6.24	Isolinhas do comportamento K_{za} e K_{zb} vinculado ao mínimo quadrado do experimento 9 de Copenhagen de convecção moderada.	102
Figura 6.25	Varição da velocidade u (m/s) nas 90h de simulação.	104
Figura 6.26	Varição da altura z_i (m/s) nas 90h de simulação.	105
Figura 6.27	Distribuição das velocidades para o período de 90h de simulação do cenário de Linhares Geração S. A.	106
Figura 6.28	Gráficos das três primeiras horas de simulação do poluente SO_2 para fonte delta onde há regime de CLE.	108
Figura 6.29	Gráficos de três horas consecutivas de simulação SO_2 onde condição camada limite convectiva para fonte delta.	109
Figura 6.30	Média da concentração de poluente SO_2 para as 90h de simulação com fonte delta.	110
Figura 6.31	Gráficos das três primeiras horas de simulação do poluente SO_2	112
Figura 6.32	Gráficos de três horas consecutivas de simulação SO_2 onde condição camada limite convectiva.	113
Figura 6.33	Média da concentração de poluente SO_2 para as 90h de simulação.	114

Figura 6.34	Taxa de emissão da fonte normalizada vinculada ao aumento do número de autovalores.	115
Figura 6.35	Representação espacial do esquema da condição imposta à direção do vento para a escolha das 20 medições de CLE e CLC. . .	116
Figura 6.36	Mapas de calor de $\frac{COR}{NMSE}$ em regime CLE e CLC. Mostra quais regiões possuem bons parâmetros do coeficiente vertical em ambos regimes.	117

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1	Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen. [Fonte: Gryning e Lyck, 1984]	50
Tabela 5.2	Dados das fontes da Usina Termoelétrica de Linhares S.A.	54
Tabela 5.3	Dados das fontes da CMPC Celulose Riograndense.	59
Tabela 6.1	Autovalores <i>versus</i> Tempo Computacional em programas se- rial e paralelo.	68
Tabela 6.2	Valores dos parâmetros usados nas simulações para investigar o comportamento das soluções.	69
Tabela 6.3	Parâmetros do coeficiente de difusão, dado pela Equação 4.131, que obtiveram os melhores valores através do método de míni- mos quadrados (M. Q.). Onde os experimentos de Copenha- gen (EXP) foram classificados em regime de convecção alta, moderada e baixa (CA, CM e CB). Assumindo o modelo sem a fase ($K_{zb} = 0$).	95
Tabela 6.4	Parâmetros do coeficiente de difusão, dado pela Equação 4.131, que obtiveram os melhores valores através do método de míni- mos quadrados (M. Q.). Onde os experimentos de Copenha- gen (EXP) foram classificados em regime de convecção alta, moderada e baixa (CA, CM e CB) onde (P) é o padrão (Res- peita - R, Não Respeita - NR e Indefinido - IND), onde inde- finido corresponde aos experimentos de convecção moderada.	96
Tabela 6.5	Valores de concentração para comparação dos resultados ob- servados pelo experimento de Copenhagen Gryning e Lyck, 1984, com os preditos pelo modelo sesquilinear sem fase ($K_{zb} =$ 0) e com a fase ($K_{zb} \neq 0$).	97
Tabela 6.6	Comparação dos índices estatísticos para a simulação do ex- perimento de Copenhagen sem ($K_{zb} = 0$) e com ($K_{zb} \neq 0$) a fase.	98

Tabela 6.7	Parâmetros que obtiveram melhor valor de mínimo quadrado para os experimentos de Copenhagem através do modelo sequilinear. Para o coeficiente vertical dado pela expressão 4.133. Assumindo o modelo sem a fase ($K_{zb} = 0$).	103
Tabela 6.8	Parâmetros que obtiveram melhor valor de mínimo quadrado para os experimentos de Copenhagem através do modelo sequilinear. Para o coeficiente vertical dado pela expressão 4.133 com a presença da fase ($K_{zb} \neq 0$).	103
Tabela 6.9	Índices estatísticos para os casos I, II e III sem a inclusão da fase.	118
Tabela 6.10	Índices estatísticos para os casos I, II e III com a inclusão da fase.	118
Tabela 6.11	Média das Variáveis Meteorológicas para os Casos I, II e III.	119
Tabela 6.12	Índices estatísticos para o caso I com o coeficiente de difusão vertical variando no tempo.	120
Tabela 6.13	Dados micrometeorológicos, parâmetros dos coeficientes verticais K_z variáveis no tempo onde seu perfil depende do regime e a concentração observada e a prevista pelo modelo do caso I.	121
Tabela 6.14	Relação de significância dos parâmetros do coeficiente vertical variável no tempo, K_{za} e K_{zb} , com as variáveis meteorológicas do caso I.	122
Tabela 6.15	A relação de significância dos parâmetros do coeficiente vertical variável no tempo, K_{za} e K_{zb} no regime CLC, com as variáveis meteorológicas do caso I.	123
Tabela 6.16	Relação de significância dos parâmetros do coeficiente vertical variável no tempo, K_{za} e K_{zb} no regime CLE, com as variáveis meteorológicas do caso I.	123
Tabela A.1	Dados micrometeorológicos usados no modelo para as 90h contínuas no período (01/04/2011 00:00 até 04/04/2011 17:00).	139
Tabela B.1	Dados micrometeorológicos da 20 medições em regime CLE onde a direção do vento era de até 2,5 graus da estação que se encontra aproximadamente 156,5°.	141

Tabela B.2	Dados micrometeorológicos da 20 medições em regime CLC onde a direção do vento era de até 2,5 graus da estação que se encontra aproximadamente 156,5°	142
Tabela B.3	Dados micrometeorológicos Caso I de 34h contínuas, fornecidos pela estação de monitoramento da CMPC Celulose Riograndense no período de (19/03/2016 20h até 21/03/2016 05h). . .	143
Tabela B.4	Dados micrometeorológicos Caso II de 43h contínuas, fornecidos pela estação de monitoramento da CMPC Celulose Riograndense no período de (19/03/2016 20h até 21/03/2016 05h). . .	144
Tabela B.5	Dados micrometeorológicos Caso III de 29h contínuas, fornecidos pela estação de monitoramento da CMPC Celulose Riograndense no período de (25/10/2016 03h até 26/10/2016 07h).	145

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ADMM	<i>Advection Diffusion Multilayer Method</i> API
CA	Convecção Alta
CB	Convecção Baixa
CITT	<i>Classic Integral Transform Technique</i>
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLN	Camada Limite Noturna
CLP	Camada Limite Planetária
CLR	Camada Limite Residual
CLS	Camada Limite Superficial
CM	Convecção Moderada
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
Cor	Coefficiente de Correlação
CSs	<i>Coherent Structures</i>
ECs	Estruturas Coerentes
EDO	Equação Diferencial Ordinária
FS	Desvio Padrão Fracional
GILTT	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
GITT	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
MMA	Ministério do Meio Ambiente
NMSE	Erro Quadrático Médio Normalizado
SF_6	Hexafluoreto de Enxofre
USEPA	Agência Americana de Proteção Ambiental
PROMEC	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
SEMA	Secretaria do Ambiente e Desenvolvimento Sustentável - RS
TRS	<i>Total Reduced Sulphur</i>
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

C	Concentração média de poluente, g/m^3
\mathcal{C}	Concentração média com coeficiente difusivo em z complexo
\mathcal{C}^*	Concentração com coeficiente difusivo em z complexo conjugado
c	Velocidade da luz, (m/s)
C_o	Concentrações observadas experimentalmente
C_p	Concentrações previstas pelo modelo
c_p	Calor específico do ar a pressão constante, J/kgK
D_y	Delta de Dirac das três fontes na direção, y
D_L	Coefficiente de difusão laminar
D_z	Delta de Dirac das três fontes na direção, z
DV	Direção do vento onde 0° é vento vindo do Norte, $^\circ$
G	Fluxo de calor W/m^2 g
H_s	Altura da fonte, m
y_f	Posição da fonte na coordenada y , m
K_x	Coefficiente de difusão na direção x , m^2/s
K_{xc}	Coefficiente de difusão na direção x na CLC, m^2/s
K_{xe}	Coefficiente de difusão na direção x na CLE, m^2/s
K_y	Coefficiente de difusão na direção y , m^2/s
K_{yc}	Coefficiente de difusão na direção y na CLC, m^2/s
K_{ye}	Coefficiente de difusão na direção y na CLE, m^2/s
K_z	Coefficiente de difusão na direção z , m^2/s
K_{za}	Parte real do coeficiente de difusão na direção z
K_{zac}	Parte real do coeficiente de difusão na direção z na CLC
K_{zae}	Parte real do coeficiente de difusão na direção z na CLE
K_{zb}	Parte complexa do coeficiente de difusão na direção z
K_{zbc}	Parte complexa do coeficiente de difusão na direção z na CLC
K_{zbe}	Parte complexa do coeficiente de difusão na direção z na CLE
L	Comprimento de Monin-Obukhov, m
ℓ	Comprimento de onda m

\mathcal{L}	Transformada de Laplace
\mathcal{L}^{-1}	Transformada de Laplace inversa
L_x	Limite do domínio em x , m
L_y	Limite do domínio em y , m
L_z	Limite do domínio em z , m
p_o	Pressão de referência
\dot{Q}	Intensidade da fonte, g/s
R	Constante dos gases para o ar seco, $J/kg K$
r	Distância espacial T
u	Velocidade 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
v	Velocidade 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
w	Velocidade 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
z_i	Altura da camada limite, m
z_0	Comprimento de rugosidade, m

Símbolos Gregos

α	Constante de separação
β	Constante de separação
δ	Função delta de Dirac
η^2	Invariante de transformação de referencial
κ	Constante de Von-Kármán
λ_y	Autovalor do problema de Sturm-Liouville em y
λ_z	Autovalor do problema de Sturm-Liouville em z
ν	Frequência de onda, Hz
ξ	Parâmetro de estabilidade

ρ	Densidade do ar
ϕ	Invariante de transformação de referencial
σ_o	Desvio padrão observados
σ_p	Desvio padrão preditos

1 INTRODUÇÃO

O aumento gradativo dos níveis de dióxido de carbono na atmosfera, impulsionados pelo crescimento populacional e aumento da atividade industrial desde o século passado, é um grave problema mundial. Esse processo é apontado como a causa da diminuição de biodiversidade do planeta e também da qualidade de vida do ser humano. As emissões podem ser causadas por fontes naturais como vulcões ou queimadas iniciadas sem a intervenção do homem, entretanto o sistema do planeta Terra seria capaz de reabsorver e manter o sistema em equilíbrio usando os seus sumidouros naturais, o mar e a vasta vegetação. Com o aumento das fontes antropogênicas, emissões provocadas pelo homem que passaram a aumentar as taxas de emissões através do manejo da terra, queimadas, chaminés de indústrias e escapamentos de automóveis causando um desequilíbrio.

Movimentos preocupados com o bem estar e a saúde da população, assim como, a preservação da biodiversidade começaram uma luta para criar medidas regulatórias. Assim, um conjunto de leis foram arquitetadas com o objetivo de acompanhar as emissões de poluentes tanto por parte das fontes antropogênicas quanto das naturais. Para um controle efetivo das emissões é preciso compreender o fenômeno de dispersão de poluentes e sob posse desse conhecimento criar ferramentas capazes simular casos reais de emissões, naturais ou não. Com resultados concretos e fundamentados cientificamente é possível tomar decisões que diminuam os impactos das fontes poluidoras e talvez no futuro minimizem efeitos nocivos à população e ao meio ambiente. Para fontes naturais, além de criar mecanismos para o monitoramento, pode ajudar a projetar planos de contingência que reduzirão efeitos colaterais de possíveis incidentes.

Os estudos de emissões de poluentes são feitos usando diferentes abordagens como experimentos de campo, de laboratório e por modelos matemáticos. Cada abordagem tem suas limitações. Por exemplo, experimentos de campo são custosos e por isso são escassos. Modelos matemáticos de construção analítica não contemplam os comportamentos detalhados da turbulência indo na contramão dos experimentos de campo e os de laboratórios que empreendem grandes esforços para determinar esse tipo de comportamento através técnicas de covariância de turbilhões, ou seja, medidas de covariância [Tsinober, 2009; Bolzan, 2002].

Para que ocorra um aprimoramento dos resultados de modelos analíticos, acredita-

se que eles devam ser capazes de apresentar alguma propriedade que resgate características reais causadas pela turbulência na dispersão de poluentes. Essa proposta é sugerida uma vez que, há interesse em compreender estes fenômenos em outras abordagens e pouca coisa é vista nesse sentido para modelos analíticos. Reproduzir matematicamente efeitos oriundos da turbulência pode revolucionar a compreensão deste fenômeno. Atualmente os modelos analíticos são divididos em dois grandes grupos: os determinísticos, predominantemente Eulerianos; e os estocásticos, tipicamente Lagrangianos, que tentam descrever o processo de dispersão, mas cada um com suas limitações e substituindo a física não conhecida via parametrizações [Carvalho et al., 2013; Moreira et al., 2005a; Buske et al., 2012].

Buscando um modelo que apresentasse características turbulentas e que mostrasse resultados condizentes com aspectos realísticos a autora apresentou um estudo onde propôs incluir uma fase no modelo euleriano. A inspiração surgiu pois ainda não há um consenso em mecânica dos fluidos para acoplar esse comportamento aos modelos. A proposta parte da ideia de fenômeno acústico do efeito estéreo, onde a fase é responsável pela distribuição correlacionada de sensações sonoras espaciais e temporais [Gisch, 2014].

Para que efeitos não-lineares sejam reproduzidos por uma equação dita linear dois axiomas são postos em prática. Eles conduzem o modelo a uma solução que é compatível com as descrições de distribuições de probabilidade sendo capaz de reproduzir efeitos turbulentos na dispersão de poluentes mais especificamente com flutuações de correlações não-nulas. A solução do modelo é semi-positiva definida por construção. Ela é gerada a partir de uma solução com coeficiente difusivo complexo, fator que inclui a fase, por multiplicação da solução complexa conjugada levando ao primeiro axioma, juntamente com uma solução dada por uma distribuição de probabilidade. O segundo axioma implementa estruturas compatíveis com estruturas coerentes através das formas sesquilineares ao combinar os termos cruzados gerados pela manipulação algébrica. Portanto a solução da equação de advecção-difusão é complexa e linear, mas a distribuição gerada pela multiplicação da solução complexa pela sua conjugada, obtida pela forma sesquilinear que é não-linear. Isto é razoável, dado que a turbulência é um fenômeno descrito na literatura como não-linear. Então, com a propriedade da não-linearidade acoplada através da inclusão da fase se origina um modelo determinístico-estocástico não encontrado na literatura e com resultados interessantes, pois ele apresenta efeitos associados à características

turbulentas.

Para o presente trabalho uma extensa análise do comportamento do modelo frente a variação de parâmetros é realizada para elucidar as características imputadas pela inclusão da fase. Também são aplicados perfis qualitativos que simulam o comportamento da camada limite estável e convectiva nos coeficientes de difusão vertical. O experimento de Copenhagen foi simulado para buscar comportamentos que conectassem as mudanças de estabilidades dentro do regime de camada limite convectiva aos parâmetros do modelo. Ao simular cenários reais o modelo recebeu modificações para aceitar mudanças de variáveis durante o processo de simulação, pois a solução original foi construída para parâmetros constantes no tempo. Para implementar mudança na direção do vento foram utilizadas rotações coordenadas durante o processo de simulação. As condições de fonte, delta e gaussiana, foram confrontadas com o objetivo de obter uma descrição da fonte comparável à física do fenômeno. Por fim foram simulados cenários realísticos, cujos os dados de concentração observada eram disponíveis viabilizando avaliações estatísticas sobre os parâmetros do modelo e variáveis micrometeorológicas.

1.1 Revisão Bibliográfica

Considera-se poluente atmosférico, pelas leis brasileiras, qualquer forma de matéria ou energia com intensidade e em quantidade, concentração, tempo ou características em desacordo com os níveis estabelecidos, e que tornem ou possam tornar o ar impróprio, nocivo ou ofensivo à saúde; inconveniente ao bem-estar público; danoso aos materiais, à fauna e à flora, prejudicial à segurança, ao uso e gozo da propriedade e às atividades normais da comunidade resolução do Conselho Nacional do Meio Ambiente [CONAMA, 1989].

A emissão de poluentes atmosféricos passou a ser de larga escala a partir da revolução industrial de 1760 à 1830, e com ela vieram à tona problemas econômicos, sociais e ambientais que agravaram-se ao passar dos anos. Na literatura há relatos de fenômenos meteorológicos que junto com os altos índices de poluição causaram o adoecimento e até a morte da população atingida.

Um dos primeiros casos que despertou o interesse do meio científico, ocorreu na Bélgica, no Vale do Rio Meuse, de 1 a 5 de dezembro de 1930, quando um espesso nevoeiro cobriu a zona industrial. Como não havia vento e nem chuva, não ocorreu a dispersão

nem a deposição das partículas de poluição. A população foi acometida por sintomas intensos de origem respiratória e mais de 60 pessoas morreram nos três dias seguintes, o que representou mais de 10 vezes a taxa de mortalidade esperada para a cidade [Firket, 1931; Nemery et al., 2001; Bell e Davis, 2001]. As condições de baixas temperaturas e o denso nevoeiro foram os responsáveis pela não dispersão dos poluentes.

Já na Pensilvânia de 27 a 30 de outubro de 1948 a presença de um anticiclone, seguido de uma inversão térmica junto com a ausência de ventos, favoreceu a formação de uma névoa escura sob a cidade. Foram registradas 20 mortes e quase 6 mil internações entre os 14 mil habitantes da cidade [Bell e Davis, 2001].

Em 1952, no mês de dezembro, outro episódio ocorreu, agora em Londres. Uma massa de ar estacionada resultou na inversão térmica no vale do Tamisa, onde uma neblina com fumaça fez aumentar o número de óbitos chegando à 4749 segundo Schwartz, 1994.

Por volta de 1960 a poluição do ar deixou de ser um problema localizado em torno das fontes de emissão e das áreas urbanas para tornar-se um problema em âmbito mundial. Os holofotes das organizações não governamentais e da mídia voltaram-se para denúncias que, baseadas em estudos, mostravam que os poluentes eram levados para longas distâncias e causavam grandes problemas de saúde à população. Isso fez com que muitos países criassem uma legislação ambiental. No Brasil esse papel é do CONAMA responsável por criar, atualizar e colocar em prática a legislação de controle de emissão de poluentes. Uma das formas de monitoramento sugerida pelo CONAMA é através de modelos matemáticos que são indicados nos estudos de poluição atmosférica. A recomendação pode ser lida na resolução CONAMA 316/02, que indica o uso da modelagem matemática como pré-requisito para instalação dos empreendimentos poluidores.

Em se tratando de modelos matemáticos, na metade do século XIX tem-se o registro do primeiro modelo focado no problema de dispersão de poluentes. Foi resolvida a equação de advecção-difusão onde foi obtida a solução chamada de Gaussiana. A solução foi encontrada por Adolph Fick, fisiologista alemão, que certamente foi movido pela curiosidade de descrever o fenômeno de dispersão através da matemática. A equação que ele usou era unidimensional, conforme equação abaixo:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = K_z \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2}, \quad (1.1)$$

onde o coeficiente de difusão K_z era constante com a altura. As condições de contorno

são de fluxo nulo na parte inferior e superior da camada limite planetária (CLP) dada por:

$$K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0, \quad z = 0 \text{ e } z \rightarrow \infty. \quad (1.2)$$

Depois, a solução proposta foi não Gaussiana [Roberts, 1923]. A equação era bidimensional e calculada mais próxima ao solo com coeficiente de difusão turbulenta e campo de vento variáveis através da lei de potência aplicadas na coordenada z de acordo com

$$\bar{u} = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m; \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \quad (1.3)$$

$z_1(m)$ é a altura onde a velocidade $u_1(m/s)$ e o coeficiente K_1 são avaliados, n e m são parâmetros vinculados à rugosidade da superfície e à instabilidade atmosférica respectivamente, variando entre 0 e 1 [Irwin, 1979]. O trabalho anterior foi replicado, porém os coeficientes difusão K_z 's tinham perfis lineares e a altura da fonte era mais elevada [Rounds, 1955]. Na linha de soluções bidimensionais e com variações na velocidade \bar{u} e no coeficiente difusivo K_z ambos em função da altura, o Smith, 1957, ainda modificou o expoente do vento que segue a lei conjugada de Schmidt (*expoente do vento* = $1 - K_z$). Smith contribuiu também com uma solução onde K_z variava conforme

$$K_z = K_0 z^\alpha (z_i - z)^\beta, \quad (1.4)$$

onde K_0 é uma constante, α e β variam entre 0 e 1 de acordo com a altura da camada limite z_i e a velocidade \bar{u} era constante.

Scriven e Fisher, 1975, propuseram uma solução onde \bar{u} é constante como Smith, mas K_z é definido como

$$K_z = z \text{ para } 0 \leq z \leq z_t, \quad (1.5)$$

$$K_z = K_z(z_t) \text{ para } z_t \leq z \leq z_i, \quad (1.6)$$

onde z_t é uma altura pré-definida que frequentemente assume o valor da camada limite superficial. A solução de Scriven e Fisher, 1975, é utilizada na Europa para o transporte e deposição de contaminantes. Já no Reino Unido ela é aplicada em transporte de longa escala de poluentes.

Yeh e Huang, 1975 e Berlyand, 1975, publicaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com \bar{u} e K_z seguindo os perfis de potência, mas para uma atmosfera sem

contorno superior ($K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$). Estas soluções foram obtidas em termos de funções de Green. Já Demuth, 1978, publicou uma solução em termos de funções de Bessel onde a camada vertical era limitada ($K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = 0$ em $z = a$) onde a é constante. Essa é uma das condições apresentada neste trabalho.

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

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

$$K_z = Gu_* z \left(1 - \frac{z}{z_i} \right), \quad (1.7)$$

onde G é uma constante e u_* é a velocidade de fricção. A publicação subsequente Nieuwstadt e Haan, 1981, abordaram a solução utilizando polinômios de Jacobi, onde \bar{u} é uma escala de velocidade turbulenta dependente do tempo e a altura da camada limite cresce com o tempo.

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

Chrysikopoulos et al., 1992, aproveitaram a solução em termos de funções hipergeométricas e adicionou as funções de Bessel para a deposição. Aplicaram em uma solução tridimensional com \bar{u} e K_z seguindo as leis de potência dadas pela Equação 1.3 com uma fonte aérea contínua sendo a concentração avaliada ao nível do solo.

Ulden, 1992, descreveu, através da soma de *puffs*, a distribuição de concentração, assim chegando a solução aproximada de emissão instantânea.

Já Sharan et al., 1996a, trabalharam na solução tridimensional permanente para condição de ventos fracos, com a velocidade vertical desprezível, difusividades turbulentas constantes e fonte pontual. Já no trabalho Sharan et al., 1996b, abordaram o caso para fontes baixas, o campo de vento é apenas longitudinal e com coeficientes de difusividades para as três direções mantendo as demais condições iguais.

Moura e Pires apresentaram a solução analítica da equação de difusão unidimensi-

onal dependente do tempo e sem vento. Para o caso estável [Moura, 1995] e utilizando o coeficiente de difusão K_z de Degrazia e Moraes, 1992. Para o caso convectivo [Pires, 1996] usou coeficiente de difusão de Degrazia et al., 1996a. Usando o mesmo método [Moreira, 1996] resolveu para o caso bidimensional estacionário. Lin e Hildeman, 1997, usaram as soluções obtidas por Yeh e Huang, 1975 e Berlyand, 1975, e acrescentaram a deposição ao solo.

Sharan e Gupta, 2002, desenvolveram uma solução analítica bidimensional permanente utilizando uma expansão em autofunções do problema original. Neste trabalho, o coeficiente de difusão vertical foi considerado variável com a distância horizontal em relação à posição da fonte. A fonte estava ao nível do solo e difusão constante e variável com a distância longitudinal da fonte.

Todos os trabalhos anteriores são válidos em situações muito específicas com restrições ao vento e nos perfis verticais dos coeficientes de difusão [Moreira et al., 2009a]. Para abranger situações mais variadas os modelos híbridos como o ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*) é discretizada a camada limite planetária em N subcamadas e para cada subcamada resolve-se a equação advecção-difusão através da Técnica de Transformada de Laplace onde o perfil de vento e os coeficientes de difusão são termos médios [Vilhena et al., 1998; Degrazia et al., 2001; Moreira et al., 2004, 2005a,b,c, 2006b; Buligon et al., 2006].

A GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) de Cotta, 1993 e Cotta e Mikhaylov, 1997, são embasados em Mikhaylov e Özisik, 1984, é uma técnica na qual os autores usaram a derivação da transformação clássica e aplicaram em problemas lineares de difusão. Desenvolveu-se a GITT para outras classes de problemas lineares de difusão e advecção-difusão.

GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) é um método onde é feito uma variação da técnica GITT, onde o sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO) resultante da aplicação da GITT é resolvido analiticamente pelo uso da transformada de Laplace e diagonalização e aplicados em diferentes parametrizações de turbulência [Wortmann et al., 2005; Moreira et al., 2006a; Buske et al., 2007a,b; Tirabassi et al., 2008; Buske et al., 2008; Moreira et al., 2009b,a; Buske et al., 2010; Weymar, 2012].

Carvalho e Vilhena, 2005, resolvem um modelo de partículas de Lagrange semi-analítica para simular a dispersão de poluentes durante condições de baixa velocidade do

vento. O método baseia-se em uma equação integral estocástica cuja solução iterativa da equação de Langevin pelo método iterativo de Picard.

Rizza et al., 2007, compararam um modelo lagrangiano baseado na forma tridimensional da equação de Langevin com velocidade aleatória com um modelo euleriano analítico baseado na discretização da camada limite atmosférica (CLA) em N subcamadas, onde em cada uma das subcamadas a solução é obtida pela técnica de transformada de Laplace e, um modelo euleriano numérico composto por um conjunto de equações unidimensionais dependentes do tempo, onde os termos advectivos foram resolvidos usando um método baseado em uma interpolação cúbica.

Sharan e Kumar, 2009, propuseram uma solução analítica de forma fechada da equação advecção-difusão a partir do problema associado de Sturm-Liouville. Consideraram fonte contínua e o seguinte perfil de velocidade do vento

$$u(z) = az^\alpha \quad \text{com } a = u(z_r)z_r^{-\alpha}, \quad (1.8)$$

onde $u(z_r)$ é a velocidade do vento na altura de referência ; α é uma lei de potência que depende da estabilidade atmosférica, parametrizada a partir da Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov.

Pérez Guerrero et al., 2012, construíram uma solução para o problema de difusão atmosférica em estado estacionário, domínio finito e semi-infinito de um modelo de pluma Gaussiana e com várias classes de estabilidade. A equação tridimensional foi resolvida analiticamente usando a Técnica de Transformada Integral Clássica (*Classic Integral Transform Technique* - CITT). A solução possui parametrizações da velocidade de vento dependendo da coordenada vertical z e difusão turbulenta em termos da dimensão longitudinal x e a coordenada vertical z .

Loeck, 2014, resolveu a equação de advecção-difusão determinística com fonte contínua através da transformada de Fourier combinada com componentes estocásticas na velocidade do vento, comprimento de rugosidade e coeficiente de difusão turbulenta vertical. Além disso, foi 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 para dar um efeito de condição de contorno não zero.

Weymar et al., 2016, resolvem analiticamente a equação de advecção-difusão incluindo uma fonte para descrever reações fotoquímicas que produzem poluentes secundá-

rios.

Uma solução analítica foi obtida por Silva et al., 2016, que descreve a dispersão de poluentes na atmosfera considerando a dependência do tempo no perfil do vento e na difusividade turbulenta. A solução é construída com método de decomposição expandindo a concentração de poluentes em uma série truncada, obtendo assim um conjunto de equações recursivas cujas soluções são conhecidas.

O relevo de áreas onde há dispersão de poluentes afeta o comportamento do escoamento, mas por simplicidade trata-se os contornos como condições paralelas. Meneghetti et al., 2017, apresentou a proposta para o tratamento de condições de contorno curvilíneas através difeomorfas transformações conformes.

O presente trabalho resolve a equação advecção-difusão analiticamente e segue por uma linha que apresenta um modelo com uma forma sesquilinear devido ao acoplamento de um coeficiente difusivo complexo. Um modelo com forma sesquilinear foi proposto por Duff e Isham, 1980, para encontrar soluções não-lineares da equação de campo de Yang-Mills, aplicado para resolver problemas no espaço Minkowski onde as soluções são necessariamente complexas.

Bodmann et al., 2013, usaram o coeficiente de difusão complexo na equação de difusão gerando soluções da forma sesquilinear para a equação, observando a presença de estruturas coerentes.

Os dois últimos trabalhos geraram referências para o trabalho Gisch, 2014, que resolveu a equação de advecção-difusão com o objetivo inicial de avaliar os efeitos da presença de fase na solução da equação. Obteve-se uma relação entre a componente real e imaginária, que foram associadas a um regime turbulento. Mais especificamente, quanto mais dominante a parte imaginária na solução maior é a presença de efeitos turbulentos. Demonstrou-se, através da comparação das soluções advecção-difusão, que o modelo podia descrever casos onde o coeficiente era real apenas zerando a parte imaginária do coeficiente vertical mostrando desta forma como o modelo determinístico-estocástico é mais geral que os modelos determinísticos.

O modelo linear complexo, cujos observáveis são representados de forma sesquilinear e portanto compatível com grandezas que seguem distribuições, ou seja, as soluções já são funções de distribuição de probabilidade devido a construção da solução do modelo.

Todos os modelos analíticos citados anteriormente nesta revisão obtém soluções

da equação advecção-difusão determinística. O presente modelo surge de equações determinísticas, com a introdução da fase, que recupera características estocásticas podendo assim chamá-lo de o primeiro modelo determinístico-estocástico, o que convém, dado que o fenômeno da dispersão de poluentes é estocástico. O aparecimento de flutuações é uma manifestação que em modelos determinísticos não ocorre. Os modelos determinísticos apresentam apenas o primeiro momento analisado, ou seja, apenas os valores médios de concentração. Já o modelo determinístico-estocástico descreve a concentração por função densidade de probabilidade gerada pela forma como as soluções são construídas.

1.2 Objetivos

O presente trabalho propõem a inclusão de características oriundas da turbulência no fenômeno da dispersão de poluentes através de uma proposta inovadora onde a equação de advecção-difusão é resolvida analiticamente, mas por construção do modelo se insere propriedades que requerem uma interpretação sofisticada como resultado final se obtém um modelo determinístico-estocástico que possui uma solução dada por uma função densidade de probabilidade. Desse ponto em diante uma extensa análise é realizada para averiguar e conhecer a proposta do modelo de dispersão de poluente que não segue a ideia ortodoxa de parametrização de turbulência. Melhorias no modelo são incluídas no decorrer do texto para que casos reais sejam melhor representados.

1.3 Organização do Trabalho

Já foi apresentada uma revisão bibliográfica de modelos para a dispersão de poluentes e a evolução dos estudos científicos nessa área até o momento. No Capítulo 2 atmosfera terrestre é descrita assim como os mecanismos de cada um dos seus estratos dando ênfase à camada limite planetária. Essa região de aproximadamente 1 km de espessura e adjacente à superfície terrestre que a influencia diretamente dando origem as mudanças de regimes de estabilidade. Nos aguarda no Capítulo 3 as definições de estruturas coerentes, componentes essenciais para a descrição de escoamentos turbulentos. Aponta-se um caminho a seguir para que modelos analíticos tentem descrever tal comportamento. Expõem-se uma explicação física e uma formalização matemática. No Capítulo 4 a equação de advecção-difusão é apresentada, simplificada, discutida e resolvida. Descreve-se o processo de introdução da não-linearidade responsável pelo surgimento de estruturas

coerentes. As fontes às quais o modelo será submetido durante o trabalho são apresentadas, assim como os perfis do coeficiente de difusão vertical analisados durante o estudo. Para o Capítulo 5 nos é reservado uma apresentação sobre cada cenário onde o modelo será aplicado assim como as ferramentas estatísticas. Os resultados são explanados no Capítulo 6 que vão desde uma profunda análise de comportamento do modelo via variação de parâmetros à aplicação dele em circunstâncias reais. Em seguida, no Capítulo 7 discutem-se as conclusões e perceptivas de trabalhos futuros ambicionadas por questões em aberto.

2 ATMOSFERA TERRESTRE

Os astronautas da Apollo foram os primeiros a observar o planeta Terra do espaço. A visão era de uma bela esfera azul salpicada de farrapos brancos. Completamente diferente da imagem que se tem da lua, vista a partir da Terra. A diferença é explicada pela presença da atmosfera terrestre, uma camada gasosa que envolve o planeta. Ela parece ser infinita vista da Terra, entretanto, se estende por aproximadamente 1000 km e 90% da massa encontra-se abaixo de 16 km. Como o raio da Terra é de 6370 km então a atmosfera não passa de uma estreita camada ao redor do planeta. Tal como a casca de um fruto, a principal função é proteger a vida no interior. A ausência dela causaria amplitude térmica insustentável, assim como inexistência gases imprescindíveis à vida, como o oxigênio.

2.1 Estratos da Atmosfera Terrestre

A atmosfera terrestre é uma capa de ar sem limite superior perfeitamente definido, onde a densidade diminui com a altura até confundir-se com a “atmosfera solar” [Donn, 1978]. Apesar de pequena se comparada ao raio da Terra, a atmosfera, pode ser subdividida através de camadas onde cada uma possuem suas peculiaridades. A Estratificação é feita através do perfil de temperatura absoluta média onde em cada camada há uma absorção diferenciada da energia solar. Até o começo do século passado pensava-se que a temperatura decrescia com a altitude até zero absoluto ao atingir o espaço. Na Figura 2.1 observe o comportamento da temperatura com relação a altura onde há um perfil, que ora aumenta ora diminui, não respeitando o perfil de diminuição contínua da temperatura com o aumento da altitude.

A baixa atmosfera, em altitudes abaixo de 100 *km*, ela pode ser subdividida em termosfera, mesosfera, estratosfera e troposfera. Acima disso há a exosfera.

2.1.1 Exosfera

Camada mais externa localizada, aproximadamente, entre 500 km e 1000 km da superfície terrestre. Apresenta uma baixa densidade e sofre pouca influência da gravidade terrestre. Essa característica a torna o local adequado para os satélites artificiais que nos orbitam e são ferramentas essenciais no mundo de hoje.

2.1.2 Termosfera

Estrato possui uma espessura que varia de 80 km à 800 km que está correlacionada à atividade solar. A temperatura dela aumenta com a altura devido a absorção da radiação ultravioleta pelo oxigênio molecular e atômico, provavelmente chegando 800 - 1200 *Kelvins*, mas as temperaturas são essencialmente teóricas [Chorley, 2012], pois o calor não possui meio para ser transmitido dado que o ar é rarefeito nessa região e não há contato suficiente entre as partículas para fazer tal medição. Devido à presença de partículas carregadas a camada é conhecida também como ionosfera. Essa característica é fundamental para o fenômeno de aurora boreal, que é visto apenas nos polos magnéticos que atualmente coincidem aos polos geográficos.

2.1.3 Mesosfera

Já na mesosfera as temperaturas decaem com o aumento da altura. Os pesquisadores tem dificuldade de descreve-la porque fica acima da altitude máxima para aeronaves e abaixo da mínima para os ônibus espaciais. Isto limita e encarece a coleta de dados. Ela possui elevada concentração de átomos de ferro e outros metais pois os corpos celestes se desintegram ao adentrar na atmosfera terrestre.

2.1.4 Estratosfera

Na estratosfera a temperatura aumenta com a altura da camada e dentro se localiza a camada de ozônio, que funciona como uma espécie de filtro natural do planeta Terra. Quando a radiação eletromagnética mais energética produzida pelo sol, o ultravioleta (UV), atinge a camada, o ozônio e o oxigênio já absorvem grande quantidade dos raios, assim tornando a incidência da radiação suportável à existência de vida na Terra. Aviões supersônicos e balões de medição climática contendo radiossondas sobem até a camada, desta forma é sabido as condição de quase ausência de turbulência. Também não há nuvens e conseqüentemente não há precipitação. Os poluentes que chegam à essa camada dificilmente são removidos.

2.1.5 Troposfera

É a camada mais baixa da atmosfera com uma altura variável de 9 a 16 *km*, dependendo da latitude. A temperatura diminui com o aumento da altura. nela ocorre grande parte dos fenômenos meteorológicos, assim como os poluentes lançados na superfície terrestre são dispersados e transportados através dela. A troposfera pode ser dividida em uma camada adjacente à superfície terrestre, denominada camada limite planetária (CLP) que se encontra de 100 – 3000 *m* [Arya, 1999] e atmosfera livre que compreende o resto da camada conforme a Figura 2.2.

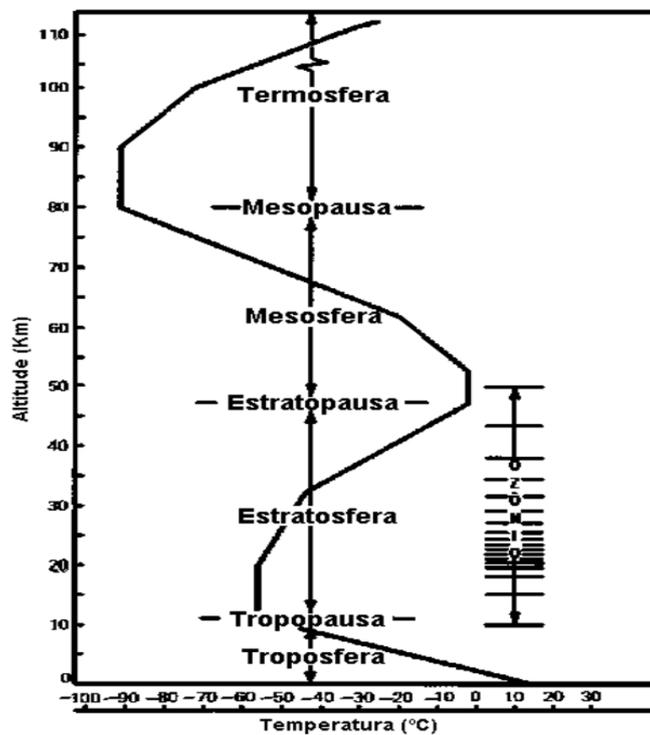


Figura 2.1 – Estratificação da atmosfera segundo o perfil de temperatura absoluta.

[Adaptado de Arya, 1999]

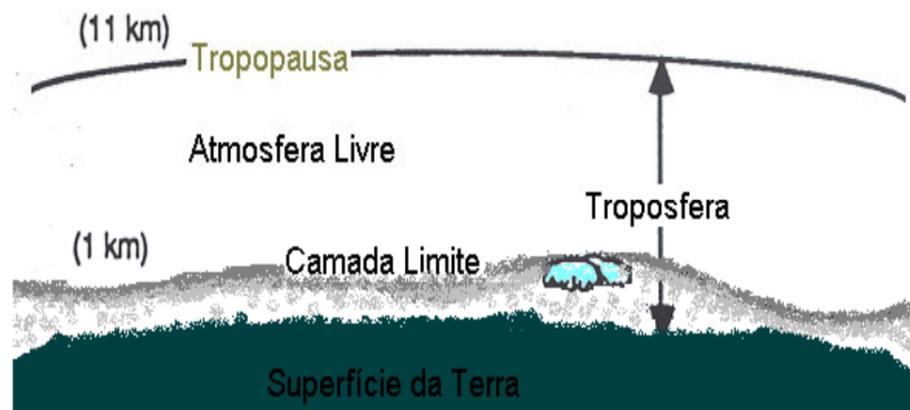


Figura 2.2 – Estrutura da troposfera que contém a CLP. [Adaptado de Stull, 1988]

2.2 Camada Limite Planetária

A pesquisa em dispersão de poluentes na atmosfera ocorre na microescala meteorológica, ou seja, em uma região de alguns quilômetros onde seu comportamento físico é regido pelos fenômenos da CLP que compreende a parte da atmosfera logo acima da superfície terrestre. Decorrente desta característica há uma influência direta sobre o comportamento do estrato. As interações entre superfície e a camada podem ser observadas no escoamento do ar quando as forças de empuxo térmico, tensões cisalhantes, ventos geostróficos e térmicos, força de Coriolis e até a rugosidade do terreno podem alterar o comportamento da mesma. A CLP é a região da atmosfera onde surgem turbilhões. Este trabalho por estar preocupado em reproduzir aspectos turbulentos associados aos processos de dispersão precisa entender a física envolvida no processo de formação.

A CLP possui um escoamento que apresenta elevado número de Reynolds, onde a turbulência gera transporte de energia, massa e quantidade de movimento entre a superfície e a atmosfera. A variação de espessura dela vai de 100 a 3000 metros. Isso ocorre devido as forçantes mecânicas e térmicas, que produzem movimentos turbulentos em uma escala temporal de uma hora ou até menos que afetam o aumento e a diminuição da espessura da camada juntamente com a posição geográfica onde foi medida. O aquecimento e resfriamento da superfície são vistos claramente na estrutura da CLP onde ela se divide em regimes de estabilidade conhecidos como: camada limite convectiva, camada residual noturna e camada limite estável ou noturna [Stull, 1988]. As termos introduzidas pelo

aquecimento e resfriamento da Terra causada pela incidência dos raios solares permite dividir o dia no ciclo diário que é observado na Figura 2.3. A radiação difusa e a radiação vinda do solo são os fatores importantes para o aquecimento do ar causando o surgimento das termas. Já radiação direta do sol contribui bem menos para a variação de temperatura da CLP, porque a energia quase não é absorvida pelo ar.

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

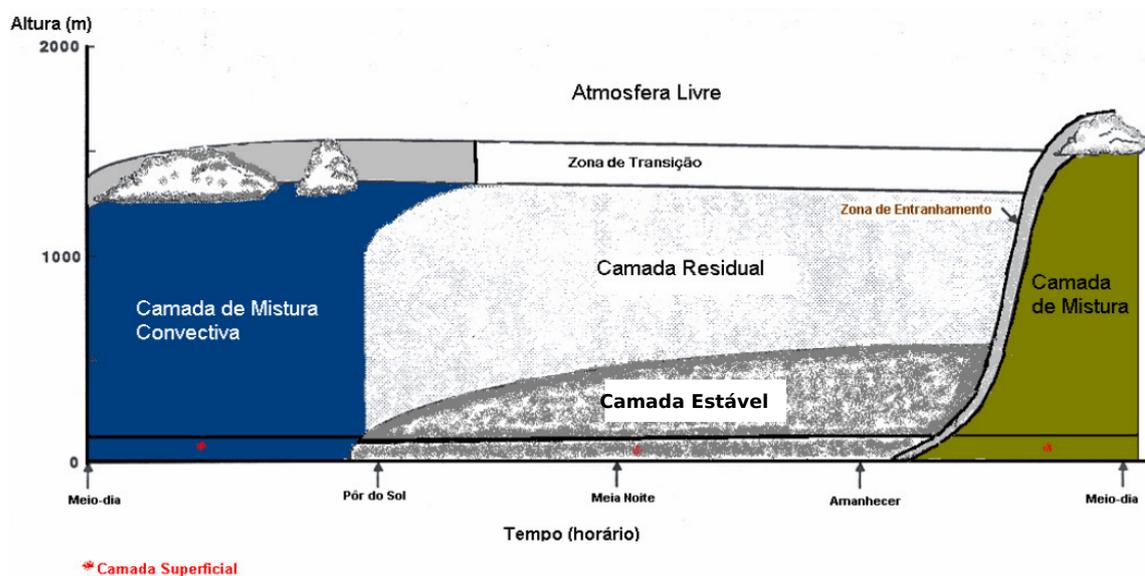


Figura 2.3 – Evolução temporal da CLP no período de um dia. [Adaptado de Stull, 1988]

2.2.1 Camada Limite Convectiva

Na Camada Limite Convectiva (CLC) há forte presença de vórtices causados pelas termas do aquecimento, que é formado logo após o nascer do sol. A superfície da Terra aquece e um fluxo de calor positivo se forma, consequentemente, termas de ar quente modificam o topo da CLP. Ao pôr do sol a superfície passa a resfriar e se tem um fluxo de calor negativo. A camada chega a alcançar 1000 a 3000 metros durante o período da tarde. A maior parte dos contaminantes são lançados nessa camada que tem como uma das principais características a forte mistura vertical. Ela pode ser estratificada em:

Camada Superficial é adjacente a superfície da Terra onde a ocorrência de turbu-

lência é um fenômeno relativamente constante. A altura dela corresponde a mais ou menos 10% da CLC. Outras características são grandes gradientes como os normais a velocidade tangencial e o gradiente de concentração de quantidades como temperatura, umidade e sedimentos transportados;

Camada Limite de Mistura já compreende a maior parte da CLC, nela ocorre intensa mistura vertical que tende a conservar as variáveis como temperatura potencial e umidade constante com a altura;

Zona de Entranhamento local que existe um empuxo negativo, fazendo com que as termas que ascendem verticalmente com o empuxo positivo, voltem a camada limite convectiva, porém com ar seco e quente, sendo esse processo chamado de entranhamento.

2.2.2 Camada Residual Noturna

Quando as termas cessam e a turbulência diminui começa a formação da camada residual noturna, por volta de meia hora antes do pôr do sol. Essa camada possui propriedades residuais da camada de mistura e forma-se acima da camada limite estável. Enquanto a camada limite noturna tem um perfil estável, a camada residual tende a ter um perfil neutro. A camada residual não tem contato com a superfície da Terra, e assim não é influenciada por tensões turbulentas, logo é apenas uma camada de mistura.

2.2.3 Camada Limite Estável

Depois do pôr do sol, quando o movimento convectivo praticamente desaparece e ocorre mudança de sinal no fluxo de calor na superfície, a turbulência começa a decair, formando a camada limite estável (CLE). Esse fenômeno pode ser explicado pelo resfriamento da superfície que provoca um fluxo negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões, logo sobram apenas pequenos turbilhões isotrópicos. Resultando em uma estrutura turbulenta estável e estratificada, a qual é fortemente influenciada pela taxa de resfriamento radiativo e taxa de advecção da turbulência mecânica. Portanto, a turbulência na CLE é menor que na CLC, conseqüentemente os poluentes emitidos nessa camada são dispersados lentamente na horizontal. E devido a altura ser de 100 a 300 metros a poluição fica próxima ao nível do solo.

2.3 Regimes de Estabilidade da Atmosfera

A estabilidade da atmosfera é a tendência do perfil vertical de temperatura resistir ou intensificar o movimento nessa direção, ou seja, suprimir ou aumentar a turbulência existente. É considerada um dos fatores fundamentais para o estudo dos fenômenos de dispersão de poluentes e efluentes [Seinfeld e Pandis, 1963]. A estabilidade atmosférica pode ser dividida em neutra, instável e estável. Esta divisão é feita usando curvas de gradientes térmicos que indicam como interpretar a estabilidade.

Atmosfera Instável possui condições instáveis, tipicamente observadas durante o dia, com fluxo positivo de calor do solo. A temperatura diminui mais rapidamente com a altura, assim o gradiente de temperatura com relação à altura é negativo. A camada de mistura torna-se maior devido ao forte movimento vertical convectivo, conhecidos por termas, geradas pelo aquecimento solar da superfície e contribuindo assim para uma melhor dispersão de contaminantes. Em atmosferas convectivas o aspecto da pluma assume uma forma serpenteante na Figura 2.4 (caso A).

Atmosfera Neutra é quando não existe troca de calor com o ambiente. O movimento vertical pode ser considerado nulo e caracterizado pela presença de um perfil vertical adiabático de temperatura ou seja o gradiente de temperatura em relação à altura é igual a zero ou aproximadamente zero. Essas condições costumam aparecer durante a transição do dia para a noite, em dias nublados, ou com fortes ventos maiores que 6 m/s . Em atmosferas neutras o aspecto da pluma assume uma forma cônica Figura 2.4 (caso B). Nesses casos a turbulência pode ser considerada homogênea, com turbilhões isotrópicos.

Atmosfera Estável possui essa condição quando a temperatura não diminui rapidamente com a altura e também pode ser conhecido por ter um perfil super adiabático ou seja o gradiente de temperatura com relação à altura é positivo. Nesta camada os movimentos verticais são pequenos ou até inexistentes e uma camada de mistura baixa é observada. Essa situação é desfavorável para a dispersão dos contaminantes. Isso ocorre, porque turbulência mecânica se torna o fator mais importante que age sobre o sistema. Já, a turbulência convectiva, responsável por provocar boas condições de dispersão, é pouco presente. A pluma em uma atmosfera estável é tubular como visto na Figura 2.4 (caso C). Sob estas condições, com normalmente na presença de ventos fracos, o poluente pode viajar à grandes distâncias mantendo altas concentrações.

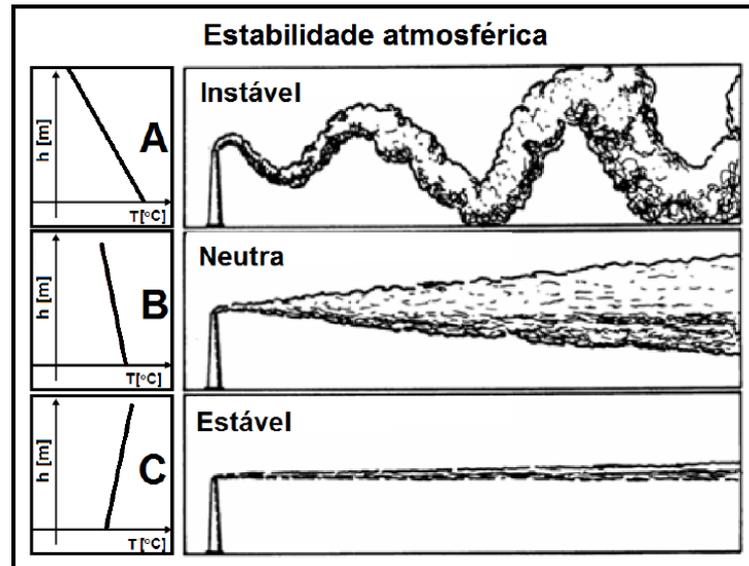


Figura 2.4 – Forma da pluma de acordo com a estabilidade da atmosfera.

[Adaptado de Arya, 1999]

A estabilidade atmosférica pode ser classificada segundo Stern, 1968, através de outros métodos que foram desenvolvidos a partir da disponibilidade de parâmetros e variáveis meteorológicas que os experimentos ofereciam. A conexão entre a tensão de cisalhamento e a estratificação térmica atmosférica do escoamento médio permite essa interpretação, já que o padrão de escoamento e a transferência de calor na atmosfera são dependentes dos sistemas climáticos. Para isso, o número de Richardson, pode ser associado a outros critérios, tal como o comprimento Monin-Obukhov L [Venkatram e Wyngaard, 1988]. O comprimento de Monin-Obukhov descreve a relação entre o fluxo turbulento de origem mecânica e convectiva, representando a altura na qual a turbulência mecânica se iguala à térmica. Ele é usado para avaliar o grau de estabilidade atmosférica,

$$L = \frac{c_p \rho T u_*^3}{\kappa g H}, \quad (2.1)$$

onde c_p é calor específico do ar a pressão constante, ρ densidade do ar, T temperatura absoluta média do ar, u_* velocidade de fricção, κ é constante dimensional de Von-Kármán, g aceleração da gravidade e H fluxo turbulento médio de calor sensível. Na porção mais próxima à superfície da Terra os efeitos da turbulência mecânica são predominantes. Uma relação adimensional

$$\xi = \frac{z_i}{L}, \quad (2.2)$$

é usada como parâmetro de estabilidade.

Classes de estabilidade de Pasquill, 1961, foram definidas e depois atualizadas por Pasquill-Gifford [Seinfeld e Pandis, 1963], subsequentemente, testadas por experimentos de campo de Turner, 1961. A avaliação é mensurada através de parâmetros micrometeorológicos e classifica o estado turbulento da atmosfera em seis categorias diferentes que são determinadas através do vento na superfície, insolação e cobertura de nuvens [Junior et al., 2010].

Modelar o transporte e a dispersão de poluentes na camada estável, ainda é um dos grandes desafios da meteorologia. Brusasca et al., 1992, dizem que onde a atmosfera é estável com presença de ventos fracos, este problema se torna complexo de prever e flutuações turbulentas causam grandes variações na direção do vento aumentando a imprevisibilidade do sistema. Os modelos analíticos obtêm resultados bons para condições de instabilidade atmosférica, por exemplo sob condição de ventos forte maiores que 2 m/s . Sob condições atmosfera estável ou de vento fraco as suposições aplicadas aos modelos analíticos atuais parecem não ser válidas. A parte advectiva se torna menos importante do que a difusiva turbulenta.

Uma grande dificuldade é que nessas condições muitas vezes não há uma direção preferencial para o vento médio, ou seja, ocorrem mudanças na direção que impossibilitam de o determinar. Esta característica não é detectada nos modelos analíticos determinísticos. Esse fenômeno é uma caracterização do fenômeno de meandro, o qual consiste em oscilações de baixa frequência do vento horizontal [Degrazia et al., 2014]. Anfossi et al., 2005, afirmam que este fenômeno ocorre quando a velocidade do vento está abaixo de $1,5\text{ m/s}$. Durante a condição de meandro, a direção horizontal do vento varia muito e os contaminantes são dispersos sobre muitos setores angulares. Consequentemente, o comportamento oscilatório do vento é o mecanismo que espalha os contaminantes nos diferentes ângulos e provoca uma redução na concentração máxima destes [Degrazia et al., 2008]. Meandro é um fenômeno físico complexo de fundamental importância na modelagem da dispersão da poluição do ar [Moreira et al., 2013].

3 TURBULÊNCIA E AS ESTRUTURAS COERENTES

A turbulência, diz Venkatram, 1988, é composta por três mecanismos que a caracterizam, o fluxo de momentum, o fluxo de calor e o parâmetro de empuxo. Devido a ausência de uma definição matemática sobre o que é turbulência o conjunto de suas características é usado para determiná-la [Möller e Silvestrini, 2004]. Tanto trabalhos teóricos como experimentais, concordam com a abordagem de definir a turbulência a partir de observação. E ambos apontam frequentemente para existência de padrões que se repetem no espaço e no tempo [Suri et al., 2017]. As estruturas, bem organizadas que são observadas no fluido são denominadas estruturas coerentes (ECs). No meio científico há algumas definições para elas.

Estruturas Coerentes estão relacionados aos fenômenos de intrusão e ejeção no escoamento turbulento próximo a um contorno rígido. Onde ela é como uma massa de fluido turbulento com vorticidade correlata, grande escala e em fase, sobre uma região do fluido, onde a coerência é aplicada apenas na coordenada temporal. Hussain e Fazle, 1986, estabelecem que a turbulência seja uma superposição de movimentos coerentes e não coerentes (aleatórios), esses últimos se estendendo além das fronteiras do que é estrutura coerente.

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

Regiões cujo regimes turbulentos apresentam movimentos em vórtices, onde o fluxo de cisalhamento turbulento ocorre em fase aleatória [Kit, 2013]. No entanto as estruturas são movimentos típicos, tridimensionais e em forma de vórtices que ocorrem repetidamente e contribuem substancialmente para o comportamento médio do fluxo. Eles são aleatórios, mas não tão aleatórios que os tornem irreconhecíveis, são a ordem dentro do caos [Tropea et al., 2007].

Um estudo sobre características de escoamentos em fluxos turbulentos rasos é apresentado por Ghidaoui e Lam, 2013, mas usando como cenários os meios aquáticos onde a profundidade é muito menor que a dimensão longitudinal. Estes locais são caracterizados

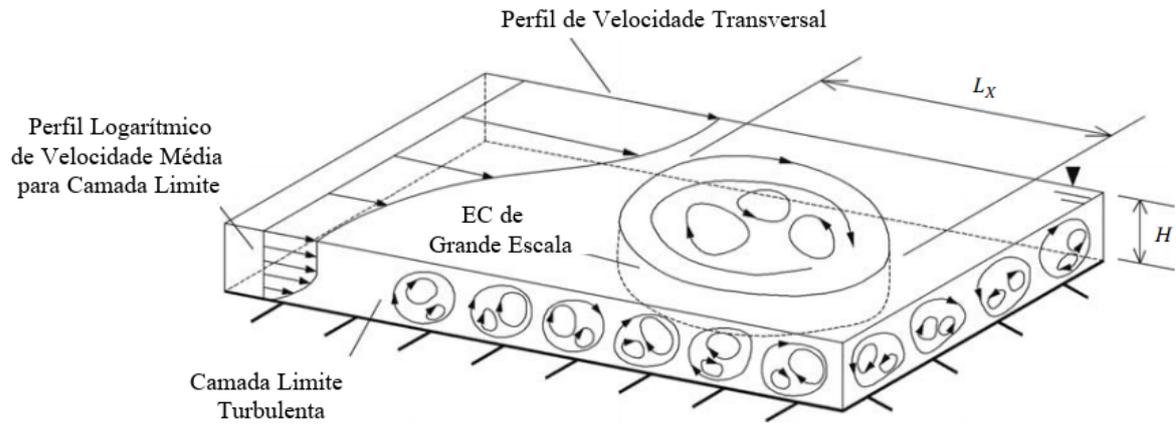


Figura 3.1 – Esquema de vórtices turbulentos em grande escala onde a escala de comprimento horizontal é muito maior que a altura.

[Adaptado de Ghidaoui e Lam, 2013]

por estruturas em vórtices alinhadas com o eixo gravitacional e cujo diâmetro é muito maior do que a profundidade da água, observe a Figura 3.1. Apontam-se vários cenários reais onde este tipo de comportamento ocorre e que acaba facilitando a visualização do fenômeno [Wolanski et al., 1984; Ingram e Chu, 1987; Jirka e Seol, 2010]. É fácil fazer uma ponte entre os cenários aquáticos de profundidade rasa à cenários atmosféricos, pois a profundidade do problema atmosférico é dado pela altura da camada limite planetária que varia de 100 m à 3000 m e a área longitudinal é o diâmetro do planeta Terra o que leva a acreditar que a dinâmica de comportamento se assemelha, até porque o poluente em dispersão possui um comportamento semelhante.

Estruturas coerentes em uma abordagem euleriana são importantes porque fornecem um meio conceitual de reduzir a complexidade da turbulência para unidades gerenciáveis [Tropea et al., 2007]. Uma definição matemática e sem ambiguidade é necessária para que as estruturas coerentes possam ser reconhecidas e isoladas, no entanto, infelizmente, não existe tal definição. Elas podem ter uma interpretação física através de outros problemas que trabalham frequentemente com coerência, como na ondulatória. Lá o termo coerente está ligado à estar em fase ou quando mantém a diferença de fase constante no tempo [Nussenzveig, 2002]. E a definição de coerência é algo fundamentado na matemática. São sistemas com diferença de fase constante, oscilando na mesma frequência, que também estão relacionados com a manifestação de interferências destrutivas ou construtivas que podem se apresentar na forma tanto espacial quanto temporal.

Os turbilhões são estruturas coerentes que precisam na sua descrição de uma característica que reflete coerência, portanto acredita-se que um termo de fase seja necessário nas equações para que características reais que são reflexos do comportamento turbulento possam ser descritas na dispersão de poluentes. É sabido que turbulência atmosférica tem origem convectiva ou mecânica. A convectiva é provocada pelas variações da incidência de calor solar sobre a superfície terrestre sendo depende da estabilidade térmica atmosférica. Já a turbulência mecânica é formada pelo movimento do ar em contato com a superfície terrestre, e quanto maior a rugosidade do terreno, maior será a turbulência por ela gerada [Paoli, 2006]. Estudando a estrutura da equação de Navier-Stokes percebe-se que ela não contém explicitamente uma fase e, portanto, não poderia ser considerada completa, da mesma forma, que modelos como a equação de advecção-difusão. E essa fase precisa ser incluída. Isso será acoplado na proposta do modelo presente através de um coeficiente de difusão vertical complexo na solução da equação de advecção-difusão. Essa componente é a principal responsável por introduzir características reais da dispersão, as flutuações com correlações espaciais e temporais não-nulas .

3.1 Interpretação Física de um Parâmetro Complexo

No eletromagnetismo clássico bem como na mecânica quântica é feito uso de descrições complexas. A eletrodinâmica clássica tem como modelo as equações diferenciais parciais com os seus operadores reais conhecidas como equações de Maxwell [Jackson, 1998], já a mecânica quântica tem como equação constituinte a equação de Schrödinger com o operador de energia contendo a unidade imaginária [Griffiths, 1995].

Qual seria a interpretação da unidade imaginária além do seu contexto formal? Para elaborar uma concepção na direção de compreender o seu significado sob olhar da física é conveniente utilizar o espaço de Minkowski como ponto de partida [Arfken e Weber, 2007]. O espaço de Minkowski unifica as três dimensões usuais do espaço com uma única dimensão do tempo para formar uma variedade quadrimensional para representar um espaço-tempo. Decorrente desta unificação surge a velocidade da luz c (m/s) como constante universal.

Existem duas invariantes geométricas neste espaço que são representadas pelas

formas fundamentais de Gauss da geometria diferencial onde o espaço-tempo é dado por

$$\eta^2 = \mathbf{x}^T \mathcal{G} \mathbf{x} \quad (3.1)$$

$$= \begin{bmatrix} ct & x & y & z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

$$= c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2$$

$$= c^2 t^2 - \mathbf{r}^2 \quad (3.3)$$

o \mathbf{r} é a distância espacial.

O espaço energia-momento

$$\phi = \mathbf{k}^T \mathcal{G} \mathbf{x} \quad (3.4)$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\nu}{c} & \ell_x & \ell_y & \ell_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

$$= t\nu - x\ell_x - y\ell_y - z\ell_z \quad (3.6)$$

com \mathbf{x} e \mathbf{k} quadri-vetores de um espaço de fase ortogonal cujo sub-espaço é o espaço-tempo e o espaço energia-momento. Onde ν (He) é frequência de onda e ℓ (m) são os comprimentos de onda.

Um caso especial da relatividade restrita tem como invariante o tempo próprio ao quadrado e a expressão equivalente de um referencial em movimento relativo uniforme.

$$c^2 d\tau^2 = c^2 dt^2 - d\mathbf{r}^2$$

Para esta invariante destacam-se três categorias no espaço-tempo, causal ($c^2 d\tau^2 > 0$),

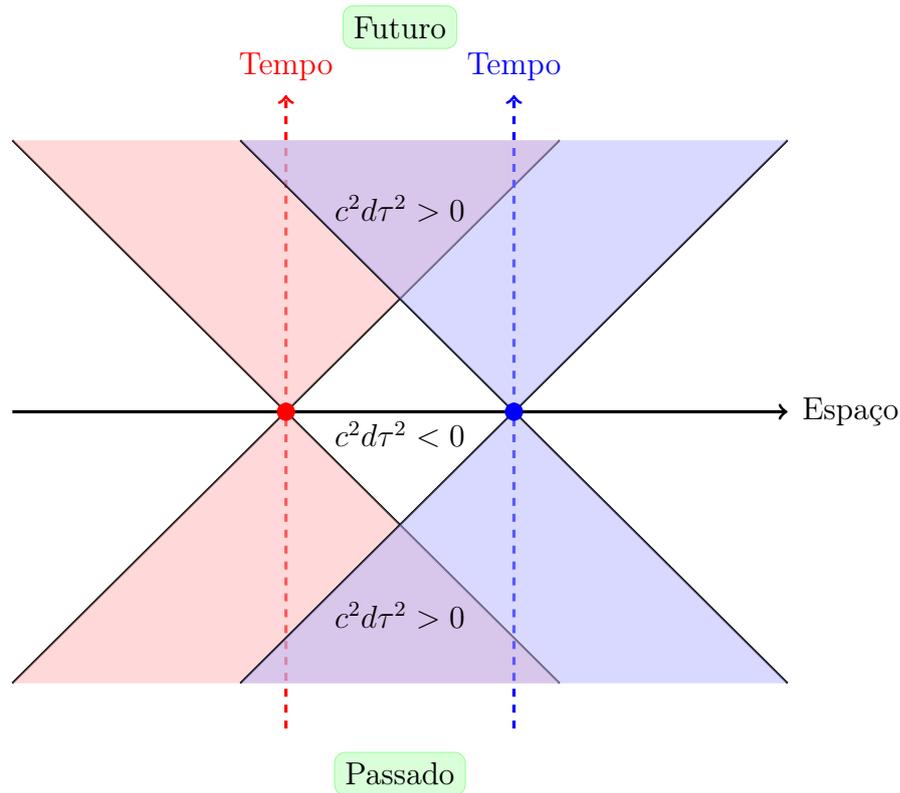


Figura 3.2 – Espaço-tempo.

limite causal ($c^2 d\tau^2 = 0$), e simultâneo (não causal, $c^2 d\tau^2 < 0$), também chamados de *time-like*, *light-like* e *space-like*. O limite representa um cone onde pontos internos chamados de eventos podem ser alcançados, e influenciados a partir do vértice do cone, o centro, este separa passado e futuro; veja Figura 3.2 onde há dois cones de luz para dois referenciais.

Eventos separados tipo não causal podem influenciar ou interferir com o evento no vértice do cone no futuro do desenvolvimento do evento. Pode-se calcular, então, o intervalo no sistema referencial próprio que acompanha o evento onde neste referencial o diferencial espacial é nulo. Portanto para eventos não-causais vale $c^2 d\tau^2 < 0$ e consequentemente $d\tau \in i\mathbb{R}$ é imaginário, enquanto para os demais outros tipos vale $d\tau \in \mathbb{R}$. A primeira conclusão que pode ser extraída do exposto é que algo imaginário tem caráter simultâneo a um evento, porém tem o potencial de interferir ou influenciar o desenvolvimento do evento em consideração num instante futuro onde os dois cones-de-luz tem intersecção, ou seja um futuro comum e de fato neste caso existiu também um passado comum.

A segunda invariante, espaço energia-momento tem um caráter de uma fase,

$$d\varphi = \mathbf{k}d\mathbf{r} - \omega dt$$

que no sistema referencial próprio é

$$d\phi = -\Omega d\tau$$

que para eventos tipo não-causal resulta numa fase imaginária. Para uma equação cuja solução tem uma forma de uma propagação de onda isto significa

$$\cos(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t) \rightarrow \cos(-i\Omega\tau) . \quad (3.7)$$

Com a representação de Euler para as funções trigonométricas por funções exponenciais obtêm-se $\cos(-i\Omega\tau) = \cosh(\Omega\tau)$ e respectivamente $\sin(-i\Omega\tau) = i \sinh(\Omega\tau)$. Então esta relação resulta numa propriedade não-oscilatória e a invariante $\cos^2(-\Omega\tau) + \sin^2(-\Omega\tau) = 1$ muda para $\cosh^2(\Omega\tau) - \sinh^2(\Omega\tau) = 1$. A relação não-causal implica uma mudança da geometria da esférica para a hiperbólica. Como as equações diferenciais parciais dos modelos em consideração relacionam geometria, tipicamente presente via derivadas da primeira ou segunda ordem, ou seja gradientes e curvaturas com uma forçante física que nos casos simples são os termos fontes das respectivas equações. Então o coeficiente de difusão turbulento complexo pode representar a interação entre duas partículas de uma estrutura coerente que podem não respeitar a casualidade temporariamente.

4 EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

A equação de advecção-difusão é usada para descrever matematicamente o fenômeno físico da dispersão de poluentes. Simplificar a equação é necessário, pois o objetivo é resolver a equação de forma analítica. Um coeficiente difusivo complexo será acoplado ao modelo para resgatar aspectos da dispersão resultantes da turbulência existente no meio. As soluções analíticas de modelos de dispersão de poluentes na literatura não descrevem essas características reais [Moreira et al., 2005b; Kumar et al., 2010; Jha et al., 2012; Alves et al., 2012].

Os poluentes na CLP são representados através das concentrações, absolutas ou relativas, dado que a concentração é a razão entre a quantidade de poluente e o volume de ar em que ele se encontra dissolvido [Stull, 1988]. Uma solução clássica parte da equação advecção-difusão onde concentração média do poluente é dada por volume de ar. Valores negativos podem ser encontrados descrevendo resultados não realísticos e impondo aplicações de técnicas para obter uma solução com propriedades de distribuição. A discussão da solução analítica da equação advecção-difusão apresentada a seguir demonstra que a presente abordagem obtém naturalmente a característica de semi-positividade, ou seja, de distribuição para a solução, assim como recupera características físicas do fenômeno apenas incluindo uma fase.

4.1 A Equação de Advecção-Difusão Simplificada

A equação de advecção-difusão é dada por

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

onde os termos do lado esquerdo são a variação temporal e advecção-difusão respectivamente já do lado direito da igualdade está a fonte e o termo difusivo [Arya, 1999]. Para o problema o termo de fonte F é retirado da Equação 4.1 para ser introduzido como uma condição de contorno. Reescreve-se o termo:

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

Assumindo que o escoamento da atmosfera é incompressível, desprezando os efeitos da compressão [Arya, 1999], portanto a hipótese adotada é:

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

No caso de uma atmosfera incompressível a propagação do som seria efeito inexistente, então existe sim a compressão, porém por simplicidade ela é desprezada. A Equação 4.2 é rearranjada e simplificada usando a hipótese de escoamento incompressível,

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

Agora a Equação 4.1 pode ser reescrita como:

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

A decomposição de Reynolds descreve todas as variáveis através de um termo médio mais uma flutuação [Stull, 1988]:

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

e assim substitui-se na Equação 4.5 obtendo,

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

Manipulando algebricamente e aplicando a média na Equação 4.7 tem-se:

$$\frac{\partial \overline{(\bar{C} + C')}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{(\bar{u}\bar{C} + \bar{u}C' + u'\bar{C} + u'C')}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{(\bar{v}\bar{C} + \bar{v}C' + v'\bar{C} + v'C')}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{(\bar{w}\bar{C} + \bar{w}C' + w'\bar{C} + w'C')}}{\partial z} = 0. \quad (4.8)$$

As médias de Reynolds [Stull, 1988] para quaisquer p e q variáveis são dadas da seguinte

forma:

$$\overline{p+q} = \bar{p} + \bar{q}, \quad (4.9)$$

$$\overline{\bar{p}} = \bar{p}, \quad (4.10)$$

$$\overline{\overline{p+q}} = \overline{p+q}, \quad (4.11)$$

$$\overline{p'} = 0 \quad e \quad \overline{q'} = 0, \quad mas \quad \overline{p'q'} \neq 0, \quad (4.12)$$

aplicando as devidas substituições apresentadas acima na Equação 4.8 chega-se a equação abaixo:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{\overline{\partial u' C'}}{\partial x} + \frac{\overline{\partial v' C'}}{\partial y} + \frac{\overline{\partial w' C'}}{\partial z} = 0. \quad (4.13)$$

Os fluxos turbulentos surgem em termos da concentração média na Equação 4.13, assim ela se torna subdeterminada precisando de um fechamento para os termos referentes as flutuações. Assim, a Lei de Fick é usada como hipótese de fechamento de primeira ordem. Ela descreve o transporte de qualquer grandeza física no sentido da maior para a menor concentração baseada na difusão molecular [Daily e Harleman, 1966], assim o poluente vai de regiões de concentração altas para as de menos concentração de poluentes [Seinfeld e Pandis, 1963]. Supõe-se que o fluxo turbulento é proporcional ao gradiente da concentração média. Portanto, substituí-se $\frac{\overline{\partial u' C'}}{\partial x}$, $\frac{\overline{\partial v' C'}}{\partial y}$ e $\frac{\overline{\partial w' C'}}{\partial z}$ por $-K_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x}$, $-K_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y}$ e $-K_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z}$ na Equação 4.13, onde por simplicidade \bar{C} será substituído por C . Agora a equação advecção-difusão está completa para usar em problemas analíticos de dispersão na atmosfera.

Na equação de advecção-difusão as variações dos coeficientes de difusão podem estar vinculados a presença de coordenada temporal e espacial para difusão anisotrópica e também a uma função de concentração. Com essa configuração se pode dizer que as flutuações para as diferentes direções comportam-se de maneira independente

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right). \quad (4.14)$$

A Equação 4.14 é o problema a ser resolvido, onde ele estará sujeito às seguintes condições:

- Contorno

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

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

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

- Inicial $C(x, y, z, 0) = 0$ para $t = 0$.
- A condição de fonte será discutida na Seção 4.5.1.
- As advecções verticais e transversais são suprimidas da equação.

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

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad (4.15)$$

onde C (g/m^3) concentração, u (m/s) velocidade na direção x (m). Os K 's (m^2/s) coeficientes de difusão das coordenadas espaciais. Sendo as condições de fluxo nulo no contorno, fontes contínuas com concentração nula no tempo inicial e constituída por fonte pontual.

4.2 Solução da Equação Advecção-Difusão Simplificada

Na Equação 4.15 usou-se uma separação de variáveis onde $C(x, y, z, t)$ pode ser escrita como:

$$C(x, y, z, t) = C_{xt}(x, t)C_y(y)C_z(z), \quad (4.16)$$

$$C_{yz} \frac{\partial C_{xt}}{\partial t} + C_{yz} u \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} = C_{yz} K_x \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} + C_{xt} K_y \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial y^2} + C_{xt} K_z \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial z^2}. \quad (4.17)$$

Dividindo a equação por $C_{xt}C_{yz}$:

$$\frac{1}{C_{xt}} \frac{\partial C_{xt}}{\partial t} + \frac{u}{C_{xt}} \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} - \frac{K_x}{C_{xt}} \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} = \frac{K_y}{C_{yz}} \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial y^2} + \frac{K_z}{C_{yz}} \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial z^2}, \quad (4.18)$$

existe uma contante de separação α onde,

$$\frac{1}{C_{xt}} \frac{\partial C_{xt}}{\partial t} + \frac{u}{C_{xt}} \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} - \frac{K_x}{C_{xt}} \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} = \frac{K_y}{C_{yz}} \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial y^2} + \frac{K_z}{C_{yz}} \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial z^2} = \alpha, \quad (4.19)$$

$$\frac{\partial C_{xt}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} = \alpha C_{xt}, \quad (4.20)$$

$$K_y \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial z^2} = \alpha C_{yz}. \quad (4.21)$$

Separar as variáveis y e z é o próximo passo:

$$K_y \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C_{yz}}{\partial z^2} - \alpha C_{yz} = 0, \quad (4.22)$$

a Equação 4.22 é reescrita,

$$C_z K_y \frac{d^2 C_y}{dy^2} + C_y K_z \frac{d^2 C_z}{dz^2} - \alpha C_y C_z = 0, \quad (4.23)$$

divide a equação por $C_y C_z$,

$$\frac{1}{C_y C_z} \left[C_z K_y \frac{d^2 C_y}{dy^2} + C_y K_z \frac{d^2 C_z}{dz^2} - \alpha C_y C_z \right] = 0, \quad (4.24)$$

$$-\frac{K_y}{C_y} \frac{d^2 C_y}{dy^2} = \frac{K_z}{C_z} \frac{d^2 C_z}{dz^2} - \alpha. \quad (4.25)$$

Há outra contante de separação, β :

$$-\frac{K_y}{C_y} \frac{d^2 C_y}{dy^2} = \frac{K_z}{C_z} \frac{d^2 C_z}{dz^2} - \alpha = \beta, \quad (4.26)$$

$$-K_y \frac{d^2 C_y}{dy^2} - \beta C_y = 0, \quad (4.27)$$

$$K_z \frac{d^2 C_z}{dz^2} - (\beta + \alpha) C_z = 0. \quad (4.28)$$

Ao obter as equações diferenciais separadas, dada pelas Equações 4.26, 4.27 e 4.28 torna-se possível obter a solução de cada uma delas.

Solução de C_y

Na Equação 4.27 divide-se por $-K_y$,

$$\frac{d^2 C_y}{dy^2} + \frac{\beta}{K_y} C_y = 0, \quad (4.29)$$

é suposto que a solução seja da forma,

$$C_y = e^{\lambda_a y} \quad C'_y = \lambda_a e^{\lambda_a y} \quad C''_y = \lambda_a^2 e^{\lambda_a y}, \quad (4.30)$$

$$\lambda_a^2 e^{\lambda_a y} + \frac{\beta}{K_y} e^{\lambda_a y} = 0, \quad (4.31)$$

$$\lambda_a = \pm \sqrt{\frac{-\beta}{K_y}}. \quad (4.32)$$

$$C_y = A e^{\lambda_a y} + B e^{-\lambda_a y}. \quad (4.33)$$

Portanto temos os seguinte casos:

Caso 1: Se $\beta < 0$ implica que $\lambda_a \in \mathbb{R}$ usando as condições de contorno $\frac{dC}{dy} = 0$ em $y = -L_y$ e $y = L_y$ para observar se a solução é trivial ou não. Derivando a Equação 4.33 e substituindo nos pontos,

$$\frac{dC_y(y)}{dy} = \lambda_a A e^{\lambda_a y} - \lambda_a B e^{-\lambda_a y} ; \quad (4.34)$$

$$\frac{dC_y(L_y)}{dy} = 0 ; \quad (4.35)$$

$$0 = \lambda_a A e^{\lambda_a L_y} - B \lambda_a e^{-\lambda_a L_y} ; \quad (4.36)$$

$$A = B e^{-2\lambda_a L_y} ; \quad (4.37)$$

$$\frac{dC_y(-L_y)}{dy} = 0 ; \quad (4.38)$$

$$0 = \lambda_a B e^{-2\lambda_a L_y} e^{-\lambda_a L_y} - B \lambda_a e^{\lambda_a L_y} ; \quad (4.39)$$

$$0 = \lambda_a B e^{-3\lambda_a L_y} - B \lambda_a e^{\lambda_a L_y} ; \quad (4.40)$$

$$0 = \lambda_a B \left(\underbrace{e^{-3\lambda_a L_y} - e^{\lambda_a L_y}}_{\neq 0} \right) . \quad (4.41)$$

Para que a condição de contorno seja verdade implica $B = 0$ assim a solução é trivial.

Caso 2: Se $\beta = 0$ implica que $\lambda_a = 0$ usando as condições de contorno $\frac{dC}{dy} = 0$ em $y = -L_y$ e $y = L_y$ para observar se a solução é trivial ou não. Observando a solução:

$$C_y(y) = A e^0 + B e^0 . \quad (4.42)$$

A condição de contorno é satisfeita ao derivar a solução da pela Equação 4.42, mas ela é trivial novamente.

Caso 3: Se $\beta > 0$ implica que $\lambda_a \in \mathbb{C}$ assim $\lambda_a = \pm mi$ onde $m = \sqrt{\frac{\beta}{K_y}}$ onde a solução neste caso é dada por

$$C_y(y) = A \cos(my) + B \sen(my) . \quad (4.43)$$

Derivando a solução e substituindo nos pontos das condições de contorno $\frac{dC}{dy} = 0$ em $y = -L_y$ e $y = L_y$ para observar se a solução é trivial ou não,

$$\frac{dC_y(y)}{dy} = -Am \sen(my) + Bm \cos(my) . \quad (4.44)$$

$$(4.45)$$

A derivada em $y = L_y$

$$\frac{dC_y(L_y)}{dy} = 0 ; \quad (4.46)$$

$$0 = -Am \operatorname{sen}(mL_y) + Bm \operatorname{cos}(mL_y) ; \quad (4.47)$$

$$B = \frac{A \operatorname{sen}(mL_y)}{\operatorname{cos}(mL_y)} . \quad (4.48)$$

A derivada em $y = -L_y$,

$$\frac{dC_y(-L_y)}{dy} = 0 ; \quad (4.49)$$

$$0 = -Am \operatorname{sen}(m(-L_y)) + Bm \operatorname{cos}(m(-L_y)) ; \quad (4.50)$$

$$0 = Am \operatorname{sen}(mL_y) + \frac{A \operatorname{sen}(mL_y)}{\operatorname{cos}(mL_y)} m \operatorname{cos}(mL_y) ; \quad (4.51)$$

$$0 = 2Am \operatorname{sen}(mL_y) . \quad (4.52)$$

Como $A \neq 0$ então $\operatorname{sen}(mL_y) = 0$, logo

$$m = \frac{n\pi}{L_y} ; \quad (4.53)$$

$$m = \sqrt{\frac{\beta}{K_y}} ; \quad (4.54)$$

$$\beta = K_y \left(\frac{n\pi}{L_y} \right)^2 , \quad (4.55)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots$. Ao substituir m na Equação 4.48 implica em $B = 0$ chegando a solução não trivial da equação em y ,

$$C_y(y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \operatorname{cos}\left(\frac{n\pi}{L_y} y\right) . \quad (4.56)$$

Solução de C_z

A partir da divisão da Equação 4.28 por $-K_z$,

$$K_z \frac{d^2 C_z}{dz^2} - (\beta + \alpha) C_z = 0 . \quad (4.57)$$

Seja $\gamma = -(\beta + \alpha)$, portanto a equação é dada por

$$\frac{d^2 C_z}{dz^2} + \frac{\gamma}{K_z} C_z = 0. \quad (4.58)$$

Observa-se que na Equação 4.58 é da mesma forma que a Equação 4.29 e possui as mesmas condições de contorno, ou seja, a solução é da mesma forma. Portanto a solução da equação em C_z é dada por

$$C_z(z) = \sum_{l=1}^{\infty} A_l \cos\left(\frac{l\pi}{L_z} z\right), \quad (4.59)$$

onde

$$m = \frac{l\pi}{L_z}, \quad (4.60)$$

$$m = \sqrt{\frac{\gamma}{K_z}}, \quad (4.61)$$

$$\gamma = K_z \left(\frac{l\pi}{L_z}\right)^2, \quad (4.62)$$

onde $l = 1, 2, 3, \dots$. Desta forma a expressão para α é obtida a partir das Equações 4.62 e 4.55,

$$\gamma = -(\beta + \alpha); \quad (4.63)$$

$$\alpha = - \left[K_y \left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2 + K_z \left(\frac{l\pi}{L_z}\right)^2 \right]. \quad (4.64)$$

Solução de C_{xt}

Para resolver a equação

$$\frac{\partial C_{xt}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} - \alpha C_{xt} = 0. \quad (4.65)$$

As condições de contorno são dadas por:

$$C_{xt}(x, 0) = 0, \quad (4.66)$$

$$C_{xt}(0, t) = 1, \quad (4.67)$$

onde a Equação 4.67 descreve uma delta em x . A técnica da transformada de Laplace [Özsisik, 1974] página 246 será aplicada tanto na variável x quanto em t para resolver a Equação 4.65. Primeiro aplica-se a transformada de Laplace na variável t transformando-a em s ,

$$\mathcal{L}_t \left[\frac{\partial C_{xt}}{\partial t} \right] + \mathcal{L}_t \left[u \frac{\partial C_{xt}}{\partial x} \right] - \mathcal{L}_t \left[K_x \frac{\partial^2 C_{xt}}{\partial x^2} \right] - \mathcal{L}_t [\alpha C_{xt}] = 0, \quad (4.68)$$

$$sC_{xs} - C_{xs}(x, 0) + u \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} - \alpha C_{xs} = 0. \quad (4.69)$$

Aplica-se a transformada na condição de contorno,

$$\mathcal{L}_t [C_{xt}(x, 0)] = 0, \quad (4.70)$$

$$\mathcal{L}_t [C_{xt}(0, t)] = \frac{1}{s}, \quad (4.71)$$

$$\mathcal{L}_t [C'_{xt}(0, t)] = 0, \quad (4.72)$$

$$sC_{xs} - \cancel{C_{xs}(x, 0)} + u \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} - \alpha C_{xs} = 0. \quad (4.73)$$

Reorganizando a equação e dividindo por $-K_x$

$$\frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} - \frac{u}{K_x} \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} - \frac{(s - \alpha)}{K_x} C_{xs} = 0. \quad (4.74)$$

Agora a transformada é na variável x para onde será representada por p ,

$$\mathcal{L}_x \left[\frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} \right] - \mathcal{L}_x \left[\frac{u}{K_x} \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} \right] - \mathcal{L}_x \left[\frac{(s - \alpha)}{K_x} C_{xs} \right] = 0, \quad (4.75)$$

$$\mathcal{L}_x \left[\frac{\partial^2 C_{xs}}{\partial x^2} \right] = p^2 C_{ps} - pC(0, s) - C'(0, s), \quad (4.76)$$

$$\mathcal{L}_x \left[\frac{u}{K_x} \frac{\partial C_{xs}}{\partial x} \right] = \frac{u}{K_x} [C_{ps} - C(0, s)], \quad (4.77)$$

$$\mathcal{L}_x \left[\frac{(s - \alpha)}{K_x} C_{xs} \right] = \frac{(s - \alpha)}{K_x} C_{ps}. \quad (4.78)$$

Reorganizando

$$\left(p^2 - \frac{u}{K_x} p - \frac{(s - \alpha)}{K_x} \right) C_{ps} + \frac{1}{s} \left(\frac{u}{K_x} - p \right) = 0. \quad (4.79)$$

Isolando C_{ps}

$$C_{ps} = \frac{\left(\frac{1}{s} p \right)}{\left(p^2 - \frac{u}{K_x} p - \frac{(s - \alpha)}{K_x} \right)} - \frac{\frac{1}{s} \frac{u}{K_x}}{\left(p^2 - \frac{u}{K_x} p - \frac{(s - \alpha)}{K_x} \right)}. \quad (4.80)$$

Descobre-se as raízes do polinômio do denominador,

$$A = \frac{1}{\sqrt{K_x}} \left(\frac{u}{2\sqrt{K_x}} - \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha} \right), \quad (4.81)$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{K_x}} \left(\frac{u}{2\sqrt{K_x}} + \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha} \right), \quad (4.82)$$

usando a tabela de funções da transformada de Laplace 7-1 da página 259 do livro Özisik, 1974, onde a e b são as raízes de p para calcular a Transformada inversa na variável x encontrando uma expressão para C_{xs} é preciso deixar as raízes A e B na forma como são apresentadas na tabela. Será usada as transformadas de número 11,

$$\frac{1}{(p+a)(p+b)} = \frac{1}{(p+(-A))(p+(-B))}, \quad (4.83)$$

dada por,

$$F(x) = \frac{e^{-(-A)x} - e^{-(-B)x}}{(-B) - (-A)} = \frac{e^{Ax} - e^{Bx}}{A - B}. \quad (4.84)$$

Agora aplica-se a transformada no outro termo usando o número 12 da tabela 7-1

$$\frac{p}{(p+a)(p+b)} = \frac{p}{(p+(-A))(p+(-B))}, \quad (4.85)$$

portanto a transformada é dada por

$$F(x) = \frac{(-A)e^{-(-A)x} - (-B)e^{-(-B)x}}{(-A) - (-B)} = \frac{-Ae^{Ax} + Be^{Bx}}{B - A}. \quad (4.86)$$

Considere

$$L_1 = \frac{1}{s}, \quad (4.87)$$

$$L_2 = \frac{u}{sK_x} \quad (4.88)$$

e e^{Bx} não representa fisicamente um problema e é desconsiderado,

$$C_{xs} = L_1 \frac{-Ae^{Ax} + Be^{Bx}}{B - A} - L_2 \frac{e^{Ax} - e^{Bx}}{A - B}, \quad (4.89)$$

$$C_{xs} = L_1 \frac{Ae^{Ax}}{A - B} - L_2 \frac{e^{Ax}}{A - B}, \quad (4.90)$$

$$C_{xs} = e^{Ax} \left(\frac{L_1 A - L_2}{A - B} \right), \quad (4.91)$$

$$C_{xs} = \frac{e^{Ax}}{(A - B)s} \left[\frac{u}{2K_x} - \frac{1}{\sqrt{K_x}} \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha} - \frac{u}{K_x} \right], \quad (4.92)$$

$$C_{xs} = \frac{e^{Ax}}{(A - B)s} \left[-\frac{u}{2K_x} - \frac{1}{\sqrt{K_x}} \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha} \right], \quad (4.93)$$

$$C_{xs} = \frac{e^{Ax}}{-2\frac{1}{\sqrt{K_x}} \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha} s} \left[-\frac{u}{2K_x} - \frac{1}{\sqrt{K_x}} \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha} \right], \quad (4.94)$$

$$C_{xs} = \frac{e^{Ax}}{2s} \left[\frac{u}{2K_x} \frac{1}{\frac{1}{\sqrt{K_x}} \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}} + 1 \right], \quad (4.95)$$

$$C_{xs} = \frac{e^{Ax}}{2s} \left[1 + \frac{u}{2\sqrt{K_x}} \frac{1}{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}} \right], \quad (4.96)$$

$$C_{xs} = \frac{e^{\frac{u}{2K_x}x}}{2} e^{-\left(\frac{1}{\sqrt{K_x}} \sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}\right)x} \frac{1}{s} \left[1 + \frac{u}{2\sqrt{K_x}} \frac{1}{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}} \right]. \quad (4.97)$$

Definindo uma função

$$F \left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x} \right) = e^{-\left(\frac{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}}{\sqrt{K_x}}\right)x} \left[\frac{1}{s} \left[1 + \frac{u}{2\sqrt{K_x}} \frac{1}{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}} \right] \right] \quad (4.98)$$

Convolução entre as duas funções

$$C_{xs} = \frac{e^{\left(\frac{u}{2K_x}\right)x}}{2} F \left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x} \right). \quad (4.99)$$

A função $F \left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x} \right)$ é o produto de duas funções, $\frac{1}{s}$ e $G \left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x} \right)$, onde

$$G \left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x} \right) = e^{-\left(\frac{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}}{\sqrt{K_x}}\right)x} \left[1 + \frac{u}{2\sqrt{K_x}} \frac{1}{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}} \right], \quad (4.100)$$

portanto

$$F\left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x}\right) = e^{-\left(\frac{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}}{\sqrt{K_x}}\right)x} \frac{1}{s} G\left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x}\right). \quad (4.101)$$

A transformada inversa de um produto é dada por uma convolução. Denotando $\mathcal{L}_t^{-1}\left[G\left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x}\right)\right]$ por $g(x, t)$ e levando em conta que $\mathcal{L}_t^{-1}\left[\frac{1}{s}\right] = 1$ se tem

$$\mathcal{L}_t^{-1}\left[F\left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x}\right)\right] = e^{-\left(\frac{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}}{\sqrt{K_x}}\right)x} \int_0^t 1g(x, t - \tau)d\tau, \quad (4.102)$$

ou

$$\mathcal{L}_t^{-1}\left[F\left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x}\right)\right] = e^{-\left(\frac{\sqrt{\frac{u^2}{4K_x} + s - \alpha}}{\sqrt{K_x}}\right)x} \int_0^t 1g(x, \tau)d\tau. \quad (4.103)$$

É importante observar que a função constante 1 é invariante frente à troca de t por $t - \tau$. Por simplicidade o cálculo será apresentado considerando a integral dada pela Equação 4.103, pois os desenvolvimentos são análogos.

Para continuar a propriedade de deslocamento de Heviside é aplicada para obter a transformada inversa da G . Conforme técnica na página 251, Özisik, 1974,

$$\mathcal{L}_t^{-1}\left[G\left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x}\right)\right] = e^{-(\frac{u^2}{4K_x} - \alpha)\tau} \mathcal{L}_t^{-1}[G_{xs}], \quad (4.104)$$

$$G_{xs} = e^{-\frac{\sqrt{s}}{\sqrt{K_x}}x} \left[1 + \frac{u}{2\sqrt{K_x}} \frac{1}{\sqrt{s}}\right], \quad (4.105)$$

$$G_{xs} = e^{-\frac{\sqrt{s}}{\sqrt{K_x}}x} - e^{-\frac{\sqrt{s}}{\sqrt{K_x}}x} \frac{u}{2\sqrt{K_x}} \frac{1}{\sqrt{s}}. \quad (4.106)$$

A transformada inversa em G através da tabela 7-1 número 41 e 43 página 261, Özisik, 1974,

$$\mathcal{L}_t^{-1}[G_{xs}] = \frac{x}{2\sqrt{K_x}\pi\tau^3} e^{\left(-\frac{x^2}{4K_x\tau}\right)} + \frac{u}{2\sqrt{K_x}\pi\tau} e^{\left(-\frac{x^2}{4K_x\tau}\right)}, \quad (4.107)$$

$$= e^{\left(-\frac{x^2}{4K_x\tau}\right)} \left[\frac{x}{2\sqrt{K_x}\pi\tau^3} + \frac{u}{2\sqrt{K_x}\pi\tau}\right], \quad (4.108)$$

$$C_{xt} = \frac{e^{\left(\frac{u}{2K_x}\right)x}}{2} \int_0^t e^{\left(\alpha - \frac{u^2}{4K_x}\right)\tau} e^{-\frac{x^2}{4K_x\tau}} \left[\frac{x}{2\sqrt{K_x\pi\tau^3}} + \frac{u}{2\sqrt{K_x\pi\tau}} \right] d\tau, \quad (4.109)$$

$$C_{xt} = \frac{e^{\left(\frac{u}{2K_x}\right)x}}{4} \int_0^t e^{\left(\alpha - \frac{u^2}{4K_x}\right)\tau} e^{-\frac{x^2}{4K_x\tau}} \left[\frac{x}{\sqrt{K_x\pi\tau^3}} + \frac{u}{\sqrt{K_x\pi\tau}} \right] d\tau. \quad (4.110)$$

Quando é obtido a solução C_{xt} basta multiplicar as três soluções para obter $C(x, y, z, t)$,

$$C(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} A_{nl} C_{xt} C_y C_z, \quad (4.111)$$

$$C(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} A_{nl} C_{xt} \cos\left(\frac{n\pi}{L_y} y\right) \cos\left(\frac{l\pi}{L_z} z\right). \quad (4.112)$$

4.3 Interpretação das Integrais Resultantes da Convolução

Há duas possibilidades para encontrar a transformada inversa da Equação 4.102. Ambas são apresentadas para encontrar a transformada inversa da $F\left(x, s - \alpha + \frac{u^2}{4K_x}\right)$. Para o desenvolvimento apresentado foi escolhida a segunda integral da expressão onde a solução é apresentada na Equação 4.110. No caso em que é optado pela outra abordagem, ou seja, utilizando a primeira integral, a solução é dada por:

$$C_{xt} = \frac{e^{\left(\frac{u}{2K_x}\right)x}}{4} \int_0^t e^{\left(\alpha - \frac{u^2}{4K_x}\right)(t-\tau)} e^{-\frac{x^2}{4K_x(t-\tau)}} \left[\frac{x}{\sqrt{K_x\pi(t-\tau)^3}} + \frac{u}{\sqrt{K_x\pi(t-\tau)}} \right] d\tau. \quad (4.113)$$

É dito que as Equações 4.102 e 4.103 dão resultados iguais, porém apenas quando as variáveis da solução são constante ao longo do tempo. Ao introduzir parâmetros dependentes do tempo percebe-se que essa igualdade não é cumprida. Esse comportamento é justificado, pois ao desenvolver a solução foi considerado que as variáveis eram contantes no tempo. Se houvesse um desenvolvimento que levasse em consideração essas variáveis dependentes do tempo as integrais se mostrariam iguais.

O fato da integral dada pela Equação 4.102 conseguir descrever uma fonte contínua por sequência de *puffs* diferenciais faz com que ela passe a ser sensível à variação no tempo dos parâmetros. Segundo Arya, 1999, uma fonte contínua no tempo pode ser representada como uma sequência de emissões discretas, de forma que a concentração final é dada pela integral temporal da contribuição de cada *puffs* isso acaba justificando porque esse método responde à variações no tempo. Essa interpretação permite um recurso interessante para a modelagem de processos que deixam incluir uma variação temporal de parâmetros que

antes eram considerados constantes para obtenção da solução, como a velocidade do vento e os coeficientes de difusão. Se esses parâmetros variarem lentamente podemos considerá-los como constantes durante emissão de cada *puff* e obter a concentração final integrando a contribuição total dos *puffs* que acaba descrevendo comportamentos de variação temporal dos parâmetros.

Nas condições em que os parâmetros não variam no tempo, dispensando a necessidade da interpretação de *puffs*, é conveniente computacionalmente a utilização da solução apresentada anteriormente na Equação 4.102. Esta interpretação permite que, ao se calcular a concentração para $C(t + \delta)$ se utilize a integração calculada para $C(t)$, reduzindo o número de operações computacionais necessárias, enquanto que na interpretação de *puffs*, devido ao deslocamento temporal ($t - \tau$), é necessário calcular a integral sobre todo o intervalo de integração à cada passo de tempo.

A solução do modelo apresentada na Equação 4.112 mostra um vento apenas na direção x . Com o método da proposta da Equação 4.102 é possível construir um mecanismo para descrever a mudança de direção do vento durante a simulação através de mudanças de coordenadas. Com esse mecanismo além de mudar o vento o poluente lançado no tempo anterior à mudança de direção do vento ainda é contabilizado nos casos onde o vento tiver velocidades baixas.

4.4 Reintrodução da Não-Linearidade

Impõem-se restrições na descrição do fenômeno de dispersão de poluentes ao substituir os fluxos turbulentos por um gradiente de concentração média eliminando a não-linearidade do problema e os efeitos turbulentos. Para Holmes et al., 1996, os termos não-lineares são essenciais para a turbulência e ao linearizar o problema, este é destruído. Ou seja, retirar esta característica que transforma a ocorrência de cada evento de dispersão de poluentes de forma única desvirtua as chances do modelo reproduzir a dispersão de forma realística.

Segundo Tirabassi e Vilhena, 2012, a teoria K é usada devido a simplicidade em a implementar. Como toda simplificação ela possui limitações, neste caso, aparecem justamente quando o fenômeno da turbulência é o ator principal à ser descrito. Corrsin, 1974, afirmou que transferência de gradiente descreve o fenômeno com maior precisão quando o tamanho do material a ser dispersado é muito maior do que os vórtices formados

no processo da dispersão, ou seja, quando a emissão se estende por grandes distâncias os resultados tornam-se inconsistentes.

Outro cenário em que a teoria K não possui um resultado satisfatório é para casos onde os movimentos convectivos dominam a camada limite convectiva em períodos de instabilidade atmosférica. Isso vem do fato que a lei não é capaz de descrever o transporte não homogêneo da camada e das rápidas variações de concentração Robson, 1987, que dão origem à fenômenos interessantes, como o fluxo de contra gradiente observado em terrenos onde se encontram florestas. Tais locais são chamados de dossel florestal. A justificativa para o fracasso de modelos de fluxo de gradiente em terrenos de dossel florestal é a entrada esporádica do transporte de *eddies* no dossel e sua grande escala [Denmead e Bradley, 1985].

Outra dificuldade relatada por Anfossi et al., 2005, Moreira et al., 2005a, e Oetli et al., 2005, sugere que modelos que usam a teoria K não obtém resultados condizentes com a realidade para cenários onde a velocidade do vento é baixa, ou seja, menor que 2 m/s . Nestas situações há forte estabilidade e estagnação do ar caracterizando a difusão como não estacionária e não homogênea sendo dominada pelas flutuações na direção do vento [Anfossi et al., 1990].

Os problemas inerentes apontados da teoria K ocorrem justamente quando os cenários impõem a necessidade de um mecanismos para reproduzir efeitos ligados à turbulência, que é ausente na teoria K. Vilhena et al., 2012, afirma que o fechamento K aproxima incorretamente condições de forte turbulência. E acredita que ao recuperar informações que foram perdidas no fechamento os modelos passarão a descrever melhor esse tipo de cenário. Vilhena et al., 2012, também disse que uma forma de recuperar a não-linearidade implicaria em uma dependência de K relacionada a concentração, porém até agora não há lei específica conhecida. Uma primeira suposição simples para esta lei poderia ser dada através de um coeficiente $K_z = K_{z0} + K_{z1}C + K_{z2}C^2$ polinomial quadrático da concentração.

Então pela ausência de não-linearidade em modelos de advecção-difusão que aplicam a hipótese de Fick e a discussão demonstrando a necessidade de recuperar efeitos não-lineares para aprimorar os modelos analíticos determinísticos. O presente modelo usará uma modificação no fechamento Fikiano, que no nosso entendimento é necessário para recuperar características imprescindíveis ao fenômeno da dispersão de poluentes que

foram desconsideradas. Como primeira tentativa de inserir características oriundas de comportamentos turbulentos no modelo para que ele produza características realísticas na dispersão de poluentes, mas sem propor uma modificação drástica no coeficiente mantendo todo pré-conhecimento já adquirido pelo fechamento K , tão difundido em modelos de dispersão de poluentes, um coeficiente complexo é proposto. Para obter soluções compatíveis para o modelo na Seção 3.1 foi discutido a ideia física que fundamenta os passos a seguir. Ao se introduzir o coeficiente de difusão vertical K_z complexo na solução de advecção-difusão um funcional sesquilinear é aplicado $A(\cdot, \cdot)$ para descrever a parte real e imaginária. Multiplicar a solução complexa pela solução complexa conjugada implica em uma solução no corpo dos \mathbb{R} . Assim o resultado da aplicação deste funcional representa a parte observável, ou seja a concentração de poluentes descrita por uma função densidade de probabilidade.

Uma definição de Churchill e Brown, 1974, diz que o complexo de uma constante é representado por $K_z = K_{za} + iK_{zb}$, onde K_{za} é a parte real e K_{zb} é a parte imaginária e o seu complexo conjugado é escrito como $K_z^* = K_{za} - iK_{zb}$. Assim, portanto a solução do modelo será renomeada para diferenciar quando ela está no corpo dos complexos ou não,

$$\mathcal{C}(x, y, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} A_{nl} \mathcal{C}_{xt} \cos\left(\frac{n\pi}{L_y}\right) \cos\left(\frac{l\pi}{L_z}\right) \quad (4.114)$$

$$\mathcal{C}_{xt} = \frac{e^{\left(\frac{u}{2K_x}\right)x}}{4} \int_0^t e^{\left(\alpha_c - \frac{u^2}{4K_x}\right)\tau} e^{\left(-\frac{x^2}{4K_x\tau}\right)} \left[\frac{x}{\sqrt{K_x\pi\tau^3}} + \frac{u}{\sqrt{K_x\pi\tau}} \right] d\tau \quad (4.115)$$

$$\alpha_c = - \left[K_y \left(\frac{n\pi}{L_y}\right)^2 + K_z \left(\frac{l\pi}{L_z}\right)^2 \right] \quad (4.116)$$

$$K_z = K_{za} + iK_{zb} \quad (4.117)$$

A solução dada por $\mathcal{C}^*(x, y, z, t)$ definida como solução complexa conjugada, é dada por

$$\mathcal{C}^*(x, y, z, t) = \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=1}^{\infty} A_{n'l'} \mathcal{C}^*(x, t) \cos\left(\frac{n'\pi}{L_y}y\right) \cos\left(\frac{l'\pi}{L_z}z\right). \quad (4.118)$$

Ao multiplicar $\mathcal{C}(x, y, z, t)$ e $\mathcal{C}^*(x, y, z, t)$ obtém-se uma concentração real, dita semi-positiva definida, garantindo a positividade da solução. Antes de multiplicar as soluções é necessário calcular A_{nl} e $A_{n'l'}$ para isso a condição da fonte precisa ser determinada. Há duas condições que foram estudadas no modelo. A fonte na forma de deltas e outra na forma de gaussianas.

4.5 Condições de Fonte

4.5.1 Fonte Delta

A condição de fonte delta aplicada no contorno é dada por:

$$\mathcal{C}(0, y, z, t) = \sqrt{\frac{\dot{Q}}{u}} \delta(y - y_0) \delta(z - H_s), \quad (4.119)$$

onde \dot{Q} é intensidade da fonte, y_0 e H_s são as coordenadas transversal e vertical da fonte.

A norma generalizada [Butkov, 1968] é aplicada,

$$A_{nl} = \frac{\int_0^{L_z} \int_{-L_y}^{L_y} \mathcal{C}(0, t) \sqrt{\frac{\dot{Q}}{u}} \delta(y - y_0) \delta(z - H_s) \phi_{nl} dy dz}{\int_0^{L_z} \int_{-L_y}^{L_y} \mathcal{C}^2(0, t) \phi_{nl}^2 dy dz}, \quad (4.120)$$

devido $C(0, t) = 1$ dada na Equação 4.67 implica no valor de $\mathcal{C}(0, t) = 1$. Como

$$\phi_{nl} = \cos\left(\frac{n\pi}{L_y}\right) \cos\left(\frac{l\pi}{L_z}\right), \quad (4.121)$$

se tem

$$A_{nl} = \frac{2\sqrt{\dot{Q}} \phi_{nl}(y_0, H_s)}{\sqrt{u} L_y L_z}. \quad (4.122)$$

Não esquecendo de calcular de forma análoga coeficiente da solução complexa conjugada.

4.5.2 Fonte Gaussiana

A descrição matemática da condição de fonte gaussiana no contorno pode ser dada por

$$\mathcal{C}(0, y, z, t) = \sqrt{\frac{\dot{Q}}{u}} \frac{1}{2\pi\sigma^2} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{(z-H_s)^2}{2\sigma^2}}, \quad (4.123)$$

onde a variável σ é o parâmetro responsável por quanto a pluma irá alargar. Usando a Equação 4.123 para calcular A_{nl} e aplicando norma generalizada Butkov, 1968,

$$A_{nl} = \frac{\int_0^{L_z} \int_{-L_y}^{L_y} \mathcal{C}(0, t) \frac{1}{2\pi\sigma^2} \sqrt{\frac{\dot{Q}}{u}} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{(z-H_s)^2}{2\sigma^2}} \phi_{nl} dy dz}{\int_0^{L_z} \int_{-L_y}^{L_y} \mathcal{C}^2(0, t) \phi_{nl}^2 dy dz} \quad (4.124)$$

os coeficientes da fonte gaussiana são determinados de forma análoga à fonte delta pela Equação 4.119, sendo necessário resolver a integral

$$I = \int_{-L_y}^{L_y} e^{-\frac{1}{2} \frac{(y-y_0)^2}{\sigma^2}} \cos\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) dy \quad (4.125)$$

e sua contraparte em z . Através do método da integral de Cauchy, assumindo $L_y \gg \sigma$ ela resulta em

$$I = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos\left(\frac{n\pi y_0}{L_y}\right) e^{-\left(\frac{n\pi\sigma}{\sqrt{2}L_y}\right)^2}, \quad (4.126)$$

lembrando que o valor da integral em z deve ser dividida por dois para respeitar o limite de integração. A expressão final para o coeficiente da solução complexa é expressa por

$$A_{nl} = \frac{\sqrt{Q} e^{-\left(\frac{n\pi\sigma}{\sqrt{2}L_y}\right)^2} e^{-\left(\frac{l\pi\sigma}{\sqrt{2}L_z}\right)^2} \phi_{nl}(y_0, H_s)}{\sqrt{u} L_y L_z \pi^2 \sigma^2}. \quad (4.127)$$

O processo para calcular o coeficiente da solução complexa conjugada é análogo.

E para obter a solução final para ambas abordagens, fonte delta ou fonte gaussiana, multiplica-se a solução complexa $\mathcal{C}(x, y, z, t)$ pela complexa conjugada $\mathcal{C}^*(x, y, z, t)$. Como já foi discutido existe a necessidade de usar a interpretação dada para fenômenos eletromagnéticos encontrar a distribuição de concentração do modelo.

$$C(x, y, z, t) = \mathcal{C}(x, y, z, t) \mathcal{C}^*(x, y, z, t) \quad (4.128)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{n'=1}^{\infty} \sum_{l'=1}^{\infty} A_{nl} A_{n'l'} \mathcal{C}_{xt} \mathcal{C}_{xt}^* \phi_{nl} \phi_{n'l'} \quad (4.129)$$

Cumprе enfatizar, que aparecem termos com os mesmos índices nas somas das equações e também termos cruzados. Estes termos cruzados $\mathcal{C}_i \mathcal{C}_j^*$, $\mathcal{C}_j \mathcal{C}_i^*$ que são gerados na multiplicação das duas formas sesquilineares causam o aparecimento de oscilações. Essas manifestações dos efeitos decorrentes da fase, portanto, representam a propriedade de uma estrutura coerente que pode ser interpretada como proveniente de turbilhões.

Quando relembra-se a teoria de interferência de fase dando ênfase o experimento de dupla fenda observam-se que há o efeito de interferência a partir da presença de duas fontes de luz, caso contrário não é observado o fenômeno. Usando essa característica resolve-se agregar mais duas fontes ao modelo que foi apresentado em Gisch, 2014.

4.6 Parametrização da Turbulência

Modelos baseados na teoria K incorporaram parametrizações turbulentas que visam a representação física de mecanismos turbulentos e cisalhantes. Desta forma é possível descrever condições de estabilidade instável e estável [Mangia et al., 2002]. O coeficiente vertical deste modelo é apresentado da forma

$$K_z = K_{za}\mathcal{P}(z) + iK_{zb}. \quad (4.130)$$

As funções para $\mathcal{P}(z)$ aplicadas neste trabalho são apresentadas abaixo.

4.6.1 Perfil Trigonômétrico Simétrico

A primeira abordagem foi usar um perfil trigonométrico:

$$\mathcal{P}(z) = \text{sen} \left(\frac{z\pi}{L_z} \right). \quad (4.131)$$

O perfil deste coeficiente é apresentado na Figura 4.1, representado por TRI. Para as primeiras avaliações e construções de gradientes de concentração, à análise do comportamento do modelo frente a variações de parâmetros esse perfil carregava as informações necessária com baixa complexidade.

4.6.2 Perfil Trigonômétrico de CLE

O objetivo de aplicar o segundo perfil trigonométrico era obter um perfil aproximado à forma de um perfil de camada limite estável, porém também sem as informações micrometeorológicas.

$$\mathcal{P}(z) = \text{sen} \left(\frac{\pi\sqrt{z}}{\sqrt{L_z}} \right), \quad (4.132)$$

O perfil deste coeficiente é apresentado na Figura 4.1, representado por TRI_{CLE}.

4.6.3 Perfil Trigonômétrico de CLC

Já o terceiro perfil trigonométrico é uma aproximação à forma de um perfil de camada limite convectiva, porém também sem as informações micrometeorológicas.

$$\mathcal{P}(z) = \text{sen} \left[\pi \left(\frac{z}{L_z} \right)^{1.5} \right]. \quad (4.133)$$

O perfil deste coeficiente é apresentado na Figura 4.1, representado por TRI_{CLC} .

4.6.4 Perfis por Aproximantes de PADÉ

Para que os perfis continuassem a possuir baixa complexidade de interpretação construiu-se coeficientes de difusão turbulenta vertical que possuíssem uma forma semelhante à formulações [Degrazia et al., 1997] e [Degrazia et al., 1996b], mas que descrevessem intrinsecamente as variáveis meteorológicas. Lembrando que os perfis são acoplados à parte real do perfil.

A partir dos perfis algébricos de Degrazia et al., 1997, para CLC e Degrazia et al., 1996b, para CLE foi construído perfis na forma polinômios racionais usando a técnica de aproximantes de PADÉ [Aguilera-Navarro et al., 1999]. Para camada limite estável um polinômio racional PR_{CLE} de ordem 2 numerador e de ordem 3 no denominador aproximado do ponto 0,2 normalizado pelo máximo no intervalo $[0, 1]$ foi aplicado como perfil é dado por:

$$\mathcal{P}(z) = PR_{CLE}, \quad (4.134)$$

$$PR_{CLE} \approx (1,27 \times 10^{-4} z_n - 2,08 \times 10^{-4} (z_n - 0,2)^2 + 1,00 \times 10^{-5}) / (4,11 z_n + 13,14 (z_n - 0,2)^3 + 8,82 (z_n - 0,2)^2 + 0,17) 3,54 \times 10^{-5} \quad (4.135)$$

onde $z_n = \frac{z}{z_i}$. O perfil deste coeficiente é apresentado na Figura 4.1, representado por PR_{CLE} .

Na camada limite convectiva a mesma técnica foi aplicada onde um polinômio racional PR_{CLC} ordem 2 numerador e ordem 1 no denominador aproximado do ponto 0,5 normalizado pelo máximo no intervalo $[0, 1]$. Assim foi possível obter perfis que conservavam características físicas sem a necessidade de incluir parâmetros micrometeorológicos mantendo abordagem simplificada do modelo. E a forma do coeficiente,

$$\mathcal{P}(z) = PR_{CLC}, \quad (4.136)$$

$$PR_{CLC} \approx (52,23 z_n - 2405,37 (z_n - 0,5)^2 + 651,59) / (-0,48 z_n + 1,24) 692,66. \quad (4.137)$$

O perfil deste coeficiente é apresentado na Figura 4.1, representado por PR_{CLC} .

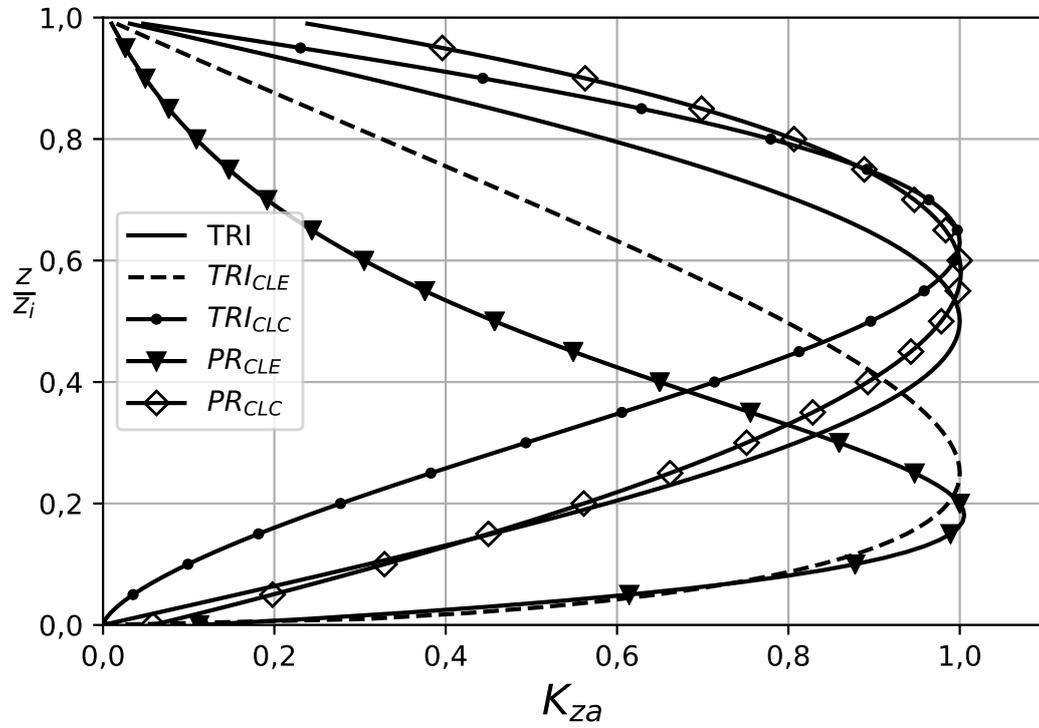


Figura 4.1 – Perfis da parte real do coeficiente de difusão turbulenta assumindo $K_{za} = 1$.

5 AVALIAÇÃO DO MODELO SESQUILINEAR

Dados micrometeorológicos são fundamentais para a compreensão dos fenômenos que ocorrem na atmosfera assim como a dispersão de poluentes que ocorre na camada limite planetária. Eles são fatores que afetam diretamente o comportamento do processo de dispersão, portanto são usados para classificar e assim buscar um entendimento global do processo da dispersão de poluentes. Depois da metade do século XX as primeiras medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e variáveis micrometeorológicas foram realizadas com o intuito de encontrar relações entre fatores micrometeorológicos e a difusão atmosférica, pois a micrometeorologia sempre baseou-se nos experimentos de campo para guiar seus estudos na área [Stull, 1988].

Inúmeras medidas de concentrações foram realizadas a fim de mapear a distribuição espacial e temporal de traçadores medindo a diferentes latitudes e longitudes da fonte, em estabilidades atmosféricas e cenários topológicos diferentes. Os experimentos mais famosos e consolidados no meio acadêmico são os que foram realizados em Prairie Grass nos Estados Unidos [Barad, 1958] e o experimento de Copenhagen na Dinamarca [Gryning, 1981].

Para que modelos sejam aprovados para o uso de monitoramento eles precisam ser testados e validados. O modelo precisa ser capaz de incorporar uma descrição real dos processos físicos que governam o sistema a ser modelado e produzir boas estimativas dos dados observados através de experimentos [Venkatram, 1988]. A forma de validar um modelo novo é usando experimentos de dispersão de poluentes consolidados, dados de monitoração de qualidade do ar realizados por um longo período e também comparação de resultados obtidos por outros modelos de dispersão de poluentes. Inserem-se os parâmetros reais no modelo à ser testado, simulam-se e comparam-se os resultados obtidos às informações prévias já validadas. Medidas estatísticas largamente difundidas apresentadas por Hanna, 1989, avaliam a qualidade de predição do modelo. Se os modelos obtiverem bons resultados na predição podem vir à se tornar uma ferramenta que auxilia o monitoramento e controle da qualidade do ar.

5.1 Experimento de Copenhagen

Os experimentos ocorreram ao norte da cidade de Copenhagen na Dinamarca, onde um gás traçador Hexafluoreto de Enxofre (SF_6) foi liberado sem empuxo de uma torre de 115 (m) de altura e foi coletado ao nível do solo ($z = 0$) por três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem (arcos) foram posicionadas em distâncias de 2 (m) à 6 (m) do ponto de lançamento. A liberação do traçador teve início 1h antes da amostragem e parou ao final do mesmo período de 1h, com imprecisões de 10 %. A região do experimento era considerada plana com uma rugosidade de 0,6 (m) onde não há presença do vento.

Na Figura 5.1 mostra-se o desenho do experimento de Copenhagen. A linha cheia indica o litoral de Øresund. O eixo x está apontando para Leste, o eixo y para norte e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos nos arcos concêntricos em relação à fonte que se encontra na origem.

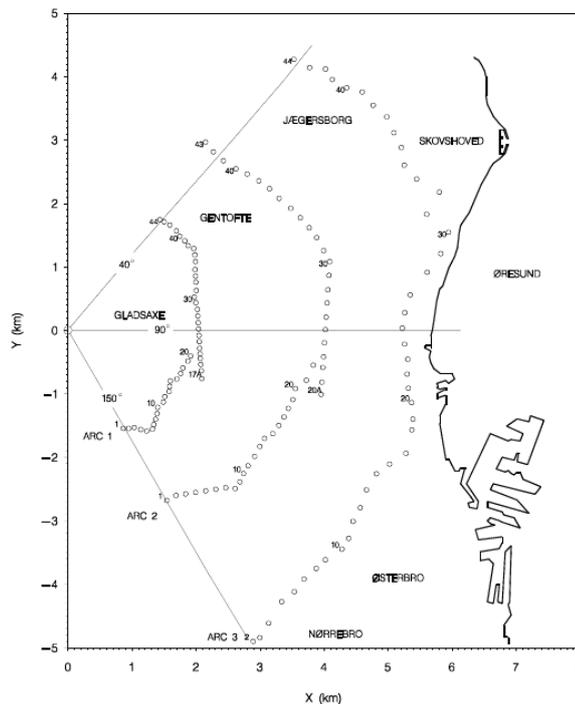


Figura 5.1 – Representação esquemática do experimento de Copenhagen.

[Fonte: Gryning e Lyck, 2002]

Os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão na CLC de Copenhagen

à serem utilizados no modelo estão descritos na Tabela 5.1, onde u (m/s) é a velocidade do vento médio, u_* (m/s) representa a velocidade de fricção, L (m) é o comprimento de Monin-Obukhov e w_* (m/s) é a escala de velocidade convectiva vertical calculada pela expressão

$$w_* = -u_* \left(\frac{z_i}{kL} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (5.1)$$

onde k é constante de von-Kármán, H_s (m) é a altura da fonte e z_i (m) é a altura da CLC [Stull, 1988]. Estes dados meteorológicos são médias horárias.

Tabela 5.1 – Parâmetros meteorológicos do experimento de Copenhagen.

[Fonte: Gryning e Lyck, 1984]

EXP	$u(m/s)$	$u_*(m/s)$	$L(m)$	$w_*(m/s)$	$z_i(m)$	$\Gamma(^{\circ}C/100m)$	$x(m)$	C^1
1	3,4	0,37	-46	1,76	1980	-3,33	1900	$1,05 \cdot 10^{-6}$
							3700	$2,14 \cdot 10^{-7}$
2	10,6	0,74	-384	1,72	1920	-3,07	2100	$9,85 \cdot 10^{-7}$
							4200	$2,83 \cdot 10^{-7}$
3	5	0,39	-108	1,15	1120	-2,52	1900	$1,63 \cdot 10^{-6}$
							3700	$7,95 \cdot 10^{-7}$
							5400	$3,76 \cdot 10^{-7}$
4	4,6	0,39	-173	0,69	390	-2,06	4000	$1,57 \cdot 10^{-6}$
5	6,7	0,46	-577	0,69	820	-1,54	2100	$1,21 \cdot 10^{-6}$
							4200	$7,24 \cdot 10^{-7}$
							6100	$4,75 \cdot 10^{-7}$
6	13,2	1,07	-569	1,91	1300	-3,99	2000	$7,44 \cdot 10^{-7}$
							4200	$3,37 \cdot 10^{-7}$
							5900	$1,74 \cdot 10^{-7}$
7	7,6	0,65	-136	2,1	1850	-4,65	2000	$9,48 \cdot 10^{-7}$
							4100	$2,62 \cdot 10^{-7}$
							5300	$1,15 \cdot 10^{-7}$
8	9,4	0,7	-72	2,13	810	-7,63	1900	$9,76 \cdot 10^{-7}$
							3600	$2,64 \cdot 10^{-7}$
							5300	$9,80 \cdot 10^{-8}$
9	10,5	0,77	-382	1,84	2090	-3,25	2100	$8,52 \cdot 10^{-7}$
							4200	$2,66 \cdot 10^{-7}$
							6000	$1,98 \cdot 10^{-7}$

¹ $C = C(x, 0, 0)/\dot{Q}(sm^{-3})$

O experimento foi classificado por Panofsky e Dutton, 1984, através da razão entre a altura da CLC e o comprimento de Monin-Obukhov determinando o tipo de convecção

do experimento através do parâmetro de estabilidade,

$$\frac{z_i}{|L|} < 5 \text{ convecção fraca;} \quad (5.2)$$

$$5 < \frac{z_i}{|L|} < 10 \text{ convecção moderada;} \quad (5.3)$$

$$\frac{z_i}{|L|} > 10 \text{ convecção alta.} \quad (5.4)$$

5.2 Cenário Linhares Geração S.A.

A poluição com altas concentrações de um dado poluente na atmosfera podem ser classificadas como agudas, ou crônicas. Curtos períodos de tempo são as chamadas emissões agudas como exemplo queimadas e incêndios. Já a crônica está relacionada a uma exposição prolongada como processos industriais e de geração de energia, onde os níveis emissão necessitam ser avaliados e controlados periodicamente. Este trabalho é uma exigência de órgãos como a CONAMA, que precisam controlar a emissão de particulados e gases na atmosfera. Esse controle é realizado através de várias frentes e modelagem é uma delas.

A usina termoeletrica de Linhares S.A. é um dos cenários onde o modelo de dispersão de poluentes sesquilinear será aplicado com o intuito de modelar o gradiente de concentração na vizinhança de 225 km² visto na Figura 5.4a. A usina está situada na região sudeste do Brasil no estado do Espírito Santo no município de Linhares, segundo o IBGE (Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística) no último censo do ano de 2010 onde havia 141.306 mil habitantes vivendo na área de 3503,699 km² deste município.

Só a cidade de Linhares possui em seu território três unidades de conservação reserva de Sooretama, Floresta Nacional de Goytacazes e reserva Biológica de Comboios na Figura 5.2. “ Unidades de conservação são espaços territoriais, incluindo seus recursos ambientais, com características naturais relevantes, que têm a função de assegurar a representatividade de amostras significativas e ecologicamente viáveis das diferentes populações, habitats e ecossistemas do território nacional e das águas jurisdicionais, preservando o patrimônio biológico existente.” segundo o Ministério Meio Ambiente - MMA [MMA-Conceitos, 2018].

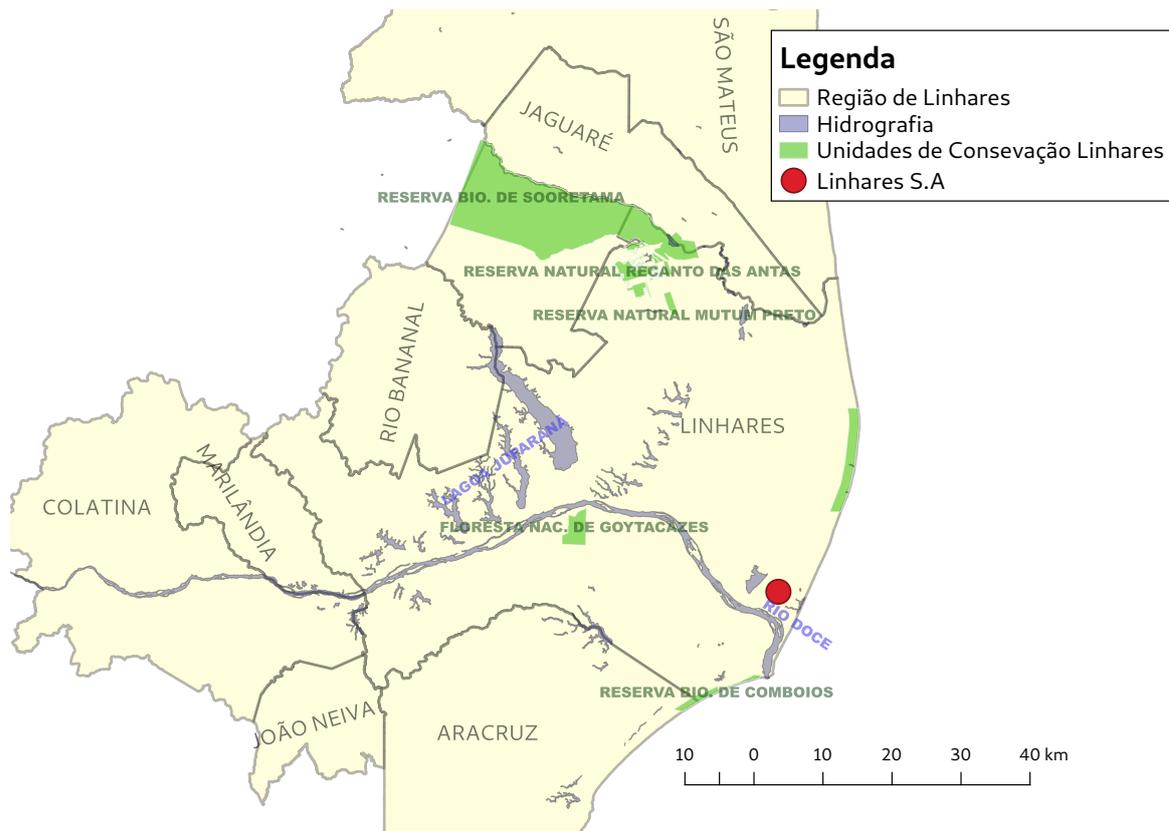


Figura 5.2 – Unidades de conservação de Linhares - ES.
 [Dados obtidos em MMA-Geoprocessamento, 2018]

O fato da usina estar inserida dentro de uma área prioritária de conservação assim como ser circundada por outras conforme Figura 5.3 aumenta ainda mais a importância de estudos e monitoração prévia da poluição atmosférica garantindo que os níveis estejam sempre dentro dos limites impostos pelo CONAMA.

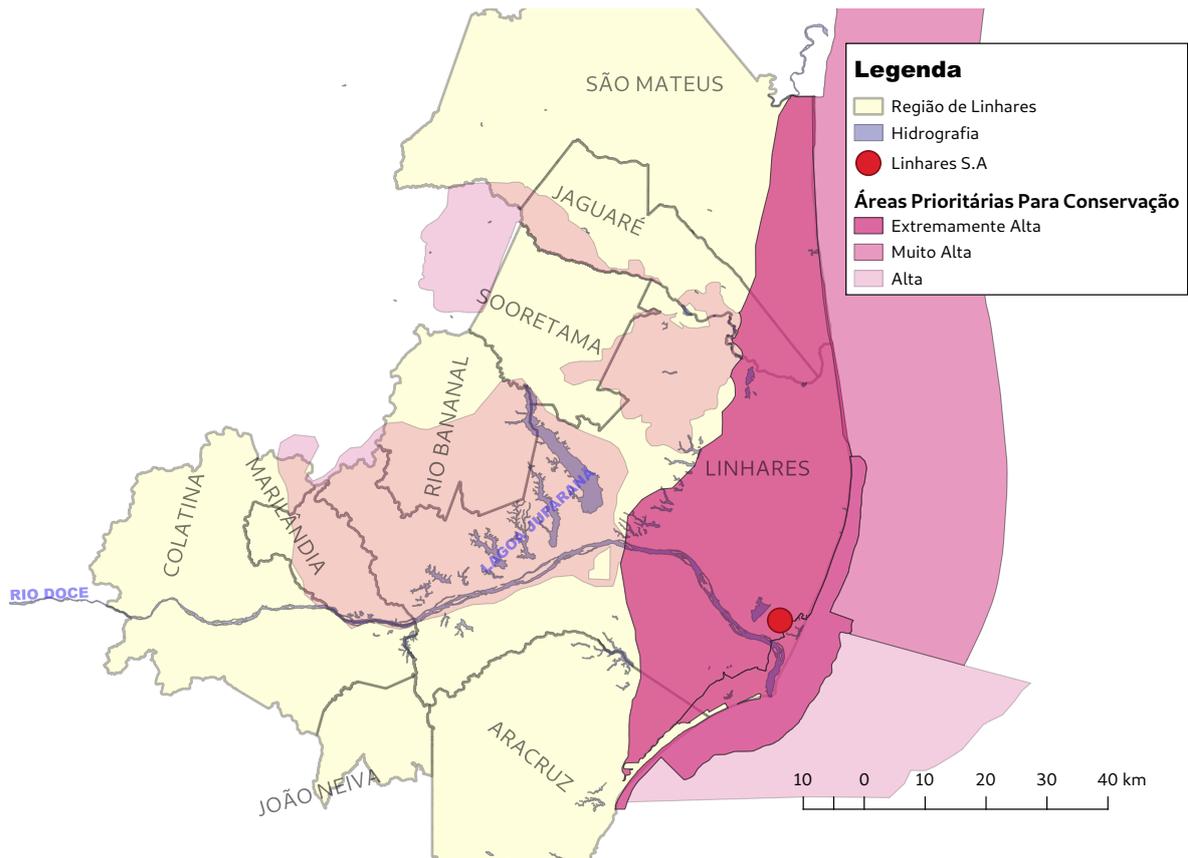
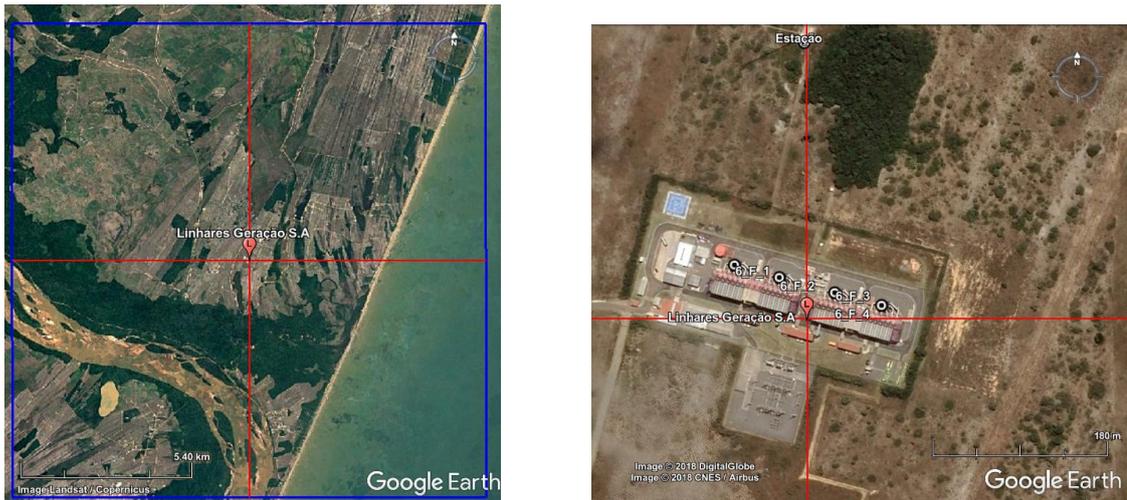


Figura 5.3 – Áreas prioritárias para conservação de Linhares - ES. Essas áreas prioritárias foram o resultados da 1ª atualização - foram reconhecidas mediante portaria N°9, de 23 de janeiro de 2007. [Dados obtidos em MMA-AP, 2007]

5.2.1 A Usina Termoelétrica

A localização da usina através de coordenadas geográficas é dada por $19^{\circ}32'2.38''S$ $39^{\circ}48'2.94''O$ e há uma estação micrometeorológica construída em $19^{\circ}31'53.00''S$ $39^{\circ}48'3.00''O$ que está aproximadamente 287 metros de distância da usina. Estão identificadas na Figura 5.4b a usina, a estação e as 24 fontes de emissão. As fontes estão dispostas em 4 blocos denominados, 6_F_1, 6_F_2, 6_F_3 e 6_F_4, onde cada bloco contém 6 fontes.



(a) Região de 225 km² no entorno da usina Linhares S.A.

(b) Usina Termoeletrica Linhares S.A com identificação das fontes e Estação Meteorológica.

Figura 5.4 – Imagens da usina Linhares S.A., um dos cenários de simulação deste modelo. [Fonte: Programa do *Google Earth*]

Por simplicidade o modelo terá 4 fontes onde cada fonte tem o fluxo de saída referente à soma de 6 fontes. Assim as 24 fontes do sistema real estão contidas neste conjunto de 4 fontes. Abaixo as coordenadas geográficas, alturas e fluxos de saída das 4 fontes:

Tabela 5.2 – Dados das fontes da Usina Termoeletrica de Linhares S.A.

Fontes	Latitude ¹	Longitude ¹	Altura (m)	NO ₂ (g/s) ²	SO ₂ (g/s) ²
6_F_1	19°32'0.49"S	39°48'5.48"O	20	17,26	1,64
6_F_2	19°32'0.91"S	39°48'3.89"O	20	17,26	1,64
6_F_3	19°32'1.42"S	39°48'1.92"O	20	17,26	1,64
6_F_4	19°32'1.85"S	39°48'0.28"O	20	17,26	1,64

¹ Posicionamento geográfico calculado através do programa *Google Earth*;

² Fluxo de saída referente às 6 fontes. [Dados obtidos em Schramm, 2016]

A altitude média da cidade de Linhares não passa de 28 metros. O ponto com maior elevação está à oeste na divisa com a cidade de São Rafael, chegando a 800 metros altura. O perfil de elevação da cidade decresce no sentido oeste para leste atingindo 0 metros na costa Atlântica. A região de 225 quilômetros quadrados, tendo a usina como

ponto central, é uma planície de baixa altitude devido a proximidade com a costa, assim a topografia é dita plana. Um aspecto importante à ser observado, na Figura 5.5, são as fontes que encontram-se em alturas superiores à altitude máxima do terreno no entorno da usina.

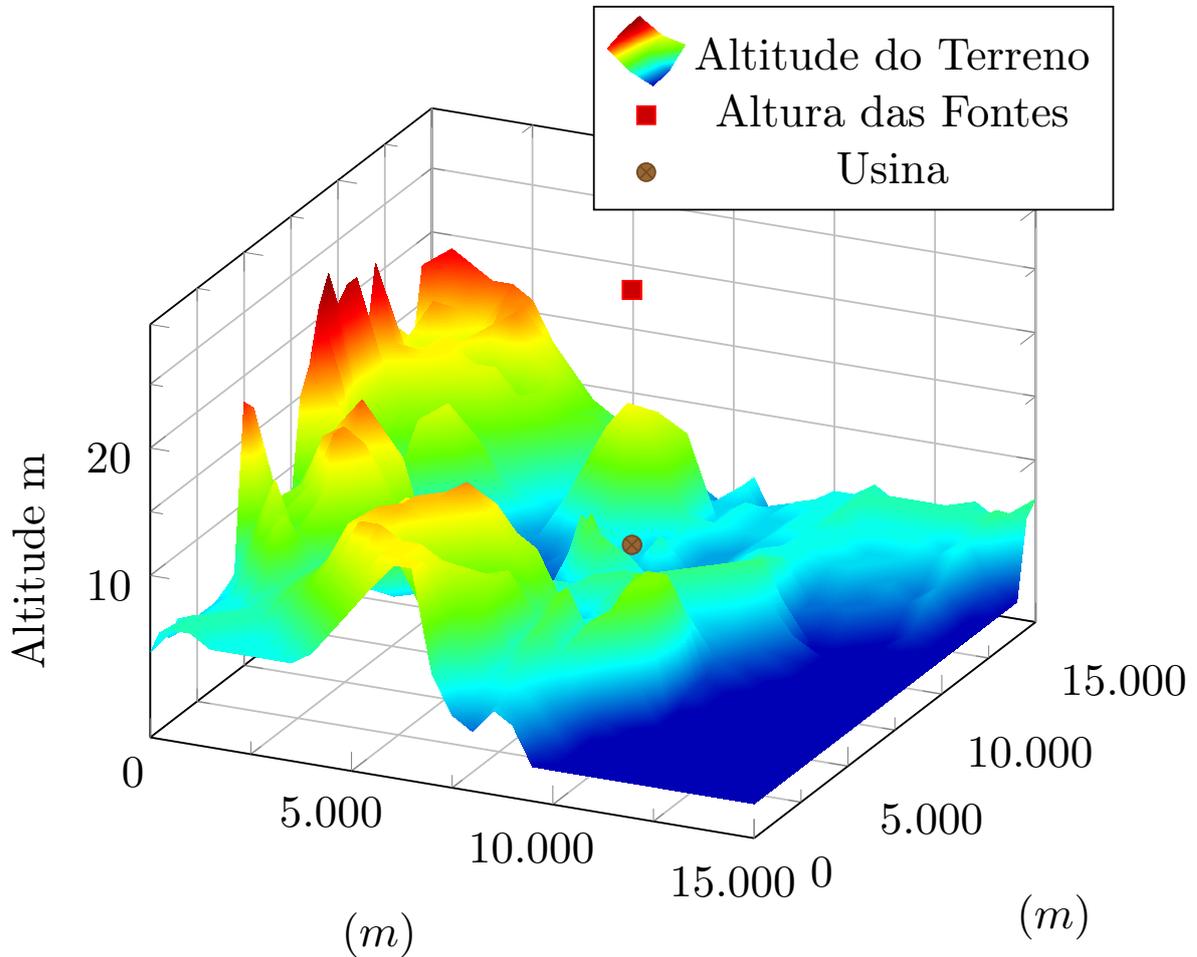


Figura 5.5 – Altitude do terreno no entorno da usina com a localização da altura das fontes e da usina frente ao relevo da região. Dados retirado do perfil de elevação fornecido pelo *Google Earth* com uma resolução de 500 m x 500 m. A escala máxima da altitude é 27 metros, já a de x e y 15 mil metros cada.

5.3 Cenário CMPC Celulose Riograndense

A CMPC Celulose Riograndense, localizada na cidade de Guaíba no estado do Rio Grande do Sul, que possui uma extensão 376,973 km² com uma população de 99.186 mil habitantes segundo o IBGE. A indústria fabrica celulose de fibra curta de eucalipto e em

julho de 2013 iniciaram-se obras para a instalação do projeto Guaíba 2, cujo objetivo final é elevar a produção de 450 mil toneladas por ano para 1,75 milhão de toneladas anual. A responsabilidade com o meio ambiente e juntamente com o conforto e saúde da população são alguns dos compromissos da empresa. Para concretizar o plano de ampliação e responder aos anseios de sustentabilidade ela investiu na eficiência produtiva e fez diminuir em 40% o seu consumo total de água. Além disso, 99,7% de todos os resíduos são tratados e ainda possui autossuficiência energética. Assim como uma estação meteorológica e de monitoramento do ar foi instalada visando um mecanismo de monitoramento contínuo da qualidade do ar. Assim os níveis de emissão são acompanhados e trabalham de forma preventiva à garantir que as emissões da indústria se mantenham dentro dos padrões exigidos pelos órgãos ambientais, consequentemente assegurando a qualidade de vida da população. A existência deste controle e a acessibilidade dada à estes dados fez com que a CMPC se tornasse um dos cenário de avaliação do modelo sesquilinear. Através dos dados de concentração de poluentes captados pela estação da empresa foi possível avaliar os resultados obtido pelo modelo.

Como no cenário anterior, a CMPC Celulose Riograndense também se encontra circunscrita por unidades de conservação observadas na Figura 5.6. Inclusive ela é responsável pela primeira reserva particular do patrimônio natural do RS, batizada de Barba Negra. As áreas prioritárias de conservação mostradas na Figura 5.7 marcam presença. E como a indústria se encontra no meio da região central da cidade de Guaíba dividindo a em norte e sul acarretando grande circulação de pessoas e veículos agregado a existência de áreas residenciais no entorno do complexo é importante realizar estudos de comportamento da dispersão de poluentes na tentativa de mitigar efeitos colaterais.

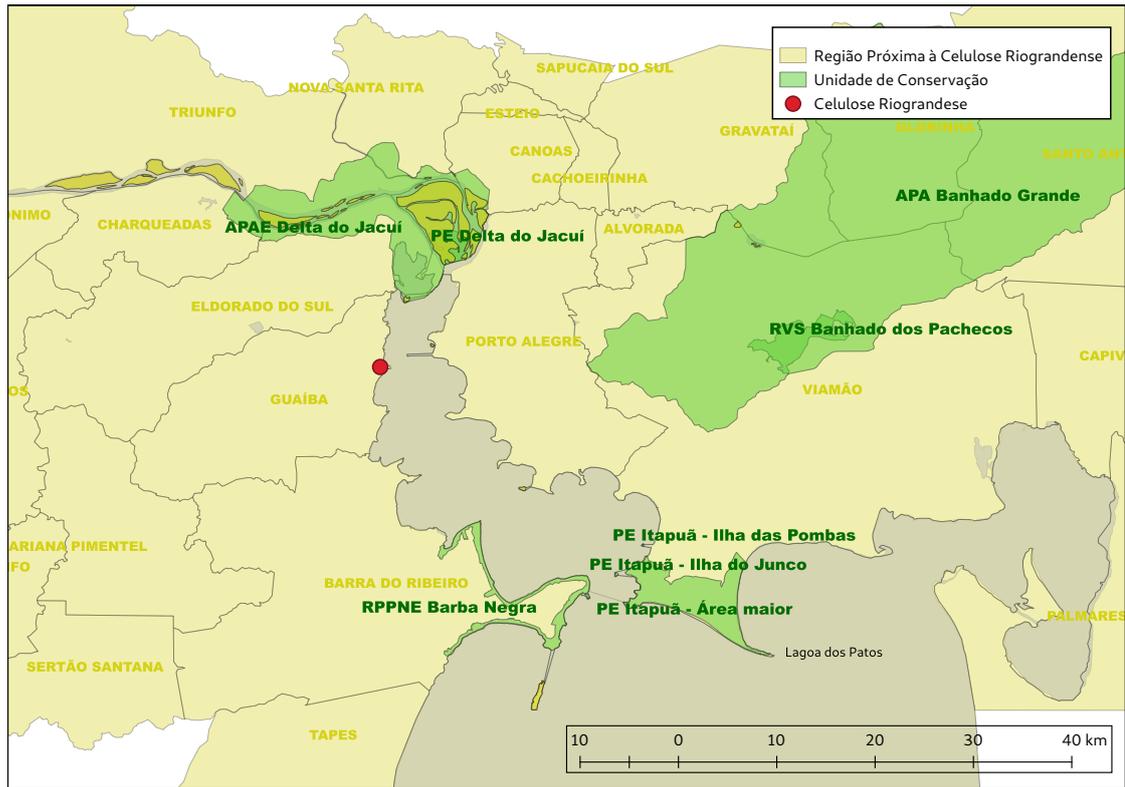


Figura 5.6 – Unidades de conservação no entorno da Celulose Riograndense.

[Dados obtidos em SEMA, 2018]

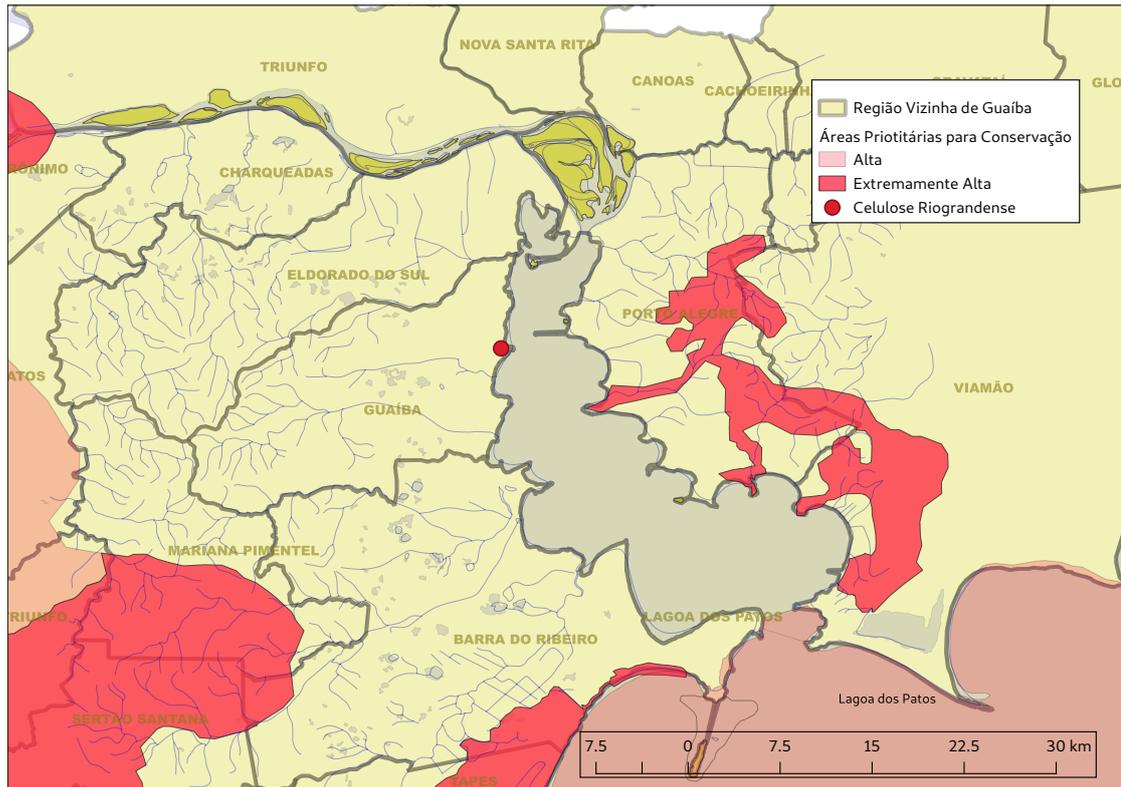


Figura 5.7 – Áreas prioritárias para conservação no entorno da Celulose Riograndense no bioma Pampa. As áreas prioritárias são os resultados da 1ª atualização - foram reconhecidas mediante Portaria N°9, de 23 de janeiro de 2007.

[Dados obtidos em MMA-AP, 2007]

5.3.1 A Indústria de Celulose

A posição geográfica da indústria CMPC Celulose Riograndense obtida através do *Google Earth* tem como latitude $30^{\circ}8'2.47''S$ e longitude $51^{\circ}19'1.62''O$. A estação de qualidade do ar localiza-se à noroeste da indústria, latitude $30^{\circ}6'49.98''S$ e longitude $51^{\circ}19'55.38''O$, aproximadamente 2 km de distância observados na Figura 5.8.

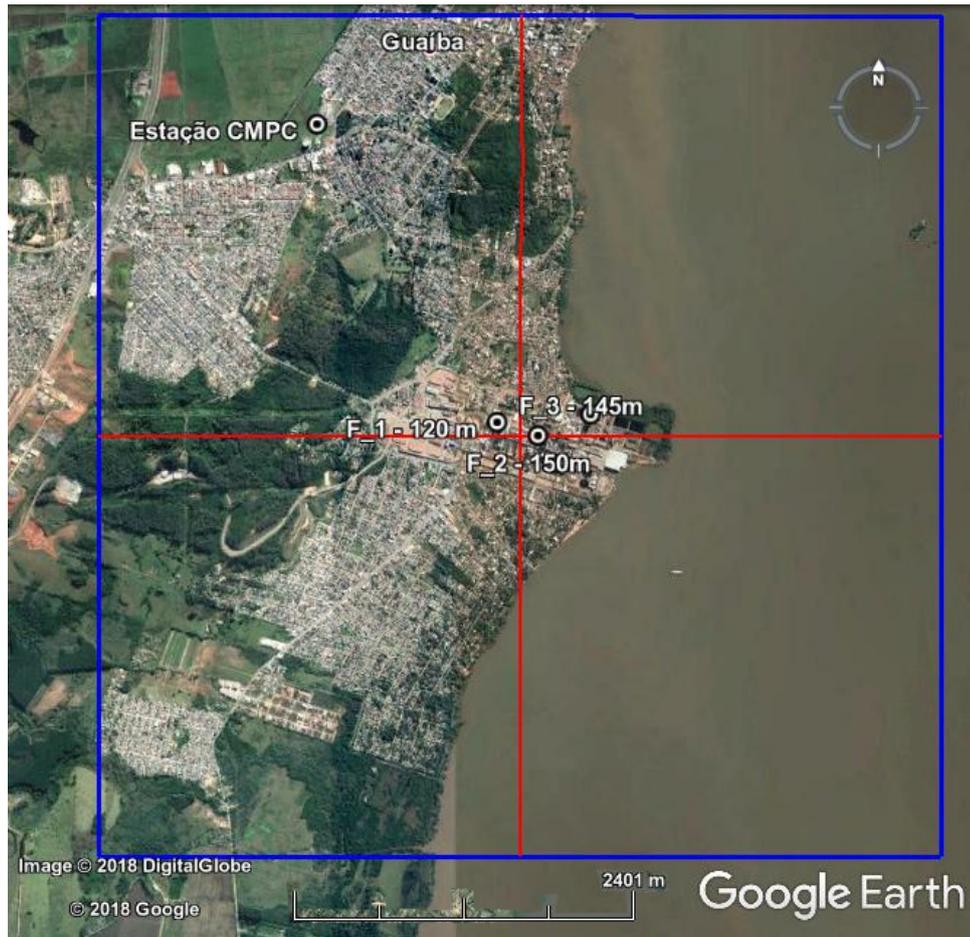


Figura 5.8 – Região de 36 km² no entorno da CMPC Celulose Riograndense.

Há três fontes que emitem o poluente para o sistema como pode ser visto na Figura 5.8, suas características estão descritas na tabela

Tabela 5.3 – Dados das fontes da CMPC Celulose Riograndense.

Fontes	Latitude ¹	Longitude ¹	Altura (m)	TRS (g/s)
F_1	30°7'58.98"S	51°19'7.61"O	120	0,2194
F_2	30°8'2.09"S	51°18'56.77"O	150	0,2194
F_3	30°7'57.14"S	51°18'42.71"O	145	0,2194

¹ Posicionamento geográfico calculado através do programa *Google Earth*.

O composto típico gerado por indústrias de celulose, o *total reduced sulphur* (TRS), será avaliado, minimizando a existência de contribuições externas. Os dados analisados estão compreendidos entre o período 01/01/2016 até 10/04/2017, onde medições comprometidas por alguma incerteza foram descartadas. Apenas dados cuja a orientação de

vento estivesse compreendida entre o quadrantes leste e sul, ou seja, vento na direção da estação de monitoramento foram avaliadas para o estudo.

5.3.2 Dados Micrometeorológicos da CMPC para o Modelo

Os três conjuntos de horas contínuas estudados na validação do modelo sesquilinear são apresentados abaixo onde apenas informações de condições meteorológica usadas pelo modelo são apresentadas de forma qualitativa. No Apêndice B há maiores informações sobre os dados.

Caso I - Conjunto de 34 horas (19/03/2016 20h até 21/03/2016 05h)

As informações meteorológicas do conjunto de 34 horas contínuas que ventam no quadrante Leste Sul.

O gráfico apresentado na Figura 5.9 mostra a variação da velocidade do vento, assim como a média para todo o período observado. Esses dados foram fornecidos pela estação de medição da CMPC.

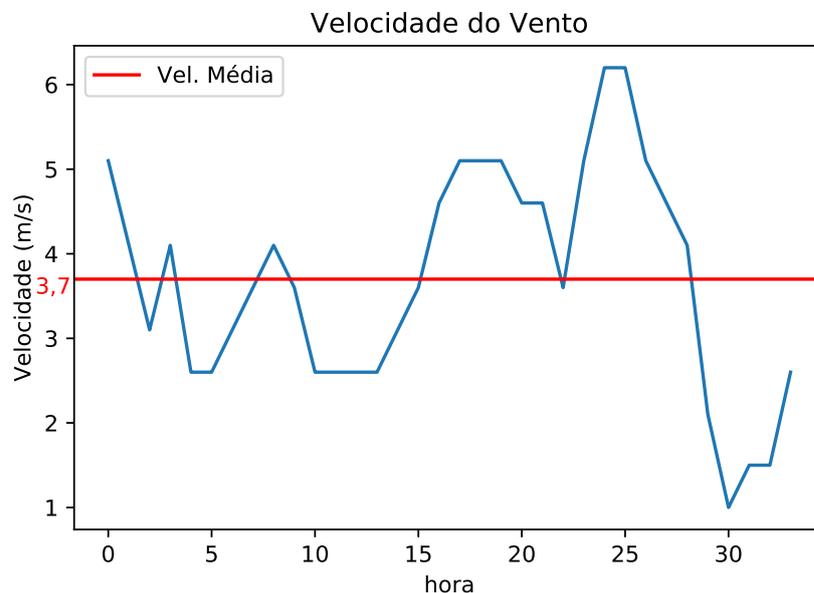


Figura 5.9 – Variação da velocidade u (m/s) no conjunto de 34h.

No próximo gráfico a variação da altura da camada limite z_i (m) para o mesmo período:

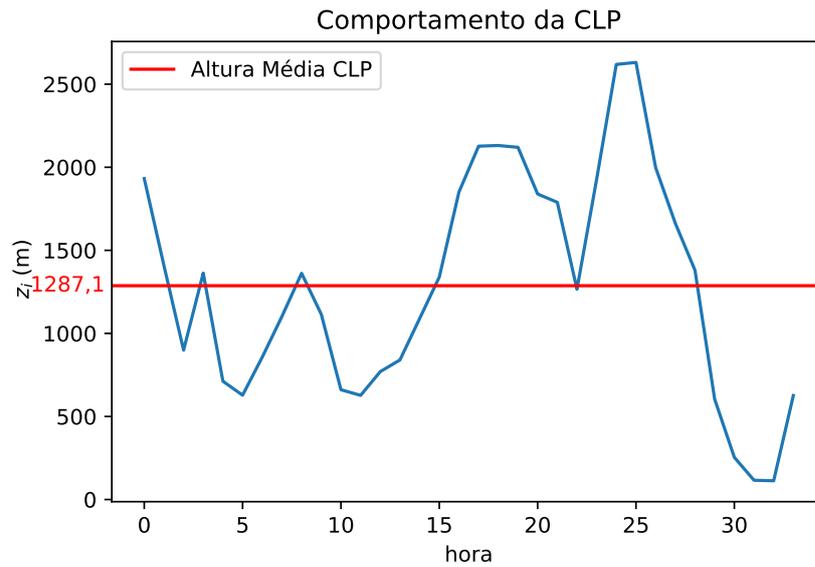


Figura 5.10 – Variação da altura z_i (m) no conjunto de 34h.

O gráfico da Figura 5.11 é uma rosa dos ventos que mostra a frequência e velocidade do vento que sopra de cada direção, aqui foram restritos ao quadrante Leste Sul. Na medida que se move para fora da escala radial, a frequência associada com o vento vindo daquela direção aumenta. Cada raio é dividido por cor em faixas de velocidade do vento. O comprimento radial de cada raio em torno do círculo é o percentual de tempo em que o vento sopra daquela direção. Assim é possível identificar que mais de 40% do vento vem da direção sudeste e os ventos se encontram majoritariamente acima de 3 m/s no conjunto de 34h.

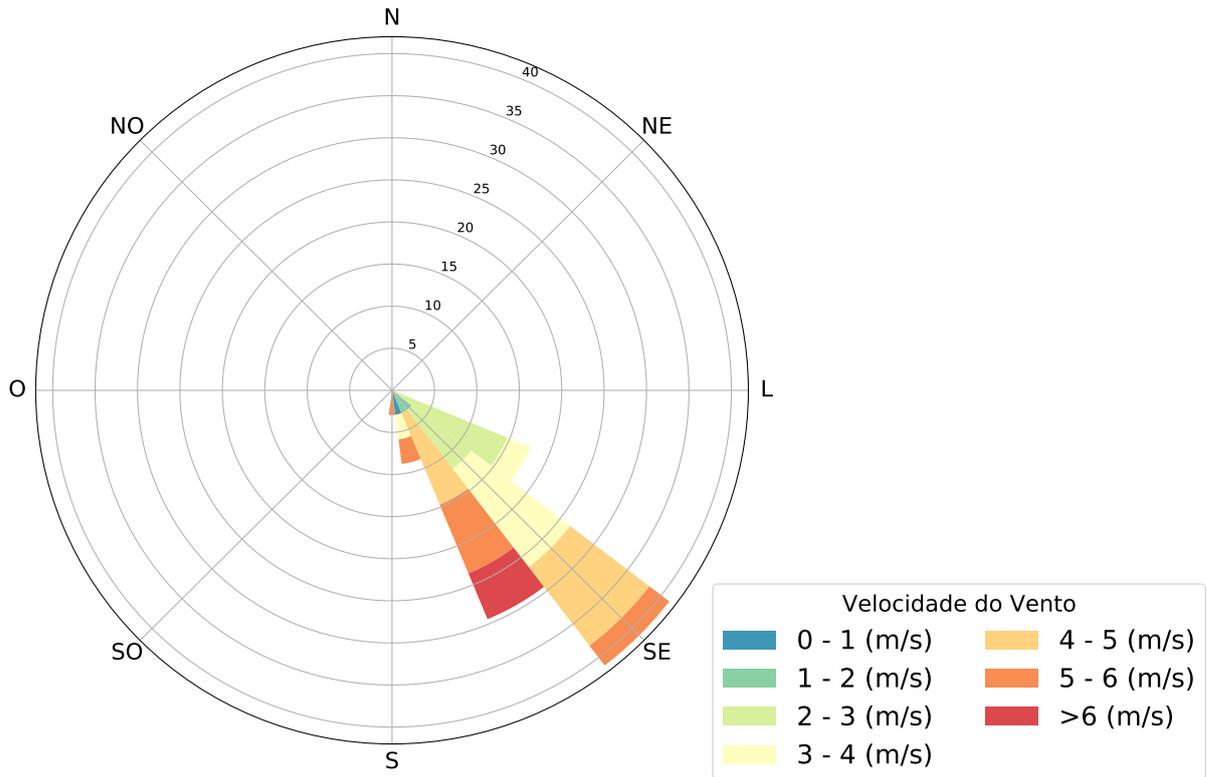


Figura 5.11 – Distribuição de velocidade para o período de 34h na região da CMPC.

Caso II - Conjunto de 43 horas (02/03/2016 08h até 04/03/2016 02h)

A variação da velocidade nas 43h pode ser observada no gráfico da Figura 5.12,

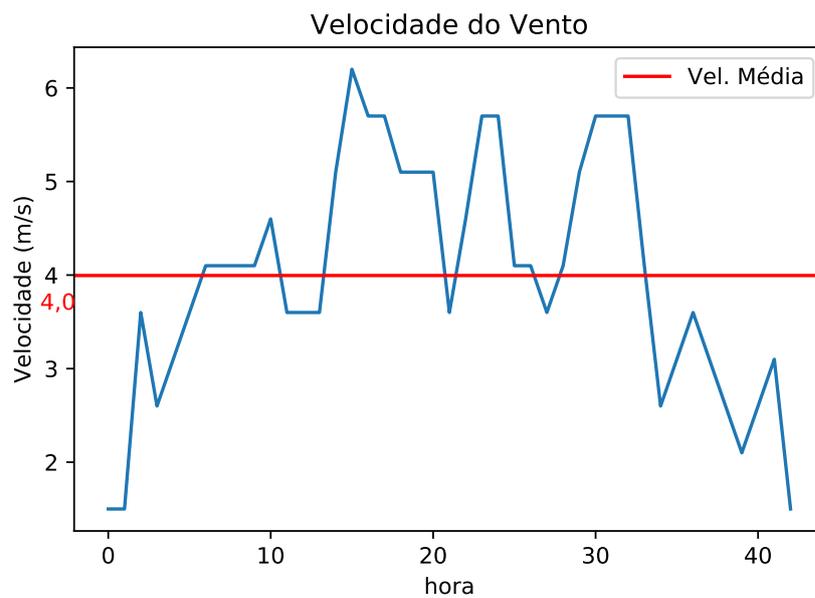


Figura 5.12 – Variação da velocidade u (m/s) no conjunto de 43h contínuas.

enquanto a variação da altura da camada limite z_i (m) é apresentada na Figura 5.13:

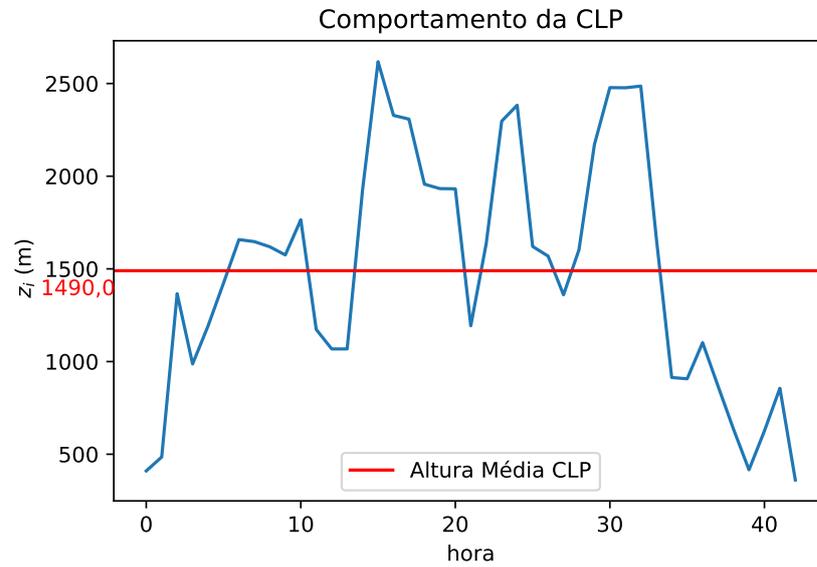


Figura 5.13 – Variação da altura z_i (m) nas 43h.

No gráfico da rosa dos ventos, de 43h da Figura 5.14, mais de 35% do vento vem de uma mesma direção e os ventos se encontram acima com maior variedade de intensidades para a velocidade do vento.

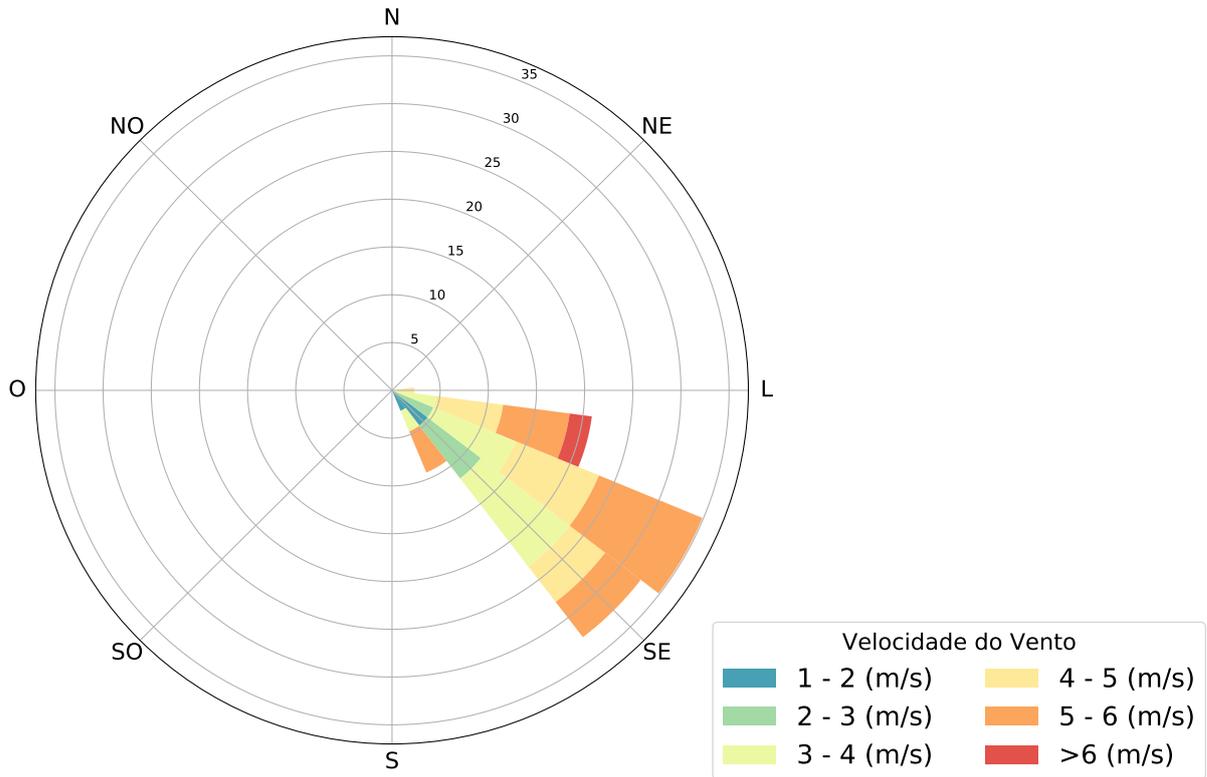


Figura 5.14 – Distribuição de velocidade para o período de 43h na região da CMPC.

Caso III - Conjunto de 29 horas (25/10/2016 03h até 26/10/2016 07h)

Para o caso III a variação da velocidade no período de 29h apresentada no gráfico da Figura 5.15,

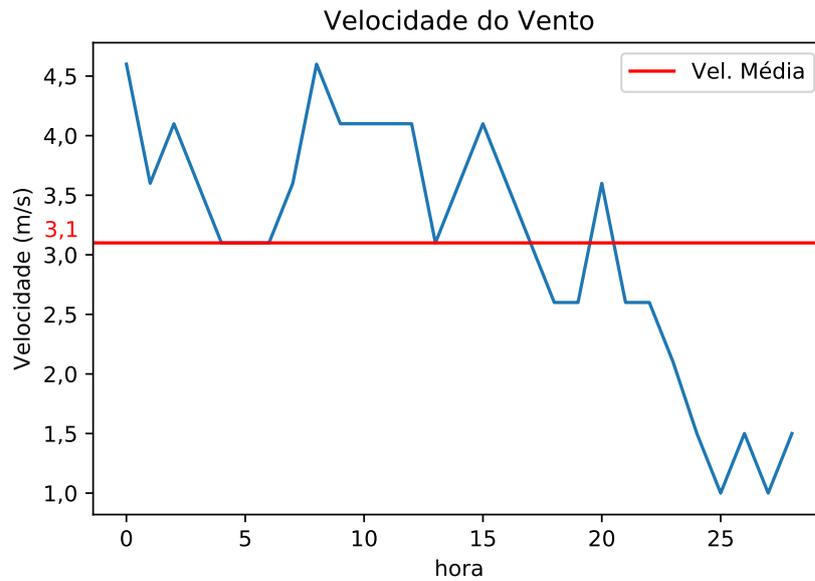


Figura 5.15 – Variação da velocidade u (m/s) nas 29h contínuas.

assim como a variação da altura da camada limite z_i (m) na Figura 5.16:

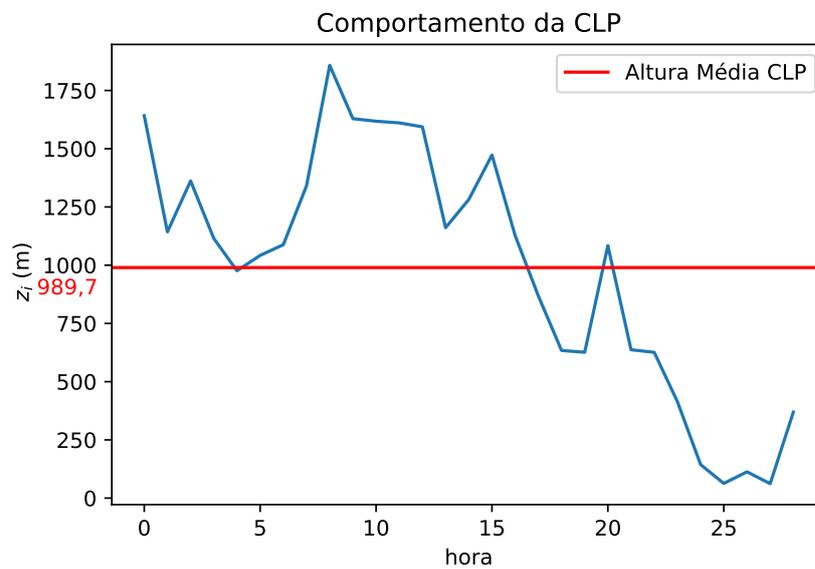


Figura 5.16 – Variação da altura z_i (m) nas 29h.

Durante as 29h o gráfico da rosa dos ventos na Figura 5.17, teve 60% do vento soprando de uma mesma direção e os ventos se encontram intensidades de 3 à 5 (m/s) para a velocidade do vento.

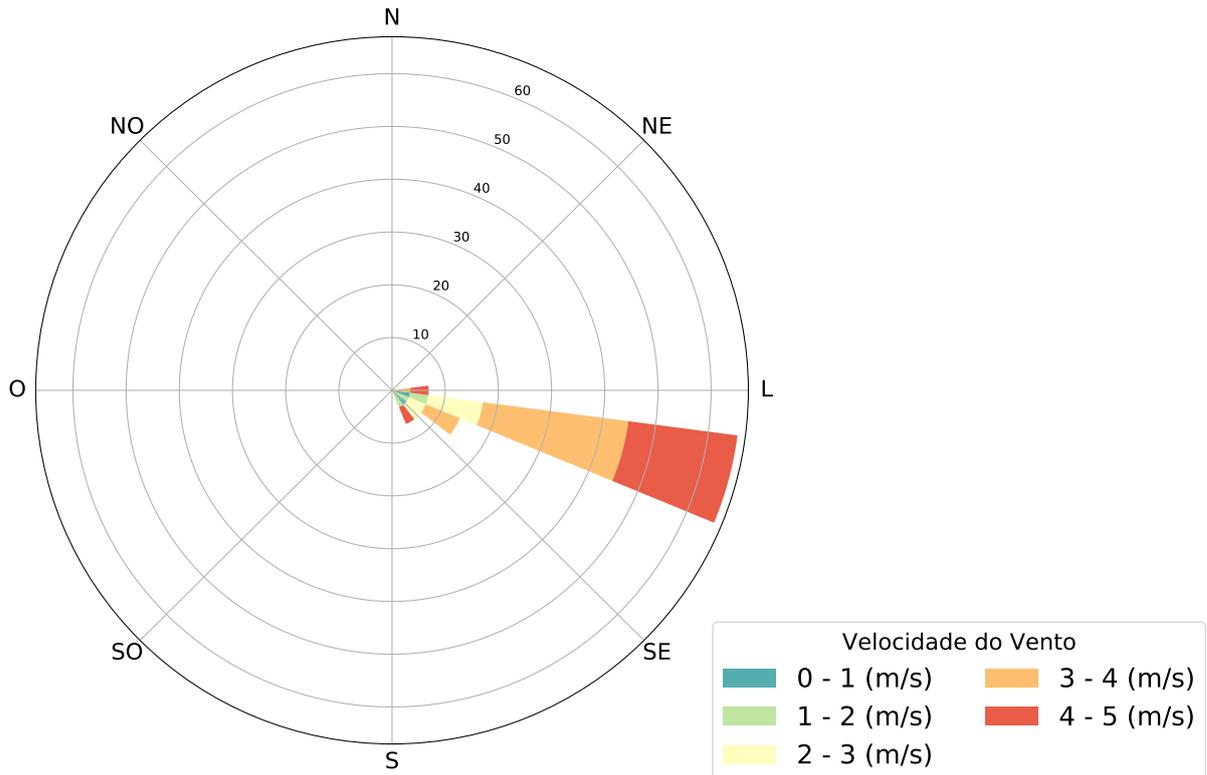


Figura 5.17 – Distribuição da velocidade para o período de 29h na região da CMPC.

5.4 Indicadores Estatísticos

Uma avaliação estatística foi proposta por Hanna, 1989, que viabilizou ferramentas para avaliar a efetividade dos modelos de simular o fenômeno de dispersão comparando eles aos valores experimentais. Os métodos de avaliação são amplamente aceitos pela Agência Americana de Proteção Ambiental (USEPA), Força Aérea Americana (*US Air Force*) e pelo Instituto Americano de Petróleo (API) e pelos pesquisadores da área de dispersão de poluentes a partir de um workshop realizado na Bélgica em 1994 intitulado “*Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assessments in Europe*”.

As avaliações são realizadas através de valores de concentrações medidas pelo experimento chamadas de concentrações observadas C_o e C_p concentrações preditas ou seja as concentrações que o modelo retornou como resposta ao se impor os parâmetros do experimento. A variável σ é o desvio padrão do experimento quando o índice for representado por o e do modelo quando for p .

5.4.1 Erro Quadrático Médio Normalizado

O Erro quadrático médio normalizado ou (*Normalized mean square error* (NMSE)):

$$\text{NMSE} = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p}, \quad (5.5)$$

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.

5.4.2 Correlação

A correlação (COR) descreve o grau de associação ou concordância entre as concentrações observadas e previstas. Quanto mais próximo do valor 1 estiver o resultado, melhor a performance da solução. É definido como:

$$\text{COR} = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}. \quad (5.6)$$

5.4.3 Desvio Padrão Fracional

O desvio padrão fracional (FS) representa o grau de distanciamento das concentrações observadas em relação às concentrações previstas. Se $FS > 0$ o valor previsto está menos disperso que o observado e se $FS < 0$ o valor previsto está mais disperso que o observado. O valor ótimo é zero e é definido como:

$$\text{FS} = \frac{(\sigma_o - \sigma_p)}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)}. \quad (5.7)$$

6 RESULTADOS

Os modelos com a solução sesquilinear foram construídos usando a linguagem de programação Fortran 90. Os programas de 80% dos resultados simulados eram seriais os demais receberam o aprimoramento e passaram a trabalhar em paralelo veja, na Tabela 6.1 o desempenho do modelo pode variar conforme a configuração do computador, em uma máquina Intel(R) Core(TM) i7-3537U CPU 2.00GHz com 8 GB de memória e 4 núcleos o tempo de simulação passou a ser obviamente 4 vezes mais rápido.

Tabela 6.1 – Autovalores *versus* Tempo Computacional em programas serial e paralelo.

Autovalor	Tempo Serial (min)	Tempo Paralelo (min)
5000	6	1,5
10000	13	3,25
15000	19	4,75

Valores calculados para o modelo de fonte delta.

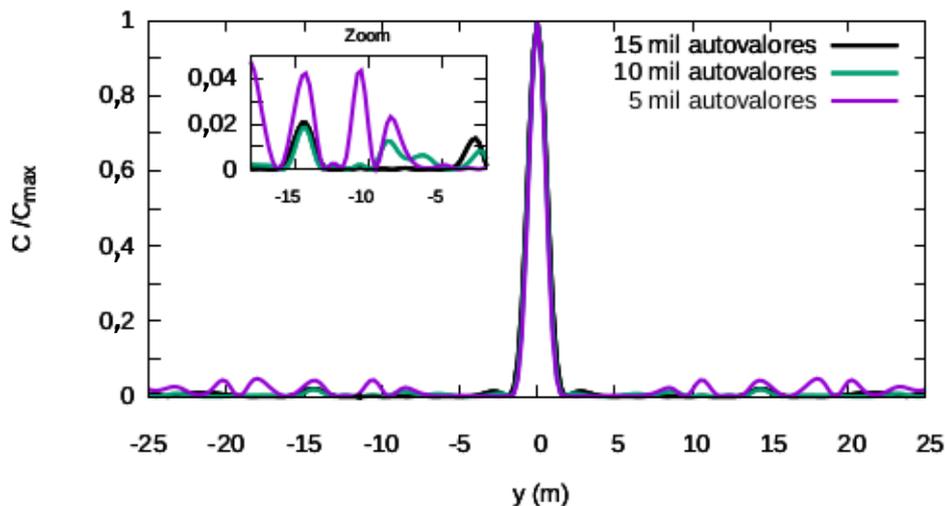


Figura 6.1 – Distribuição da concentração com 5 mil, 10 mil e 15 mil autovalores para fonte delta.

Na Figura 6.1 é mostrado o gráfico da concentração $C(5, y, 50, 5)/C_{max}$ para a fonte delta. O passo de y é de 0,1 (m) e a concentração foi normalizada pela concentração

máxima. Para 10 mil autovalores, não irá incluir erros que venham alterar os resultados do modelo. Já para a fonte gaussiana uma discussão detalhada será feita na Seção 6.3 sobre a diferença entre os modelos de condição de fonte delta e de fonte gaussiana em relação a quantidade de autovalores.

6.1 O Modelo Sesquilinear e seu Comportamento

A nova proposta para a solução da equação advecção-difusão exige uma avaliação do comportamento do modelo frente as variações de parâmetros. Isso porque a proposta resgata uma não-linearidade ao incluir um parâmetro complexo e constrói a solução com características de uma função densidade de probabilidade. Assim o comportamento frente a variações dos parâmetros eram um tanto desconhecidos e foram investigados. O estudo mostra que o modelo mantém suas características fundamentais. Com a variação dos parâmetros também foi avaliado o comportamento das características reais incluídas à dispersão com a inclusão da fase. A presença das flutuações é o diferencial do modelo determinístico-estocástico frente aos modelos determinístico que sofrem pela ausência de não-linearidades. Nessa Seção 6.1 o leque de variações de parâmetros será apresentado. Durante o estudo os parâmetros quando fixos serão dados pelos valores da Tabela 6.2:

Tabela 6.2 – Valores dos parâmetros usados nas simulações para investigar o comportamento das soluções.

$u(m/s)$	$K_x(m^2/s)$	$K_y(m^2/s)$	$L_x(m)$	$L_y(m)$	$L_z(m)$	$L_x(m)$	$H_s(m)$	$y_0(m)$
1	0,1	0,1	1.000	1.000	1.000	1	50	0

Qualquer alteração desses parâmetros serão mencionados no escopo do texto.

A Figura 6.2 apresenta a configuração espacial do modelo:

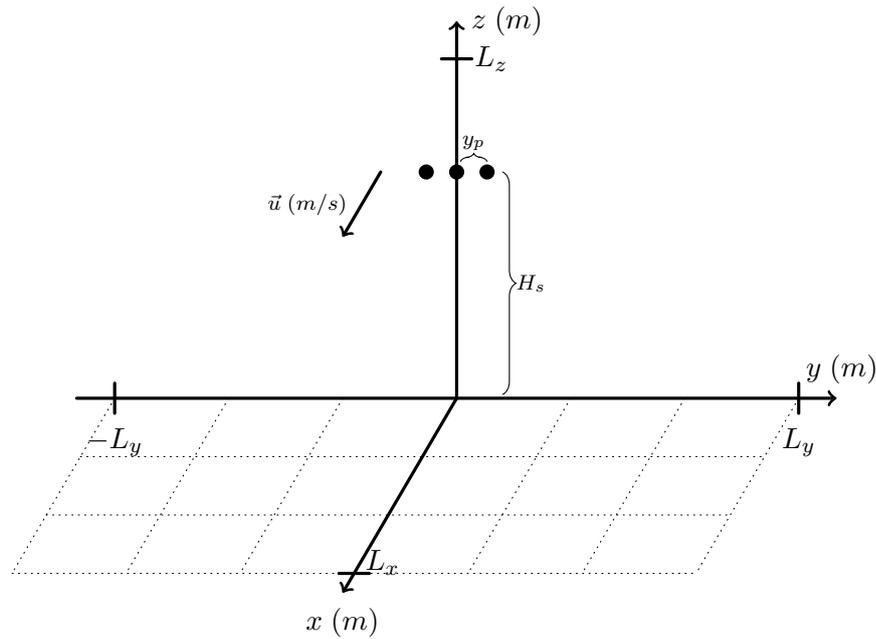


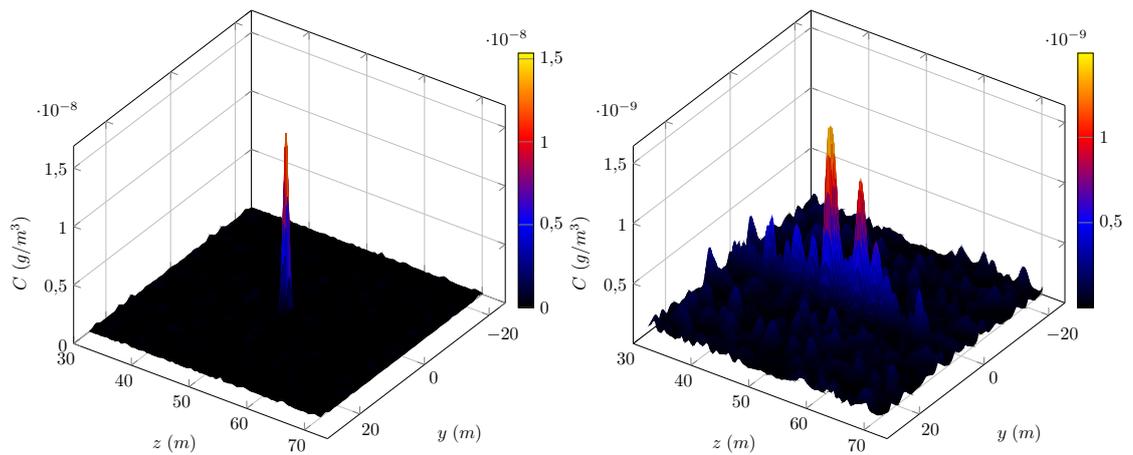
Figura 6.2 – Esquema espacial do modelo sesquilinear onde $y_p = 0,1$ (m) é a distância entre as fontes.

6.1.1 Comparação do Modelo com K_z Real e Complexo

Distribuições espaciais e espaciais-temporais com coeficiente de dispersão verticais trigonométricos dados pela Equação 4.131 são avaliadas em $x = 5$ (m) para mostrar como o modelo sesquilinear é capaz de provocar comportamentos novos assim como reproduzir resultados obtidos por modelos determinísticos. Observe a Figura 6.3 onde na Figura 6.3b, o coeficiente complexo cuja fase é diferente de zero, observa-se claramente a presença de estruturas na dispersão que na Figura 6.3a, com coeficiente real, não são representadas. Elas surgem na Figura 6.3b e podem ser interpretadas como características reais da dispersão devido a existência de perturbações nas concentrações e que estão descrevendo o fenômeno físico de forma realística. Assim o objetivo da primeira investigação do modelo sesquilinear é concretizado, ele é capaz de provocar o surgimento de estruturas que modelos determinísticos não apresentam, isto acontece apenas utilizando o coeficiente dado pela Equação 4.131.

A Figura 6.3a é o modelo determinístico que apresenta uma dispersão suave característica típica do modelo, que em grande parte dos casos realísticos não representa visualmente o fenômeno de dispersão, porém há situações, como na CLE, onde as con-

dições de estabilidade são propícias a esse comportamento. A dispersão suave pode ser representada também pelo atual modelo quando a parte imaginária, a fase, do coeficiente de dispersão na direção de z o K_{zb} é zero, o modelo determinístico-estocástico se comporta exatamente como no caso do coeficiente de difusão K_z real. Isso mostra que o modelo determinístico-estocástico consegue ser mais geral que os modelos determinísticos compare a Figura 6.3c onde o K_z complexo com parte imaginária igual a zero é idêntica à Figura 6.3a onde o K_z é real.

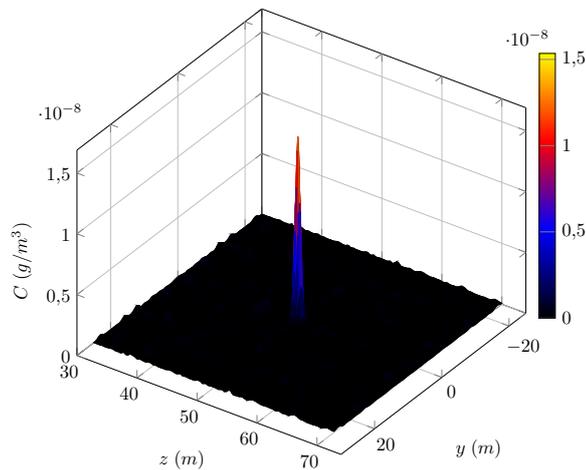


(a) Modelo com coeficiente real

$$K_z = 0, 1\mathcal{P}(z).$$

(b) Modelo com a fase,

$$K_{za} = 0, 1\mathcal{P}(z) \text{ e } K_{zb} = 0, 5.$$



(c) Modelo com a fase, $K_{za} = 0, 1\mathcal{P}(z)$ e $K_{zb} = 0$.

Figura 6.3 – Comparação da distribuição da concentração em $x = 5$ (m) para modelo com K_z real e K_z complexo, com e sem a presença da fase.

Diante deste resultado há uma certeza o presente modelo recupera características

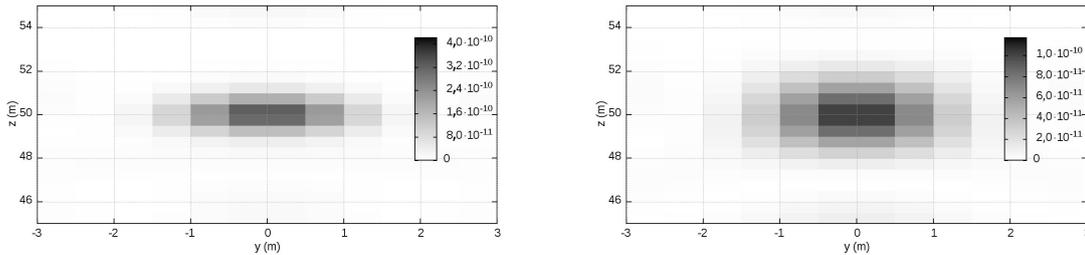
do fenômeno de dispersão de poluentes que foram desprezadas na equação onde os termos turbulentos foram substituídos pelo fechamento Fick. O fechamento K ou de Fick tem alguns limites, por exemplo o fato que, diferente da difusão molecular, a difusão turbulenta é uma manifestação da estrutura do escoamento turbulento que é determinado pelo grau de estabilidade da atmosfera. Para as abordagens dadas até o momento aos modelos de advecção-difusão determinísticos, diversas aproximações são utilizadas para estimar tais difusividades como teoria das similaridades de Monin-Obukhov e teoria estatística de Taylor da turbulência. Então o fechamento proposto neste trabalho inclui uma não-linearidade, através de uma fase, pois estruturas coerentes por definição são atreladas à ela. Portanto inclui-se a diferença de fase através de um coeficiente de difusão complexo em K_z que é responsável por descrever variáveis responsáveis pela formação estruturas que mostram flutuações na concentração, pois há fatores como rugosidade do terreno criação de termas ascendentes e descendentes que produzem grande parte dos efeitos turbulentos. Inúmeras parametrizações são aplicadas sob o coeficiente vertical para que ele se aproxime da representação do fenômeno físico [Degrazia et al., 2000]. Isto também justifica a inclusão da fase no coeficiente de difusão vertical.

6.1.2 Comportamento do Modelo ao Variar o Coeficiente Vertical K_z

A interpretação imediata dada aos coeficientes de difusão na equação de advecção-difusão estão relacionados à velocidade com que a pluma aumenta de área no entorno da vizinhança do ponto de emissão nas direções vertical z , transversal y e longitudinal x ao alterar respectivamente os coeficientes difusivos K_z , K_y e K_x . Um modelo de dispersão de poluentes onde há a variação do coeficiente difusivo transversal, horizontal ou vertical deve apresentar um alargamento na distribuição da concentração nas respectivas direções. Quanto maior o coeficiente melhor é sua dispersão aumentando a área afetada pelo poluente. São usados valores empíricos com a intenção avaliar a capacidade deste modelo descrever este comportamento mesmo quando é aplicada a nova abordagem ao modelo de advecção-difusão. Aqui será mostrado que aspectos básicos do modelo permanecem inalterados.

Observar o alargamento da distribuição na direção de z ao variar o coeficiente de difusão dado pela Equação 4.131, para ambos parâmetros, o K_{za} parte real e o K_{zb} parte imaginária. Esse alargamento na distribuição da concentração mostra que o aumento

do coeficiente tanto da parte real como da imaginária contribuem para no aumento da eficiência da dispersão do poluente. Na Figura 6.4 pode-se observar o aumento da área, na direção z , afetada pelo poluente vinculado ao aumento do valor de K_{za} , sabendo que a parte imaginária permaneceu nula. A representação deste caso é idêntica ao caso do coeficiente real já mostrado pelos resultados obtidos acima nas Figuras 6.3a e 6.3c.



(a) Coeficiente $K_{za} = 0, 2$.

(b) Coeficiente $K_{za} = 0, 8$.

Figura 6.4 – Distribuição da concentração vinculado ao aumento da parte real de K_z onde $K_{zb} = 0$, $x = 10$ (m) e $t = 14$ (s).

Agora o coeficiente de dispersão K_z terá parte imaginária não-nula, cujo o comportamento é mostrado na Figura 6.5. A primeira observação é referente às Figuras 6.5a e 6.5b, onde as estruturas apenas ficam em tons mais claros na Figura 6.5b denotando que há menos concentração de poluente do que em 6.5a. Isso se justifica ao comparar os coeficientes usados, para construir a distribuição da Figura 6.5a o K_{za} é menor que na Figura 6.5b e o K_{zb} é o mesmo. Assim só há o comportamento de aumento na velocidade com que o poluente se dispersa. Isso pode ser garantido dado que para um mesmo tempo de simulação as estruturas são as mesmas, porém o valor das concentrações são menores. Esse comportamento se repete para as distribuições das Figuras 6.5c e 6.5d onde o valor de K_{za} é menor na Figura 6.5c e o K_{zb} também é o mesmo.

As distribuições na Figura 6.5 onde o valor do parâmetro K_{za} é igual, ou seja, olhando as figuras duas a duas Figura 6.5a e a Figura 6.5c ou também a Figura 6.5b com a Figura 6.5d que agora tem o valor diferente em K_{zb} identifica-se dois comportamentos. O primeiro diz respeito a forma como as estruturas estão dispostas na distribuição. As estruturas são diferentes e descrevem um outro padrão de flutuações na densidade apenas modificando o valor de K_{zb} . Isso mostra que o termo incluído ao modelo é o único respon-

sável pelo aparecimento de características reais oriundas da turbulência. A alteração dele muda completamente a configuração da distribuição apresentada. Esse comportamento já aponta para uma busca em termos de relacioná-lo com a física do fenômeno investigando uma parametrização que leve em conta parâmetros micrometeorológicos e a estabilidade da camada limite atmosférica. O segundo comportamento mostra que além de K_{zb} influenciar a modificação do padrão das estrutura ele também causa um efeito relacionado ao aumento da velocidade de dispersão do poluente. Comparando por exemplo as Figuras 6.5a e 6.5c o tom das estruturas são mais claras na segunda, assim $K_{zb} = 0,8$ contribuiu mais para a dispersão do poluente que $K_{zb} = 0,2$. O mesmo acontece para as distribuições das Figuras 6.5b e 6.5d.

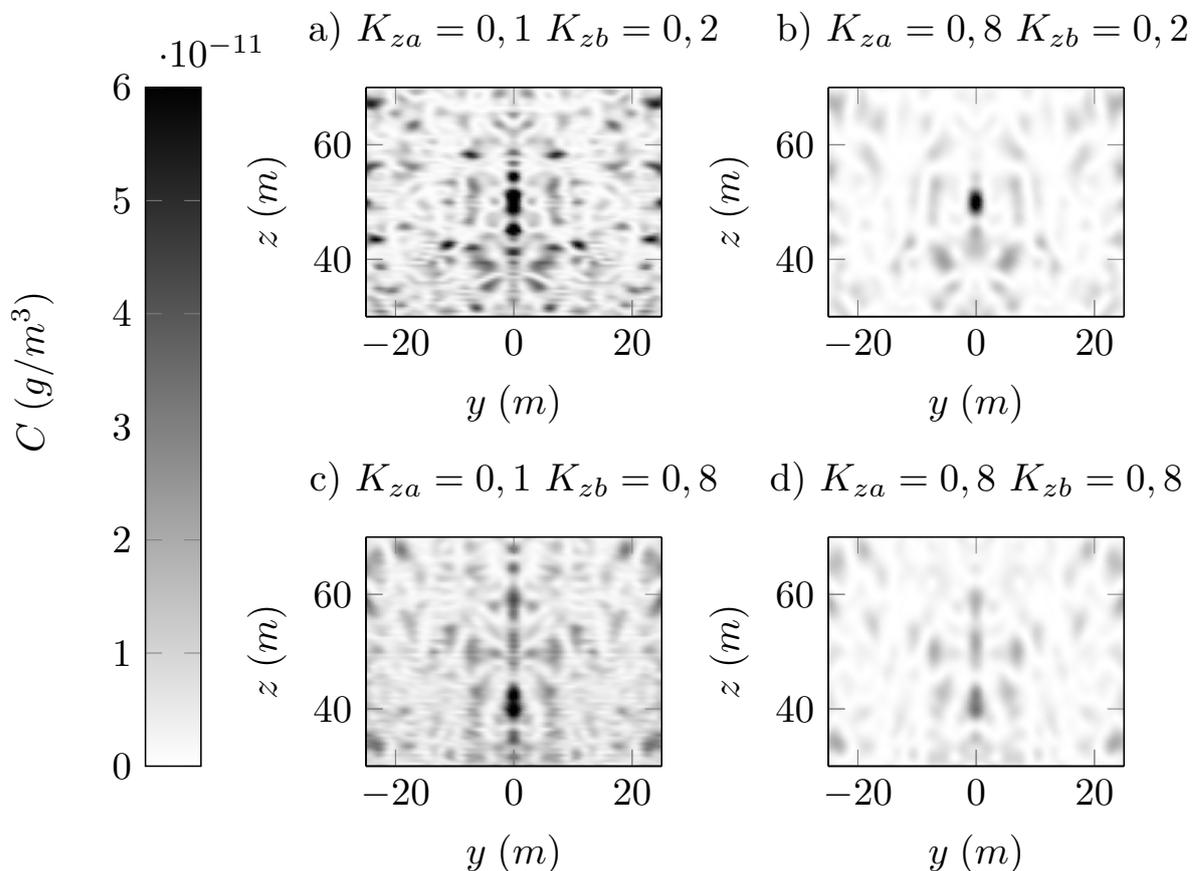


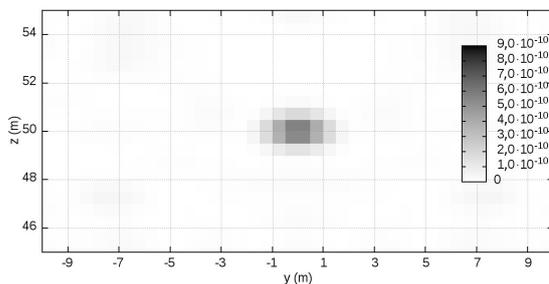
Figura 6.5 – Mapa da distribuição em $C(y, z)$ (g/m^3) mostra aumento da distribuição da concentração vinculado ao aumento tanto para a parte real e a imaginária de K_z para K_{zb} diferentes onde $x = 10$ (m) e $t = 14$ (s).

Levando em conta que aumentar o coeficiente difusivo eleva a velocidade da dispersão do poluente, então ao lançar a mesma quantidade de poluente, mas com coeficientes

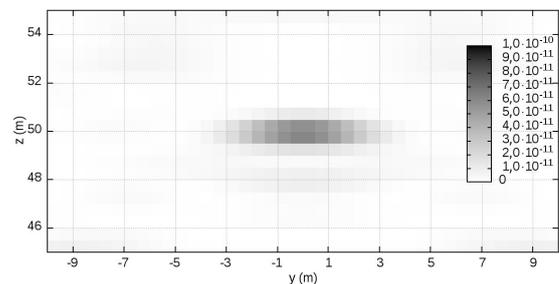
diferentes, houve uma dispersão menos intensa para coeficientes menores se comparados à dispersão de coeficientes maiores. Isso ocorre dado que o coeficiente difusivo maior faz com que o poluente percorra maiores distâncias em um menor tempo fazendo com que a concentração seja mais baixa do que a do coeficiente menor em dado instante de tempo. Assim K_{zb} altera a posição das estruturas e também aumenta a velocidade com que a pluma se dispersa. Já K_{za} só contribui para efeito de aumento da velocidade de dispersão do poluente. Portanto foi mostrado a capacidade do modelo de representar características físicas do fenômeno que os demais modelo já reproduzem e também recupera características perdidas por modelos determinísticos.

6.1.3 Comportamento do Modelo ao Variar Coeficiente Transversal K_y

A próxima análise é feita ao modificar o coeficiente difusivo transversal K_y onde o comportamento de alargamento da distribuição deve surgir, mas agora na coordenada y no caso em que se compara à um valor de coeficiente transversal menor. Esse comportamento pode ser observado na Figura 6.6 onde não há flutuações pronunciadas apenas o comportamento de alargamento na direção y . Sabe-se que isso acontece pois o termo que introduz a fase é zero ambos gráficos das Figuras 6.6a e 6.6b então K_z é dado pela Equação 4.131 com $K_{zb} = 0$. Na Figura 6.6a se tem $K_y = 0,1 (m^2/s)$ e na Figura 6.6b $K_y = 0,5 (m^2/s)$ ambos valores constantes sem a inclusão de qualquer perfil no coeficiente transversal.



(a) Coeficiente $K_y = 0,1 (m^2/s)$.



(b) Coeficiente $K_y = 0,5 (m^2/s)$.

Figura 6.6 – Variação do coeficiente transversal K_y para dois valores diferentes em $x = 10 (m)$ no modelo sem introdução da fase.

Já quando a mesma avaliação é feita na Figura 6.7, mas desta vez incluindo o

termo da fase dado pela Equação 4.131, várias estruturas são observadas que em 6.6 eram inexistentes. Elas remetem ao comportamento da dispersão quando há presença de estruturas coerentes. O alargamento da distribuição também pode ser observado mostrando o aumento de área afetada pela poluição vinculada ao aumento do coeficiente de difusão faz diminuir a concentração. Porém observe que as estruturas apenas alargaram, mas são as mesmas tanto na Figura 6.7a como na Figura 6.7b isso ocorre porque o coeficiente responsável pela criação dos padrões de flutuação permanece igual em ambas situações $K_{za} = 0,1$ e $K_{zb} = 0,5$.

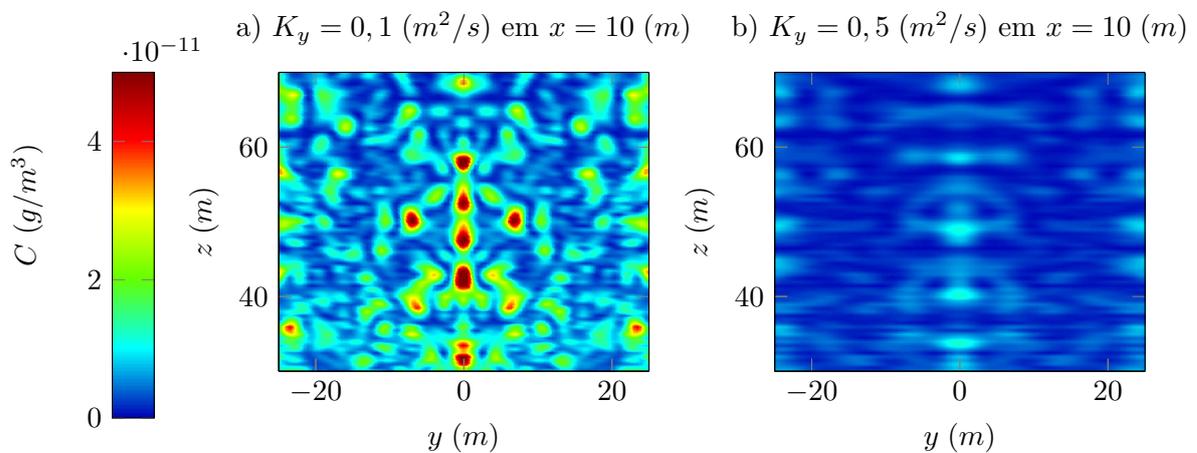


Figura 6.7 – Variação do coeficiente transversal K_y para dois valores diferentes em $x = 10 \text{ (m)}$ no modelo com introdução da fase.

Nas distribuições temporal-espacial $C(x, t)$ é nítido que o poluente se dispersa em menos tempo com o aumento do coeficiente transversal K_y . Compare a primeira coluna da Figura 6.8 onde $K_y = 0,1 \text{ (m}^2/\text{s)}$ com a segunda onde $K_y = 2,5 \text{ (m}^2/\text{s)}$. A distribuição espacial-temporal foi avaliada em $z = 25 \text{ (m)}$, $z = 50 \text{ (m)}$ e $z = 75 \text{ (m)}$. E como pode ser observado há uma concentração de poluente maior quando avalia-se o modelo em uma altura abaixo da fonte que está disposta à 50 metros de altura, isso é reflexo do perfil vertical escolhido dado pela Equação 4.131.

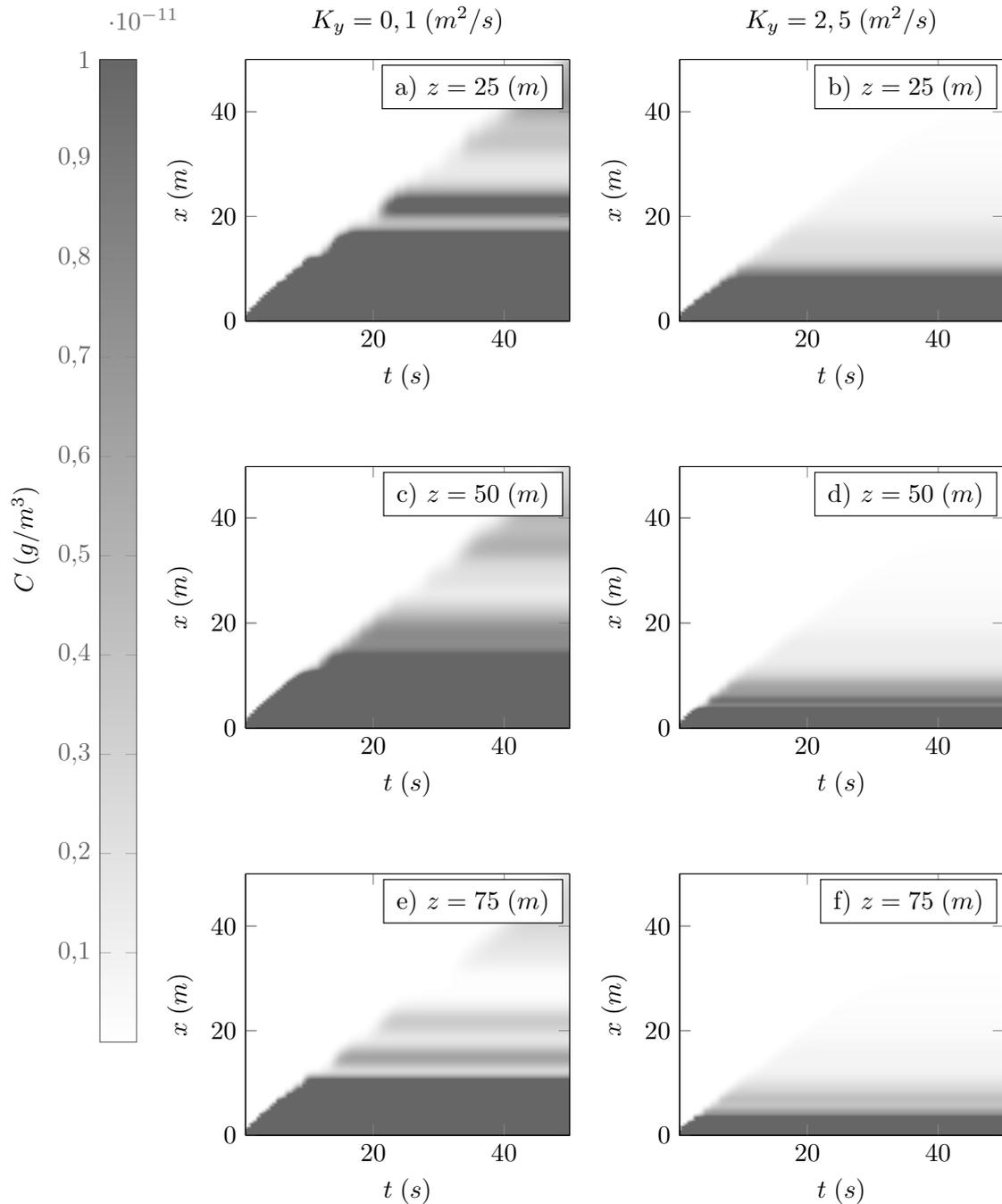
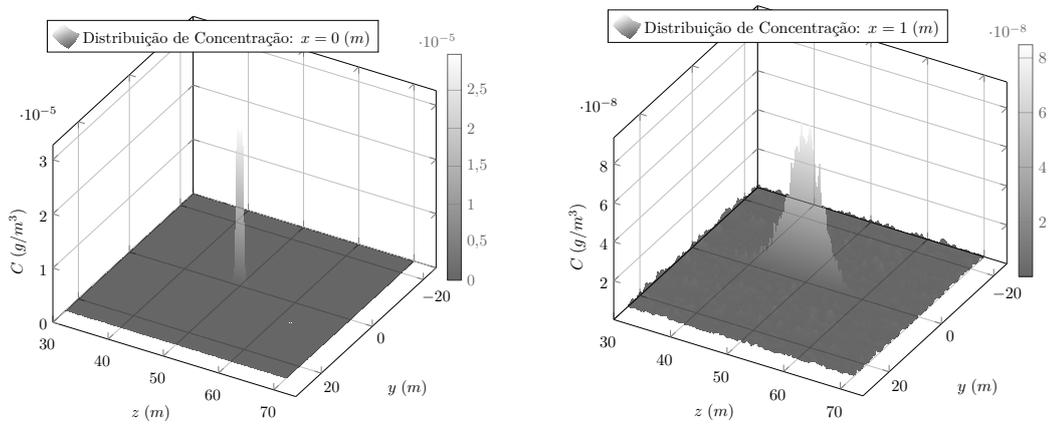


Figura 6.8 – Distribuições espaciais temporais $C(x, t)$ para comparar dois valores para o coeficiente transversal K_y avaliados em três alturas diferentes.

6.1.4 Avaliando a Concentração ao Longo Eixo x

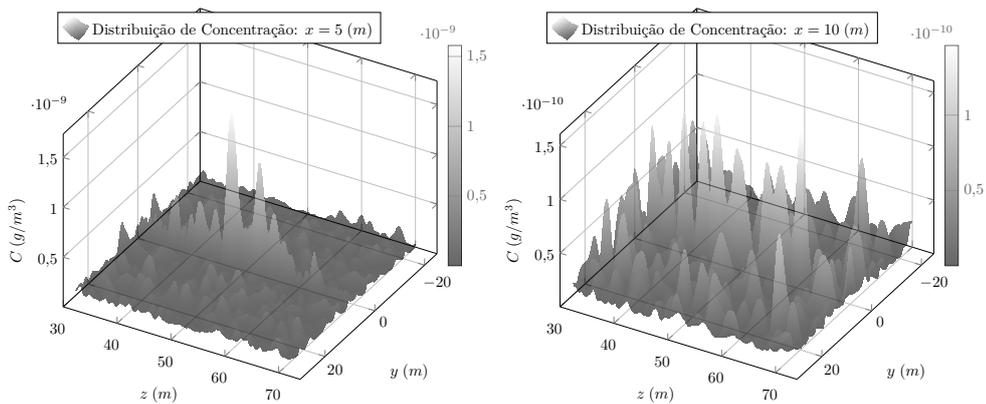
A fim de observar o comportamento das flutuações de concentração do modelo sesquilinear ao se afastar da fonte foi simulado uma situação onde ocorre um afastamento longitudinal e os parâmetros aplicados foram velocidade de $u = 1 \text{ (m/s)}$, $t = 10 \text{ (s)}$,

$K_x = 0,1 \text{ (m}^2/\text{s)}$, $K_y = 0,1 \text{ (m}^2/\text{s)}$, $K_{za} = 0,1$ e $K_{zb} = 0,5$ na distribuição espacial $C(y, z)$. O comportamento ao longo da componente $x \text{ (m)}$ mostra que com o distanciamento da fonte o número de flutuações aumentam assim como a quantidade de poluente diminui. Se observar uma chaminé é possível ver um comportamento semelhante que aponta para o aumento de flutuações na pluma com o distanciamento da fonte. Isto é mais uma evidência da capacidade deste modelo representar o comportamento na dispersão que muda conforme as estruturas coerentes que estão presentes no escoamento devido a existência de turbulência.



(a) Distribuição da concentração $C(y, z)$ para $x = 0, 0 \text{ (m)}$.

(b) Distribuição da concentração $C(y, z)$ para $x = 1, 0 \text{ (m)}$.



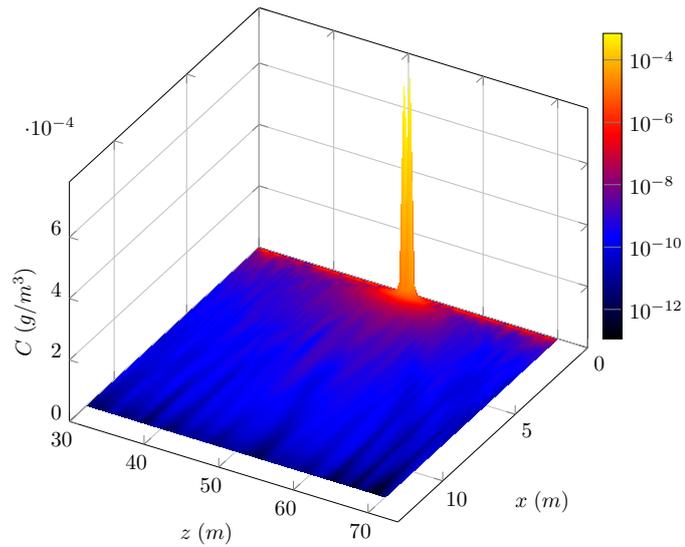
(c) Distribuição da concentração $C(y, z)$ para $x = 5, 0 \text{ (m)}$.

(d) Distribuição da concentração $C(y, z)$ para $x = 10, 0 \text{ (m)}$.

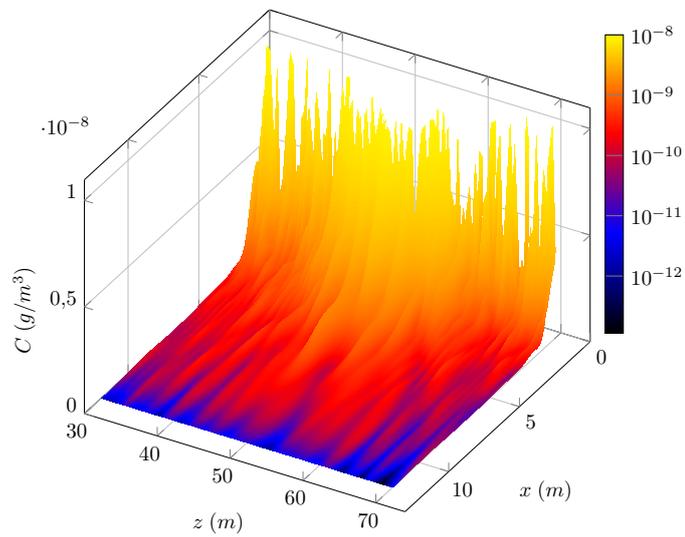
Figura 6.9 – Avaliação do comportamento do modelo durante o afastamento longitudinal da fonte.

6.1.5 A Velocidade e o Meandro para Baixas Velocidades

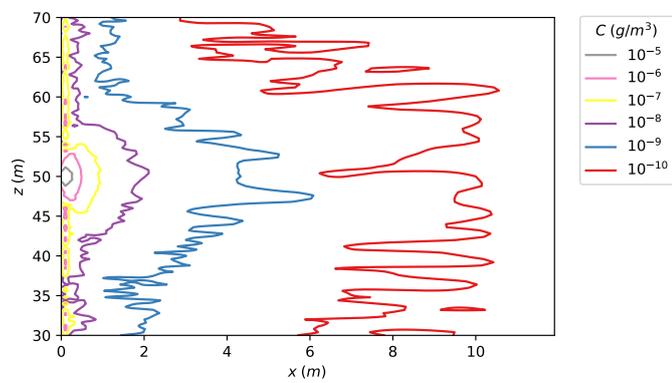
O Meandro é um fenômeno considerado difícil de descrever através de modelos determinísticos como já foi mencionado ocorre para condições onde a velocidade do vento é abaixo de $1,5 \text{ (m/s)}$. Segundo Moreira et al., 2013, e Degrazia et al., 2011, existe duas grandes dificuldades para serem enfrentadas na simulação de baixa velocidade do vento, a primeira é associada com forte estabilidade e estagnação do ar o que corresponde a processos de difusão altamente não-estacionários e não-homogêneos. Já na segunda a dispersão é dominada pelas flutuações na direção do vento que pode ser bastante grande [Anfossi et al., 1990]. Como já foi discutido a maioria dos modelos atuais faz previsões melhores para condições atmosféricas instáveis. Muitos pesquisadores começaram a explorar as condições estáveis através de modelos como Sharan e Yadav, 1998, que usaram um modelo de difusão incluindo a difusão longitudinal e coeficientes de difusão variáveis para descrever o processo de dispersão em condições de ventos fracos. Estes coeficientes de difusão foram considerados como uma função linear da distância da fonte. Cirillo e Poli, 1992, integram a fórmula *puff* gaussiano com respeito ao tempo e assumindo os desvios padrões do *puff* σ_x , σ_y e σ_z dependentes do tempo. Carvalho e Vilhena, 2005, resolveram a equação de Langevin de uma maneira semi-analítica por um método de aproximações sucessivas ou método iterativo de Picard. Todos esses métodos tiveram que trabalhar com um maior número de parâmetros para obter resultados que pudessem ser considerados bons para a condição CLE. Apesar do nosso modelo não ter feito uma validação com um experimento de ventos fracos ele apresentou propriedades que podem ser associadas ao meandro, para ventos fracos na Figura 6.10 o modelo determinístico-estocástico apresentou uma instabilidade dos máximos de concentração na direção preferencial do vento e o desaparecimento deste comportamento para velocidade altas como na Figura 6.11. Isso é algo importante dado que modelos determinísticos, independentemente da situação mantém os máximos de concentração alinhados e centralizados com direção do vento. Assim que houver um estudo para compreender o comportamento do coeficiente complexo e relacionar ao fenômeno físico e construir uma parametrização da turbulência adequado ao modelo ele poderá ser testado para experimentos sob condições de vento fraco.



(a) Distribuição da concentração $C(x, z)$ para velocidade $u = 1$ (m/s).

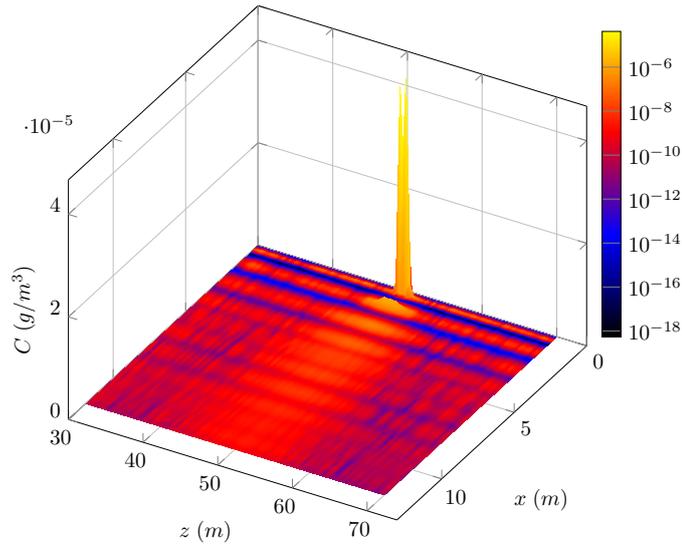


(b) Zoom da distribuição 6.10a para observar as estruturas.

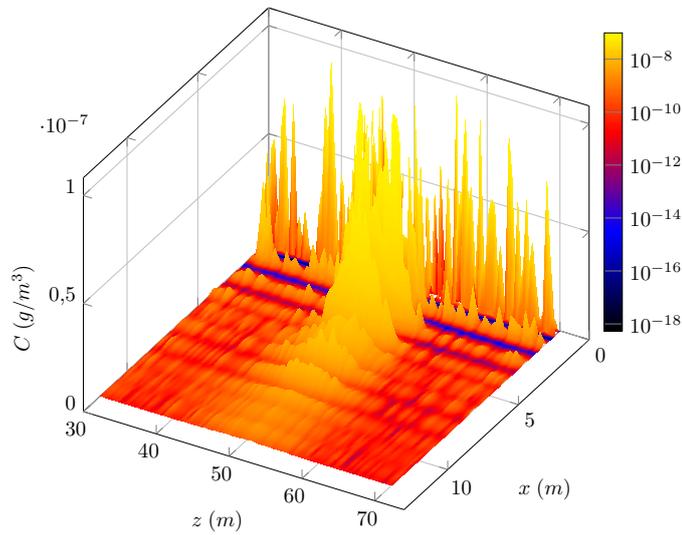


(c) Isolinhas mostrando o comportamento da distribuição $C(x, z)$.

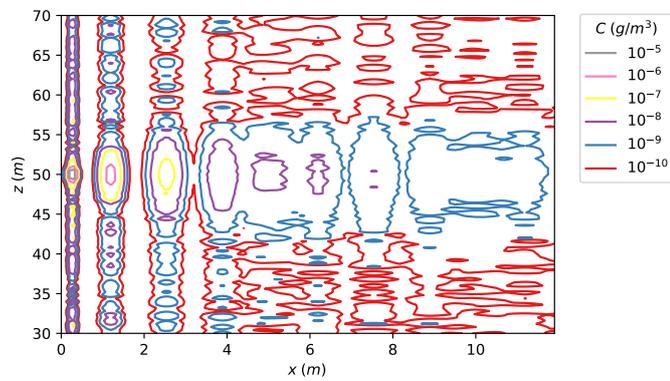
Figura 6.10 – Distribuição da concentração para velocidade de vento fraco.



(a) Distribuição da concentração $C(x, z)$ para velocidade $u = 10$ (m/s).



(b) Zoom da distribuição 6.11a para observar as estruturas.



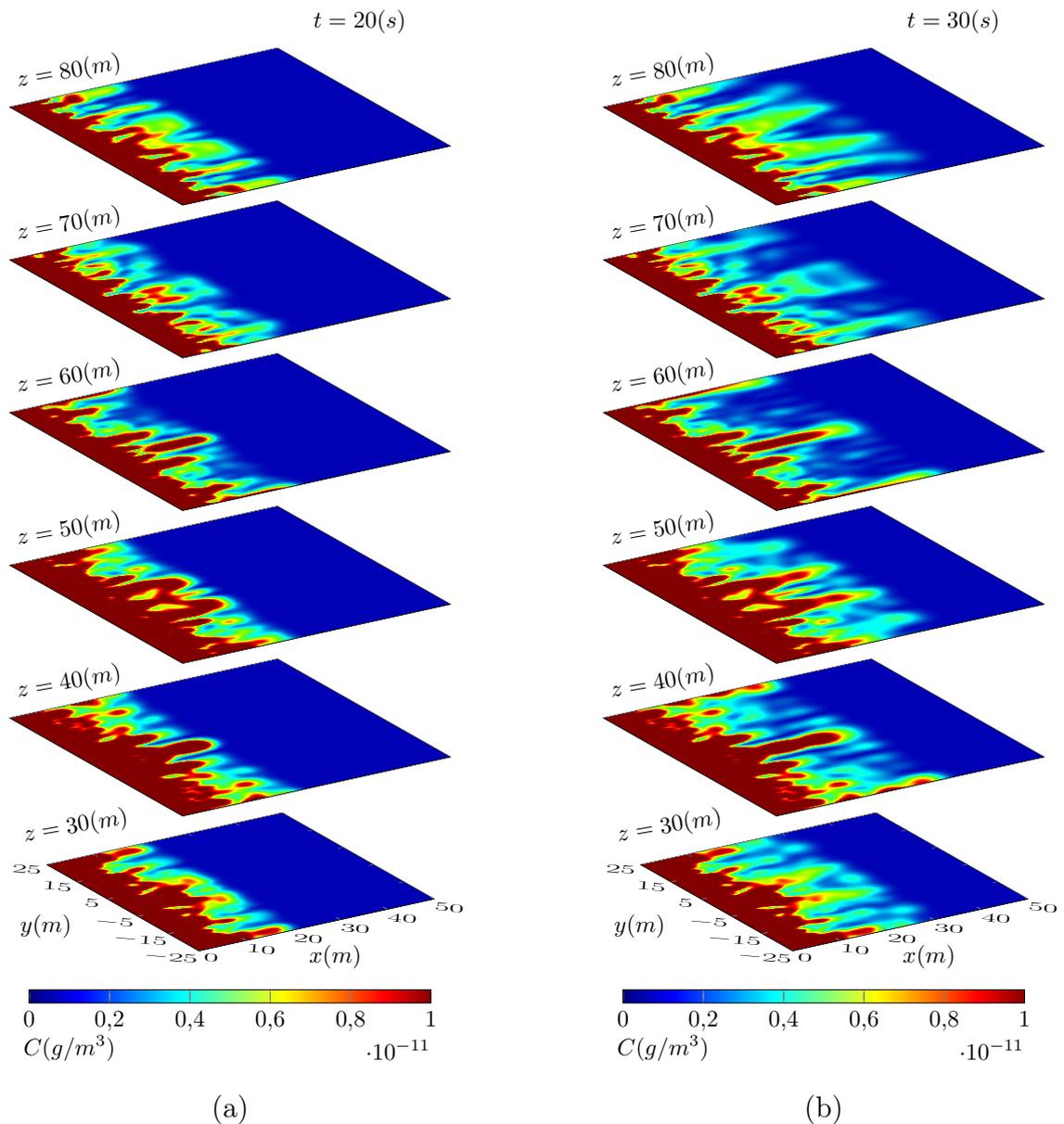
(c) Isolinhas mostrando o comportamento da distribuição $C(x, z)$.

Figura 6.11 – Distribuição da concentração para velocidade de vento forte.

6.1.6 Comportamento da Distribuição Frente a Mudança de Perfil do Coeficiente Vertical

Aqui é apresentado o comportamento das distribuições de concentração do modelo para três perfis verticais qualitativos diferentes. Perfil trigonométrico 1 que é simétrico, perfil trigonométrico 2 que descreve qualitativamente o comportamento para uma camada limite estável e perfil trigonométrico 3 uma camada limite convectiva também de forma qualitativa.

No primeiro conjunto de Figuras 6.12 (a,b,c e d) é possível ver a evolução temporal da dispersão do poluente assim como a evolução espacial para o perfil simétrico. Essa característica reflete no comportamento da distribuição.



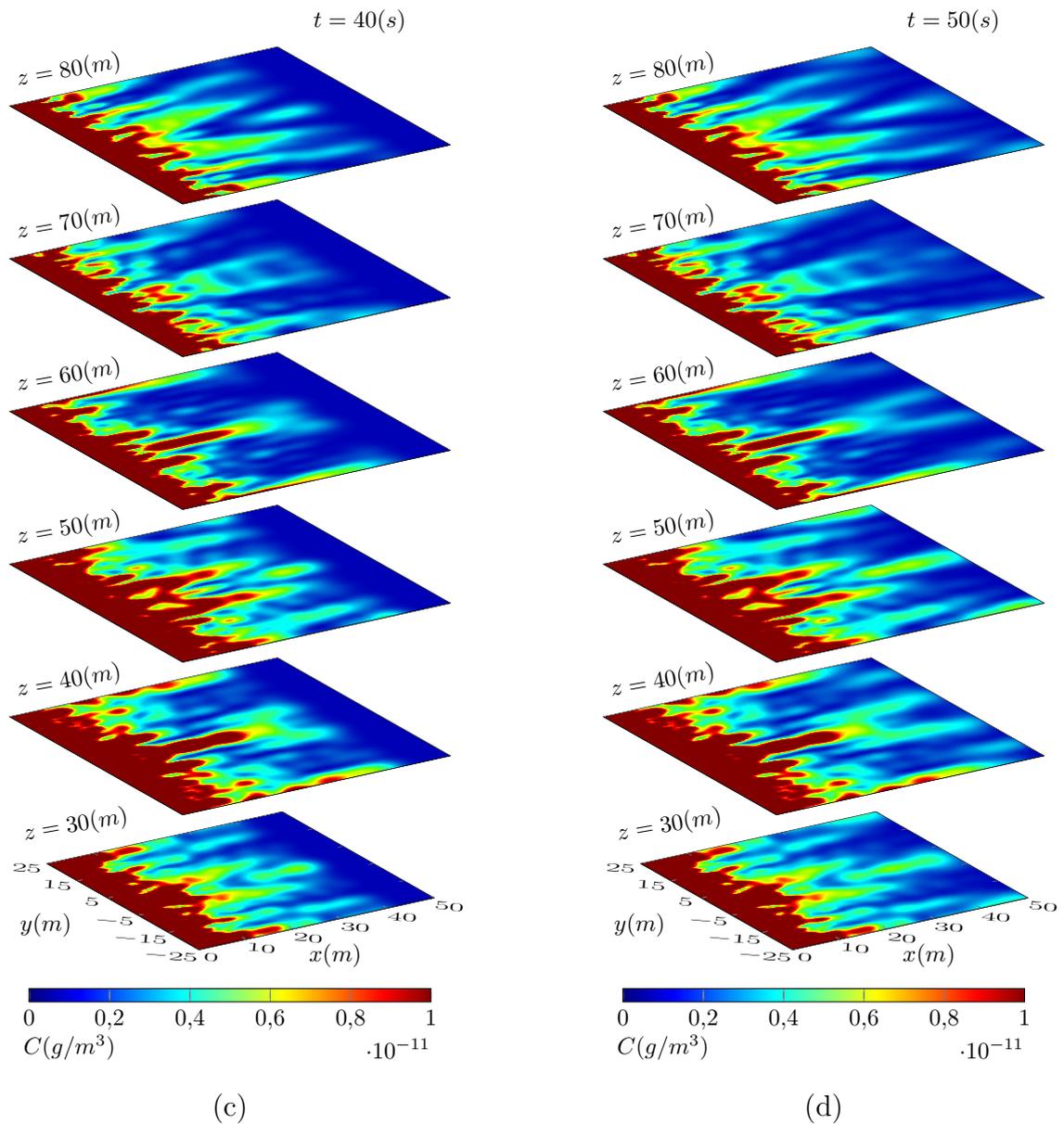
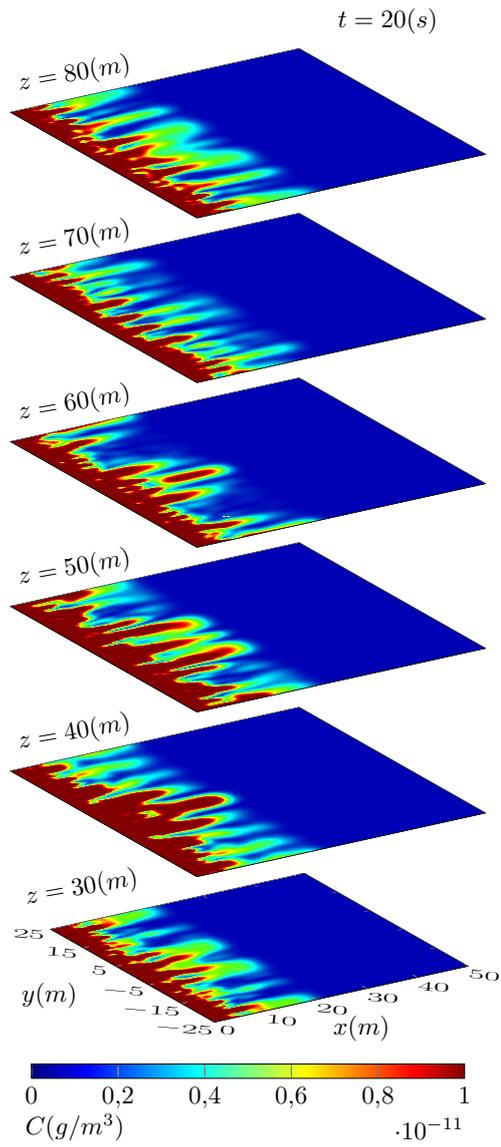
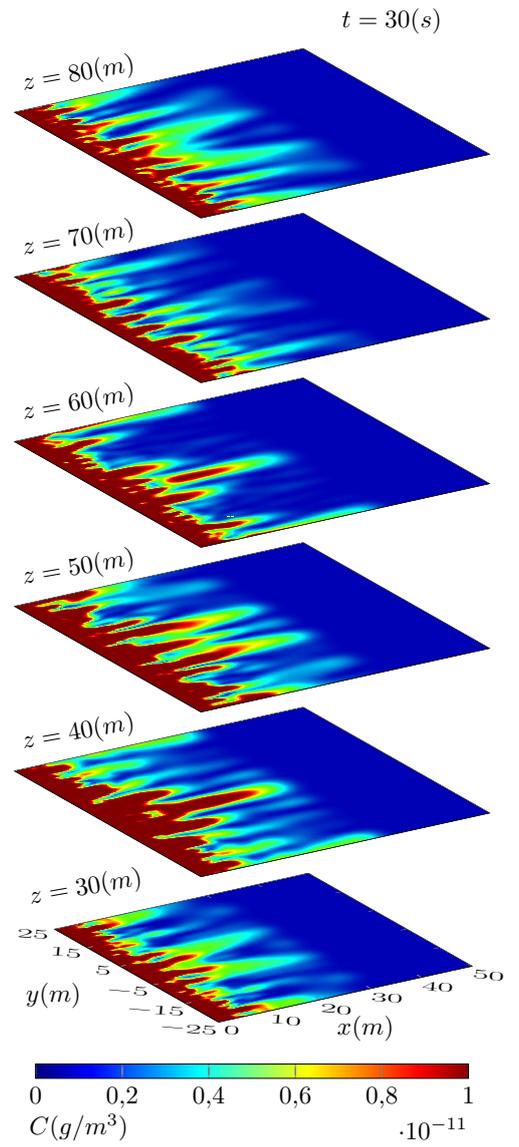


Figura 6.12 – Distribuições de concentração $C(x,y)$ aplicando perfil de comportamento simétrico, Equação 4.131 para tempos e alturas diferentes.

Com o perfil qualitativo de camada limite estável as distribuições de concentração evoluem de forma mais lenta desta forma os maiores níveis de poluente se acumulam perto da fonte de emissão como é observado nas Figuras 6.13 (a,b,c e d).



(a)



(b)

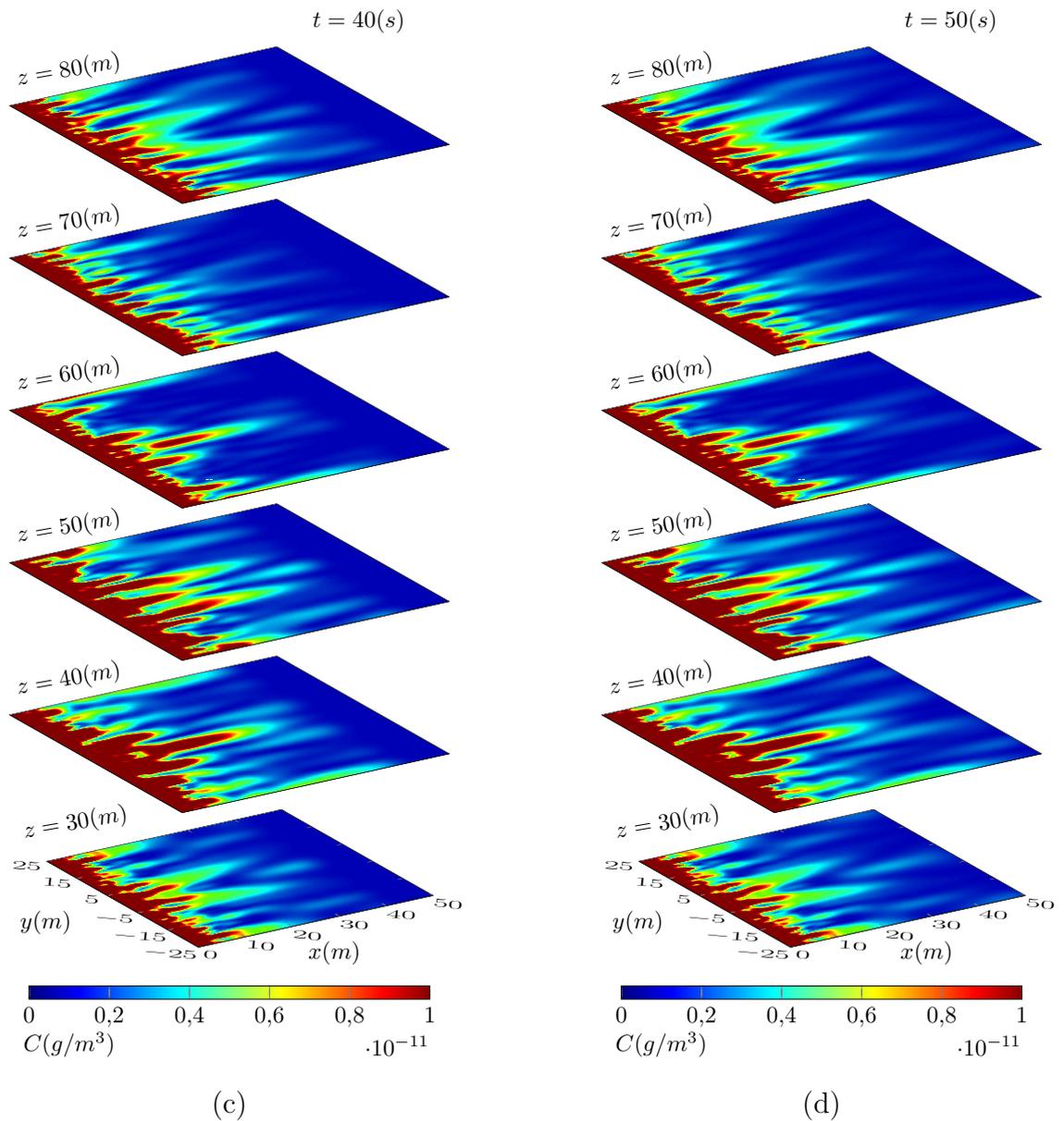
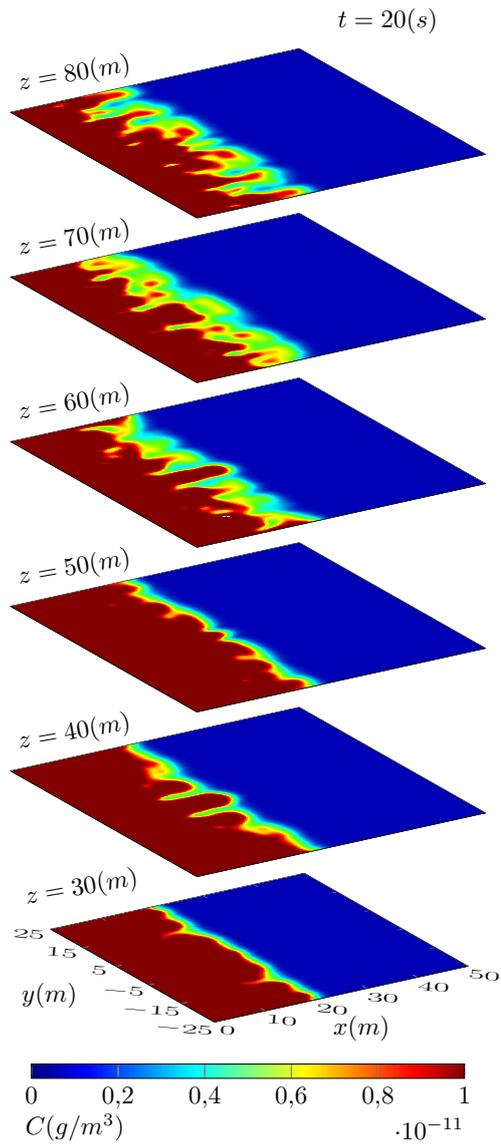
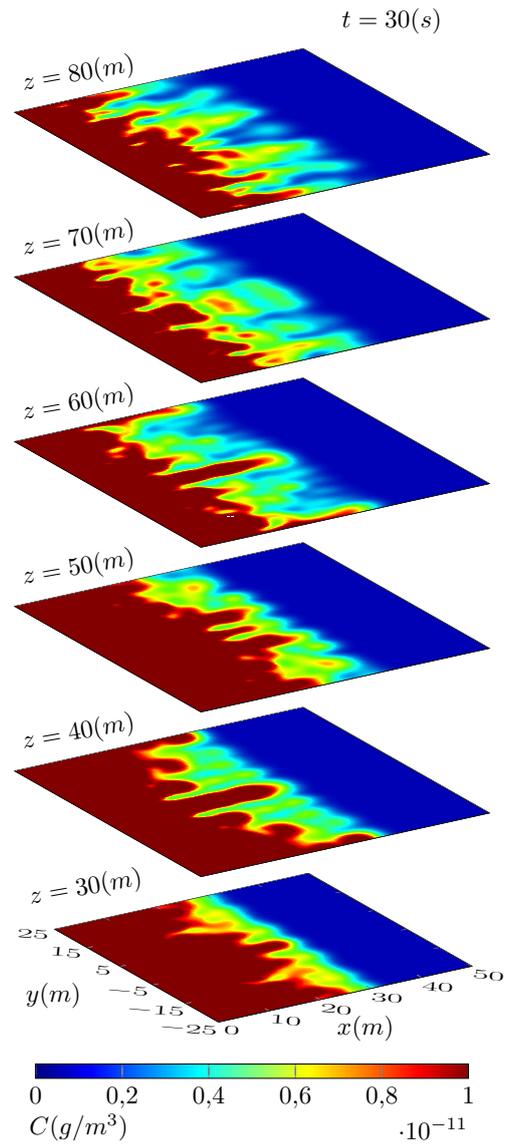


Figura 6.13 – Distribuições de concentração $C(x,y)$ aplicando perfil de características de CLE, Equação 4.132, para tempos e alturas diferentes.

Já o perfil qualitativo de camada limite convectiva apresenta uma concentração que espalha o poluente rapidamente para longe da fonte de emissão, visto nas Figuras 6.14 (a,b,c e d), e há uma proporção maior de poluente ao longo do espaço avaliado.



(a)



(b)

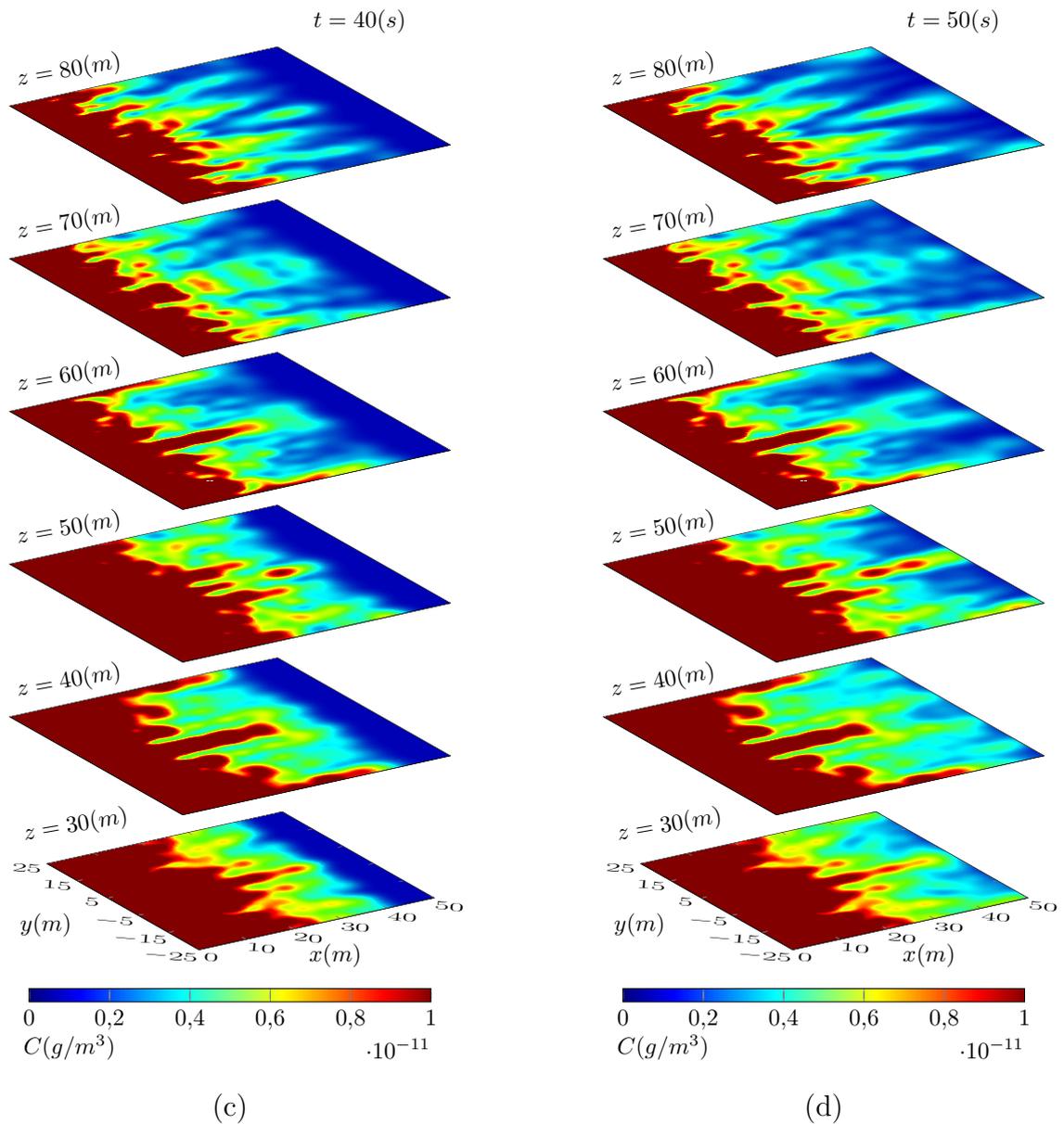


Figura 6.14 – Distribuições de concentração $C(x,y)$ aplicando perfil de características de CLC, Equação 4.133, para tempos e alturas diferentes.

O comportamento visto nas Figura 6.13 perfil CLE e na Figura 6.14 perfil CLC é exatamente o que se espera nos respectivos regimes. Num regime de CLE a dispersão ocorre de forma mais lenta do que em regime CLC. Assim na CLC o poluente atinge distâncias maiores em um tempo menor do que para condições CLE.

6.2 Aplicação do Modelo ao Experimento de Copenhagen

Ao estudar o comportamento da solução variando os parâmetros percebeu-se a necessidade de aplicar o modelo para simular experimentos. Através das simulações foram rastreados indícios de um mecanismo que conduzam à uma ideia para parametrização do modelo. O experimento de Copenhagen é escolhido, para uma primeira abordagem, devido sua simplicidade e também por possuir regimes de estabilidades diferente dentro da camada limite convectiva.

Os coeficientes de difusão vertical inseridos em modelos de dispersão parametrizam a turbulência através de um perfil que constrói comportamento da camada limite atmosférica juntamente com a inclusão parâmetros micrometeorológicos. Ao contrário desses modelos que utilizam perfis vertical bem consolidados na literatura o modelo irá simular o experimento usando coeficientes constantes nas direções transversais e longitudinais e o coeficiente vertical vai possuir um perfil trigonométrico na componente real e um valor constante para a componente imaginária o que o torna simples. A escolha de perfil tem como objetivo inicial compreender, relacionar e encontrar um mecanismo ligado à física do problema que valide a ideia do modelo. Portanto, para avaliar qualquer comportamento do modelo frente as mudanças físicas é fundamental minimizar o número de parâmetros.

6.2.1 Avaliação do Comportamento K_{za} e K_{zb}

Foi estudado o comportamento de K_{za} e K_{zb} , parâmetros centrais do coeficiente de difusão vertical, para avaliar o que cada um contribuía para o modelo. Observe a Figura 6.15 que apresenta o experimento 9 de Copenhagen fixando o K_{zb} . O aumento do valor do parâmetro K_{za} faz a concentração diminuir cada vez mais. Ora, pelos estudos anteriores era esperado que a concentração diminuísse a medida que aumenta-se a velocidade de dispersão do modelo, logo o comportamento físico está correto e mostra que não há aparecimento de quaisquer fator ou característica estocástica.

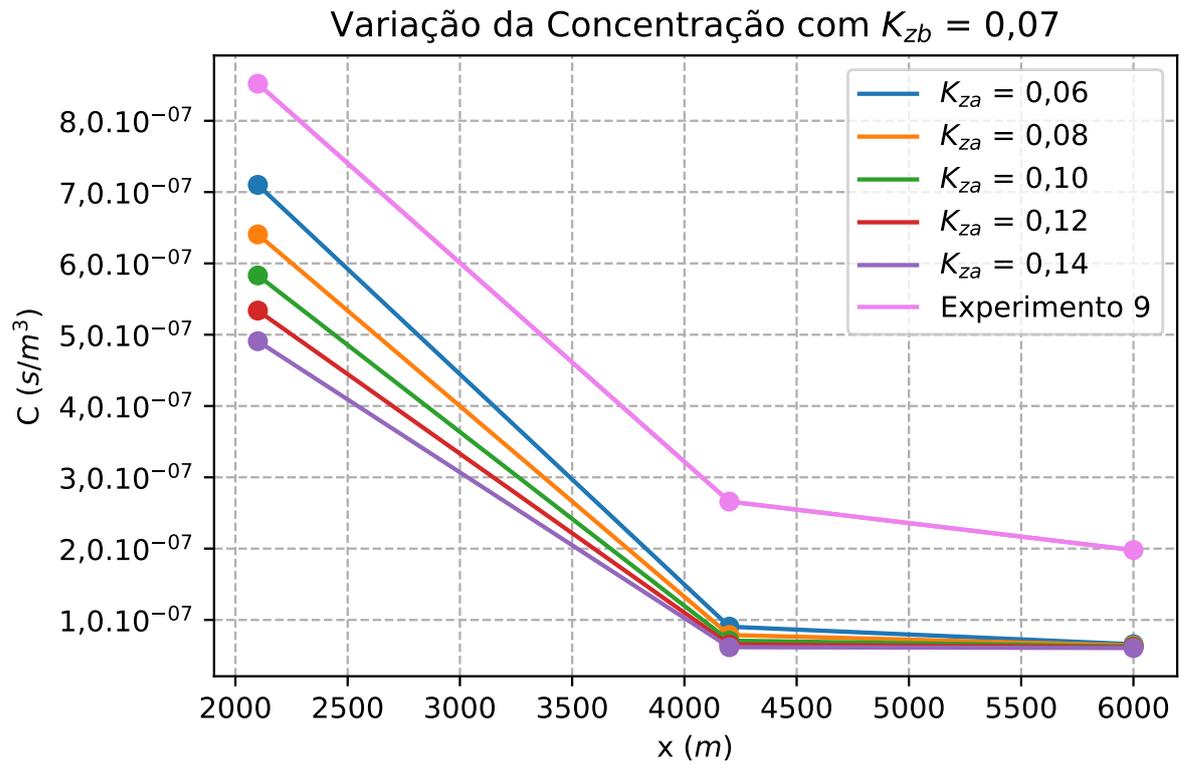


Figura 6.15 – Comportamento do modelo ao variar o parâmetro, K_{za} da parte real, do coeficiente de difusão da Equação 4.131 aplicado ao experimento 9 de Copenhagen.

Quando o parâmetro K_{zb} é variado aparecem características estocásticas, como pode ser visto no gráfico apresentado na Figura 6.16. As curvas de concentração do experimento 9 para cada valor diferente aplicado em K_{zb} não se comportam linearmente como no gráfico da Figura 6.15. Confirmando novamente que as flutuações que inserem características reais à dispersão são agregadas ao modelo pelo K_{zb} .

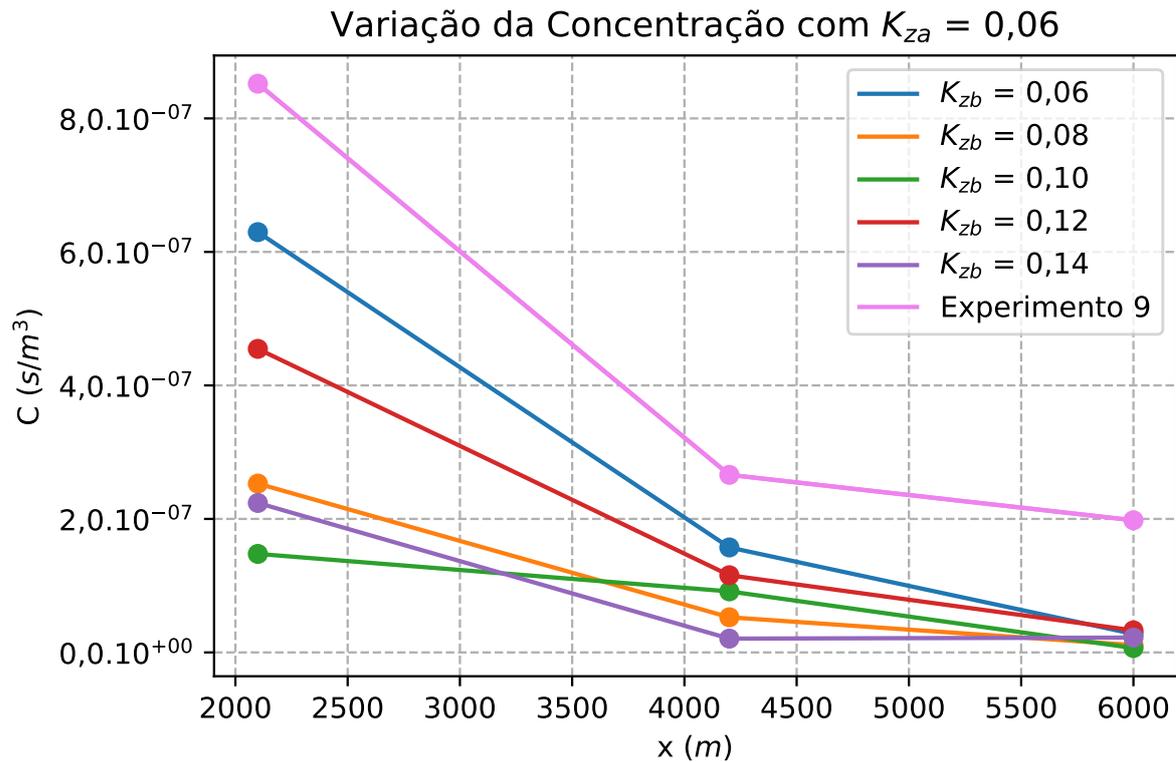


Figura 6.16 – Comportamento do modelo ao variar o parâmetro, K_{zb} da parte complexa, do coeficiente de difusão da Equação 4.131 aplicado ao experimento 9 de Copenhagen.

6.2.2 Exploração dos Dados Micrometeorológicos do Experimento de Copenhagen

Ao estudar uma forma de justificar a inclusão da fase foi decidido avaliar o experimento de Copenhagen em busca de padrões, observando e separando os experimentos em regimes de convecção alta, moderada e baixa através da classificação de Panofsky e Dutton, 1984. Inicialmente gráficos polares foram construídos para procurar relações dos parâmetros micrometeorológicos fornecidos pelo experimento e o regime de estabilidade. Os parâmetros dos gráficos polares foram normalizados pelos valores máximos na velocidade $u(m s^{-1})$, velocidade de fricção $u_*(m s^{-1})$, escala de velocidade convectiva $w_*(m s^{-1})$ e altura da camada convectiva $z_i(Km)$ já para a taxa de variação vertical da temperatura ambiente $\Gamma(^{\circ}C/100m)$ e o comprimento de Monin-Obukhov $L(m)$ foram normalizados pelo negativo do valor máximo.

Ao analisar os parâmetros micrometeorológicos de cada regime separado não observam-se grandes resultados, apenas um comportamento muito parecido para os parâmetros que

determinam a convecção através dos critérios de Panofsky nas Figuras 6.17, 6.18 e 6.19.

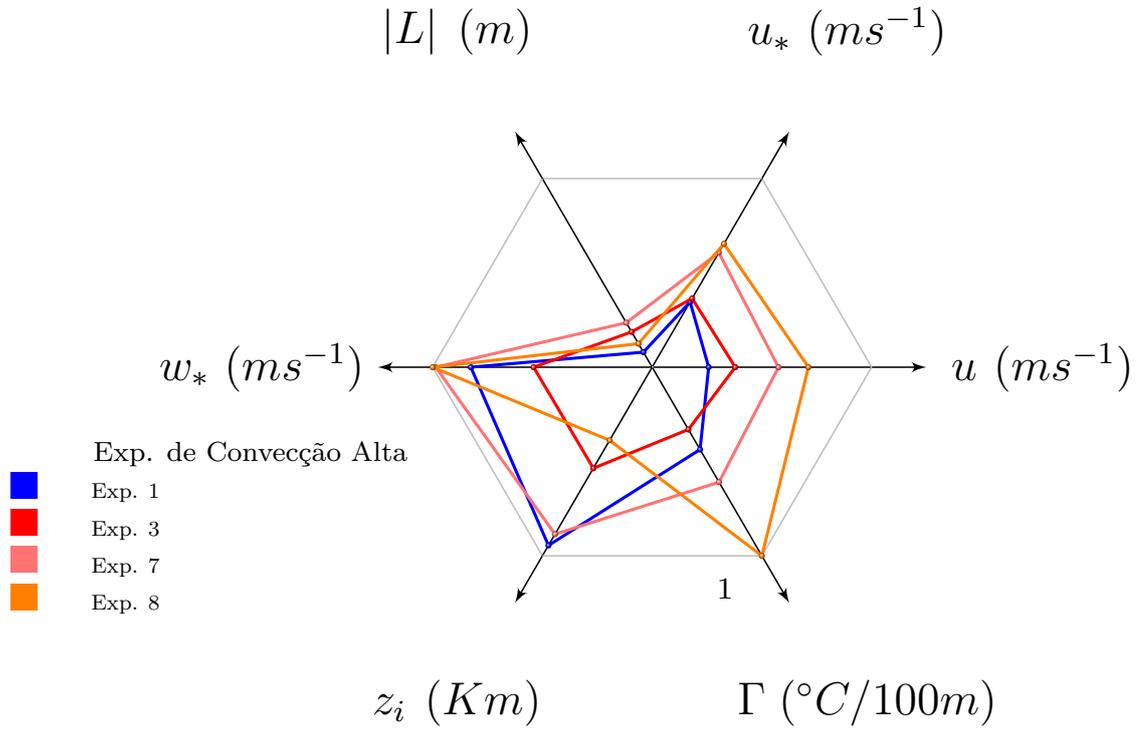


Figura 6.17 – Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhague de convecção alta.

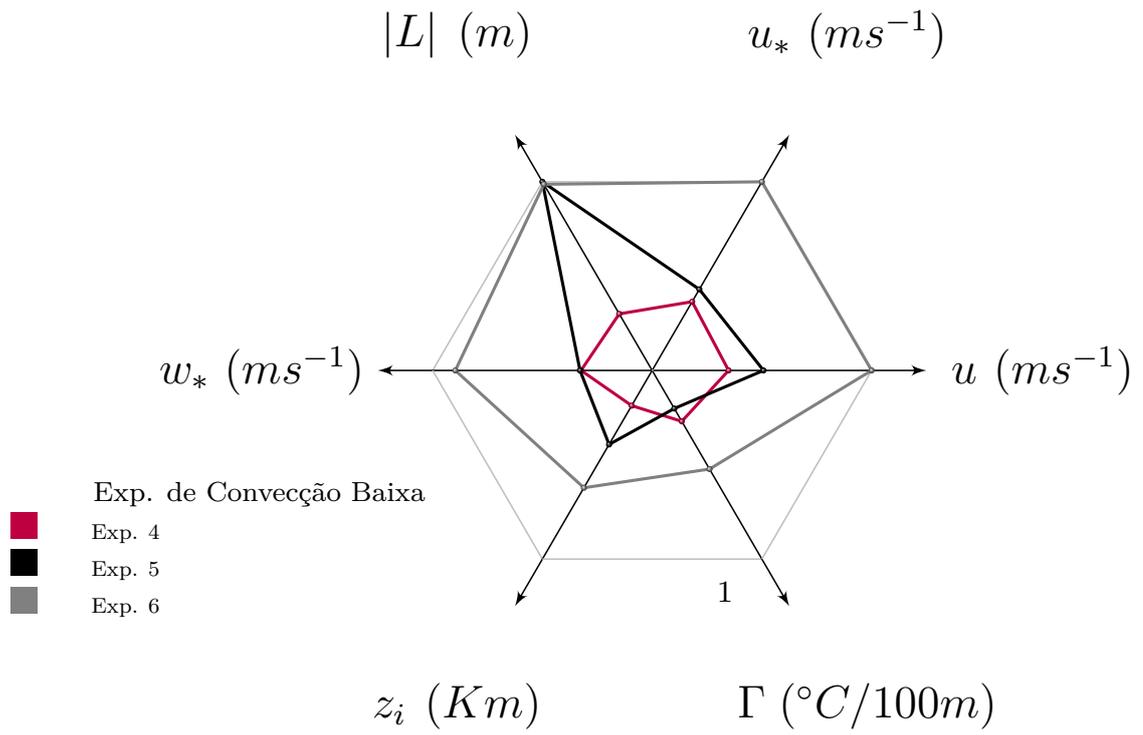


Figura 6.18 – Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhague de convecção baixa.

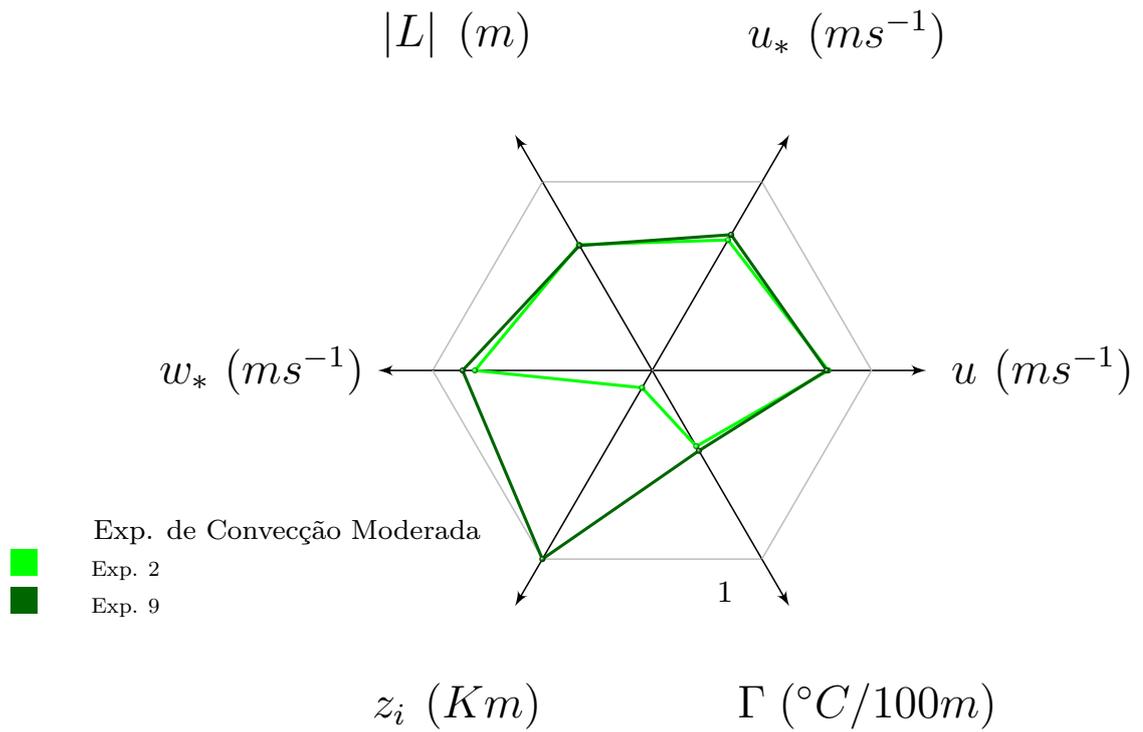


Figura 6.19 – Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhague de convecção moderada.

Quando o gráfico polar é observado sobre a ótica que separa experimentos no regime de convecção alta e baixa percebe-se que em convecção baixa o valor do comprimento de Monin-Obukhov $L \text{ (m)}$ é sempre superior ao de convecção alta.

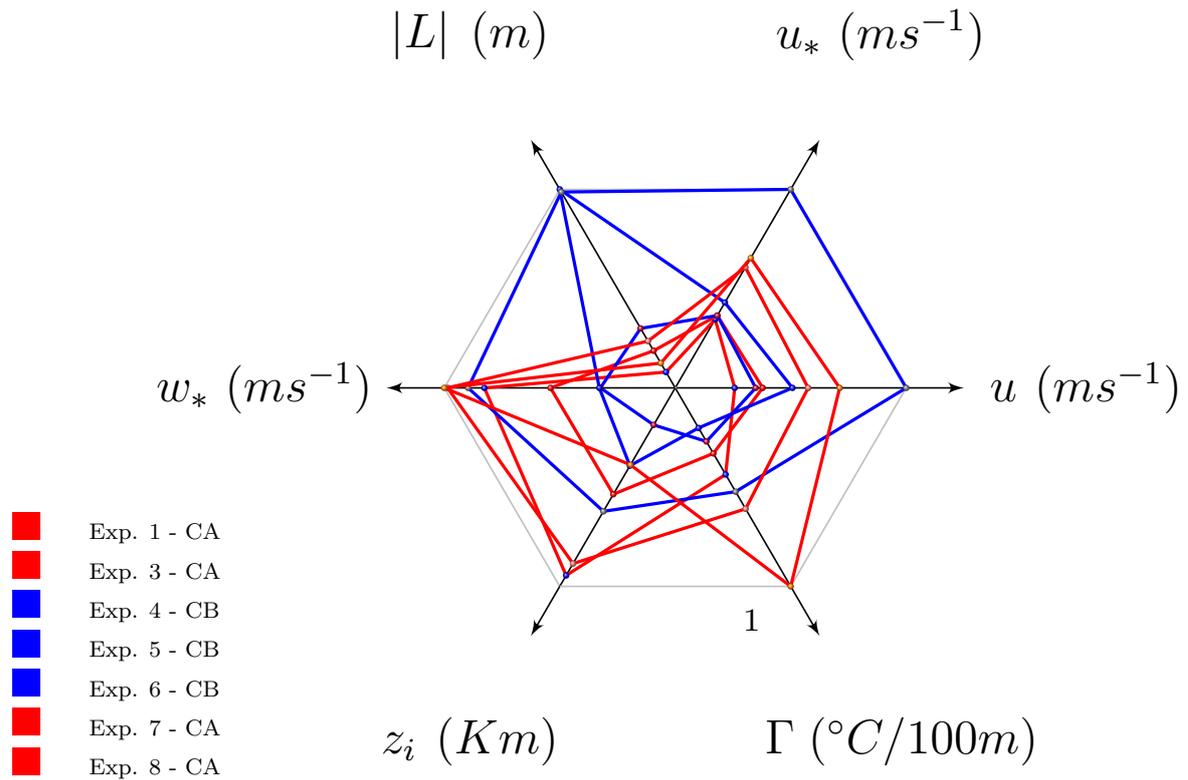


Figura 6.20 – Gráfico polar de avaliação dos parâmetros dos experimentos de Copenhague considerando casos convecção alta (CA) e baixa (CB).

6.2.3 Análise do Modelo Sesquilinear com o Perfil Vertical Simétrico

Parâmetros para os coeficientes de difusão foram obtidos a partir de repetidas simulações dos experimentos de Copenhague com o modelo sesquilinear usando perfil trigonométrico da Equação 4.131. A técnica de mínimos quadrados foi aplicada como forma de medir e detectar o conjunto de parâmetros de coeficientes de difusão turbulenta que aproximasse com justeza os valores experimentais.

O espaço de parâmetros onde o coeficiente vertical K_z não possuía o termo de fase, ou seja, $K_{zb} = 0$, foi explorado, como também o espaço onde a fase estava presente $K_{zb} \neq 0$. Os passos descritos abaixo foram aplicados em cada um dos 9 experimentos. Inicia-se a simulação com todos os coeficientes difusivos turbulentos, $K_x(m^2/s)$, $K_y(m^2/s)$ e K_{za} com valores iguais e $K_{zb} = 0$ representando o modelo sem a fase em cada um dos 9 experimentos. Os parâmetros foram variados de 10^{-7} à 10^3 em passos de potências de 10 e desse conjunto foram extraídos os parâmetros que obtiveram o melhor valor de mínimo quadrado que indicam boas concentrações preditas. A outra exploração feita foi

onde a fase estava presente ($K_{zb} \neq 0$). Fixou-se $K_x(m^2/s)$ e $K_y(m^2/s)$ nos valores ótimos encontrados na exploração anterior e foi variado apenas K_{za} e K_{zb} de 10^{-7} à 10^3 em passos de potências de 10 para encontrar um novo conjunto de parâmetros.

Analisando os valores de mínimo quadrado apresentados, na Tabela 6.3 onde não tem a fase e os da Tabela 6.4, com a fase, mostra que aproximação do modelo aos valores experimentais é melhor com a inserção do parâmetro de fase em 8 dos 9 experimentos. O experimento que não obteve melhora no valor do mínimo quadrado apresenta apenas uma medição experimental.

Além do valor de mínimo quadrado foi avaliado desempenho do modelo em ambas situações através do estudo sobre as concentrações observadas (C_o) e concentração previstas (C_p). Na Tabela 6.5 os valores de concentração observadas e previstas estão especificadas.

Tabela 6.3 – Parâmetros do coeficiente de difusão, dado pela Equação 4.131, que obtiveram os melhores valores através do método de mínimos quadrados (M. Q.). Onde os experimentos de Copenhagen (EXP) foram classificados em regime de convecção alta, moderada e baixa (CA, CM e CB). Assumindo o modelo sem a fase ($K_{zb} = 0$).

EXP	CLASSIF.	K_x	K_y	K_{za}	K_{zb}	M.Q.
1	CA	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	0	$5,4 \cdot 10^{-13}$
2	CM	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	0	$7,0 \cdot 10^{-14}$
3	CA	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	0	$3,3 \cdot 10^{-13}$
4	CB	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	0	$4,2 \cdot 10^{-15}$
5	CB	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	0	$9,4 \cdot 10^{-13}$
6	CB	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	0	$3,1 \cdot 10^{-13}$
7	CA	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	0	$7,7 \cdot 10^{-13}$
8	CA	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	0	$3,3 \cdot 10^{-14}$
9	CM	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^1$	0	$3,2 \cdot 10^{-13}$

Tabela 6.4 – Parâmetros do coeficiente de difusão, dado pela Equação 4.131, que obtiveram os melhores valores através do método de mínimos quadrados (M. Q.). Onde os experimentos de Copenhagen (EXP) foram classificados em regime de convecção alta, moderada e baixa (CA, CM e CB) onde (P) é o padrão (Respeita - R, Não Respeita - NR e Indefinido - IND), onde indefinido corresponde aos experimentos de convecção moderada.

EXP	CLASSIF.	K_x	K_y	K_{za}	K_{zb}	P	M.Q.
1	CA	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	R	$2,5 \cdot 10^{-14}$
2	CM	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-6}$	IND	$4,5 \cdot 10^{-14}$
3	CA	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-1}$	R	$6,5 \cdot 10^{-14}$
4	CB	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$0 \cdot 10^0$	R	$4,2 \cdot 10^{-15}$
5	CB	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^2$	NR	$4,8 \cdot 10^{-13}$
6	CB	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-5}$	R	$1,6 \cdot 10^{-14}$
7	CA	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-3}$	R	$2,8 \cdot 10^{-14}$
8	CA	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^{-2}$	NR	$3,6 \cdot 10^{-15}$
9	CM	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^0$	IND	$5,9 \cdot 10^{-14}$

Tabela 6.5 – Valores de concentração para comparação dos resultados observados pelo experimento de Copenhagen Gryning e Lyck, 1984, com os preditos pelo modelo sesquilinear sem fase ($Kzb = 0$) e com a fase ($Kzb \neq 0$).

EXP	$x(m)$	$C_o(sm^{-3})$	$C_{Kzb=0}(sm^{-3})$	$C_{Kzb \neq 0}(sm^{-3})$
1	1900	$1,05 \cdot 10^{-6}$	$1,07 \cdot 10^{-6}$	$1,09 \cdot 10^{-6}$
	3700	$2,14 \cdot 10^{-7}$	$9,45 \cdot 10^{-7}$	$3,68 \cdot 10^{-7}$
2	2100	$9,85 \cdot 10^{-7}$	$7,23 \cdot 10^{-7}$	$7,73 \cdot 10^{-7}$
	4200	$2,83 \cdot 10^{-7}$	$2,45 \cdot 10^{-7}$	$2,76 \cdot 10^{-7}$
3	1900	$1,63 \cdot 10^{-6}$	$1,29 \cdot 10^{-6}$	$1,85 \cdot 10^{-6}$
	3700	$7,95 \cdot 10^{-7}$	$3,90 \cdot 10^{-7}$	$8,92 \cdot 10^{-7}$
	5400	$3,76 \cdot 10^{-7}$	$1,69 \cdot 10^{-7}$	$4,56 \cdot 10^{-7}$
4	4000	$1,57 \cdot 10^{-6}$	$1,51 \cdot 10^{-6}$	$1,51 \cdot 10^{-6}$
5	2100	$1,21 \cdot 10^{-6}$	$2,11 \cdot 10^{-6}$	$6,82 \cdot 10^{-7}$
	4200	$7,24 \cdot 10^{-7}$	$5,44 \cdot 10^{-7}$	$4,91 \cdot 10^{-7}$
	6100	$4,75 \cdot 10^{-7}$	$1,64 \cdot 10^{-7}$	$9,47 \cdot 10^{-8}$
6	2000	$7,44 \cdot 10^{-7}$	$2,72 \cdot 10^{-7}$	$7,05 \cdot 10^{-7}$
	4200	$3,37 \cdot 10^{-7}$	$7,10 \cdot 10^{-8}$	$3,16 \cdot 10^{-7}$
	5900	$1,74 \cdot 10^{-7}$	$3,66 \cdot 10^{-8}$	$2,92 \cdot 10^{-7}$
7	2000	$9,48 \cdot 10^{-7}$	$1,09 \cdot 10^{-7}$	$8,58 \cdot 10^{-7}$
	4100	$2,62 \cdot 10^{-7}$	$2,17 \cdot 10^{-8}$	$1,21 \cdot 10^{-7}$
	5300	$1,15 \cdot 10^{-7}$	$1,02 \cdot 10^{-8}$	$1,27 \cdot 10^{-7}$
8	1900	$9,76 \cdot 10^{-7}$	$1,06 \cdot 10^{-6}$	$1,02 \cdot 10^{-6}$
	3600	$2,64 \cdot 10^{-7}$	$3,81 \cdot 10^{-7}$	$2,19 \cdot 10^{-7}$
	5300	$9,80 \cdot 10^{-8}$	$2,09 \cdot 10^{-7}$	$8,91 \cdot 10^{-8}$
9	2100	$8,52 \cdot 10^{-7}$	$3,35 \cdot 10^{-7}$	$1,00 \cdot 10^{-6}$
	4200	$2,66 \cdot 10^{-7}$	$8,93 \cdot 10^{-8}$	$4,47 \cdot 10^{-7}$
	6000	$1,98 \cdot 10^{-7}$	$4,55 \cdot 10^{-8}$	$2,58 \cdot 10^{-7}$

O modelo com a fase apresentou um padrão que relaciona os parâmetros K_{za} e K_{zb} à estabilidade atmosférica do experimento, veja a Tabela 6.4. Sob regime de convecção alta, isto é, momento em que há maior criação de estruturas turbulentas na camada limite atmosférica, os valores de K_{zb} , termo responsável pela existência de estruturas coerentes, são superiores ou iguais aos valores de K_{za} . Já em regime de convecção baixa há uma inversão, o parâmetro K_{za} passa a ser superior ou igual ao K_{zb} . Dos 9 experimentos 7 foram avaliados, pois eram classificados com convectividade baixa ou alta e destes, 5 respeitaram o padrão acima descrito.

Os índices estatísticos baseados em Hanna, 1989, foram calculados a correlação (COR), erro quadrático médio normalizado (NMSE) e o desvio padrão fracional (FS).

Sendo valores ideais para NMSE e FS zero, já para COR é um.

Tabela 6.6 – Comparação dos índices estatísticos para a simulação do experimento de Copenhagen sem ($K_{zb} = 0$) e com ($K_{zb} \neq 0$) a fase.

ÍNDICES	$K_{zb} = 0$	$K_{zb} \neq 0$
COR	0,76	0,93
NMSE	0,44	0,08
FS	-0,20	-0,01

Os valores estatísticos encontrados podem ser considerados bons, portanto os valores de concentração preditas pelo modelo são capazes de representar cada um dos experimentos de Copenhagen para todas as configurações micrometeorológicas. No gráfico de espalhamento da Figura 6.21 observe que os números em azul, com a fase, mostram uma aproximação dos pontos com a bissetriz maior do que os números em preto. Isso significa que o modelo está gerando valores mais próximos aos valores de concentração observada no caso em que a fase está presente.

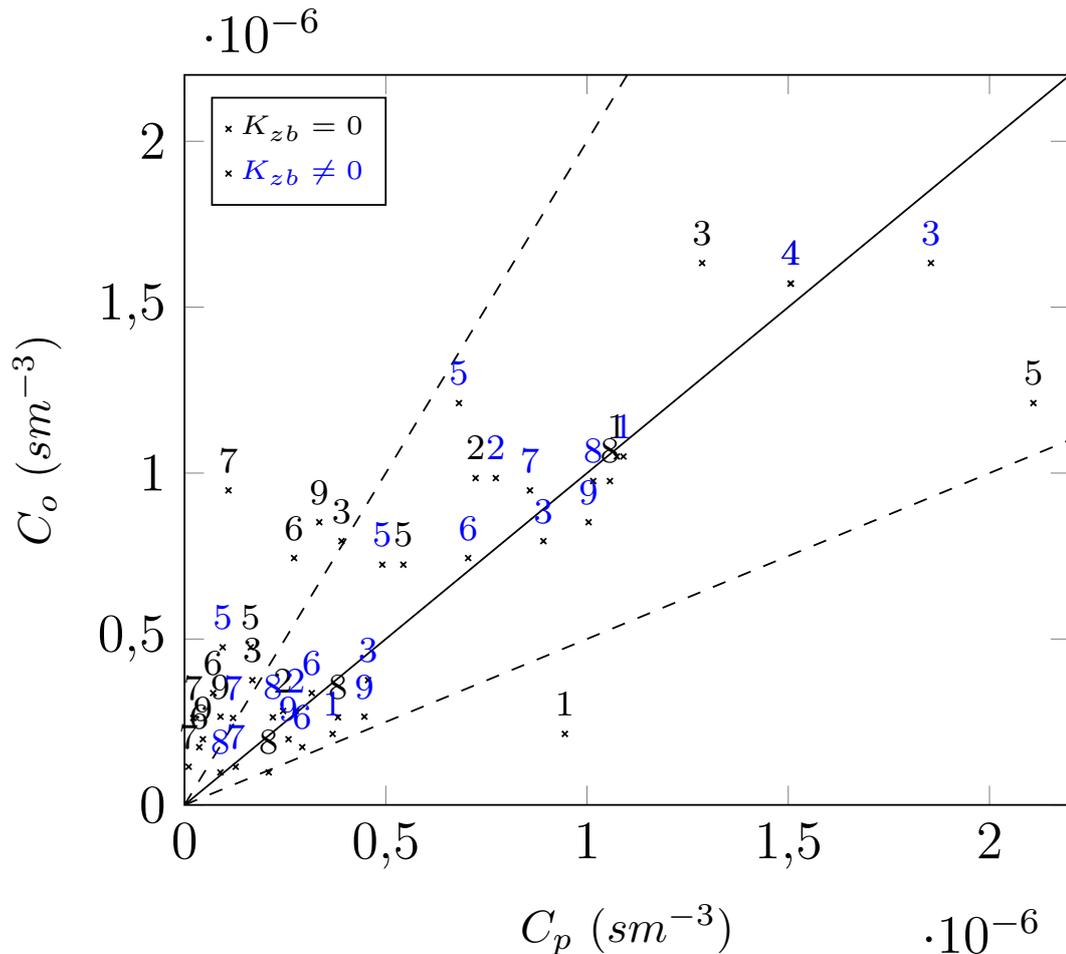


Figura 6.21 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p), para o experimento de Copenhagen sem a fase ($K_{zb} = 0$) em preto e com a fase ($K_{zb} \neq 0$) em azul. O número indica qual dos nove experimentos ele representa.

Analisando três experimentos de Copenhagen com estabilidades diferentes buscando confirmar o resultado encontrado acima foram construídos gráficos de isolinhas para avaliar o comportamento de K_{za} e K_{zb} frente ao mínimo quadrado. Variou-se os parâmetros no entorno dos valores de mínimos quadrados. O que se percebeu é que existem regiões onde o modelo irá representar melhor os experimentos. A questão é como conectar essas regiões a estabilidade do modelo e também à física do fenômeno.

Então, nos gráficos de isolinhas da Figuras 6.22, 6.23 e 6.24 para condições de convecção baixa, alta e moderada pode-se observar que a avaliação do resultado não é direta, mas os mínimos quadrados ocorrem em regiões. No futuro onde um experimento

com mais medições possa ser analisado outros gráficos sob a mesma condição de estabilidade juntamente com suas variáveis micrometeorológicas passam esclarecer e formular uma compreensão sobre os padrões vistos.

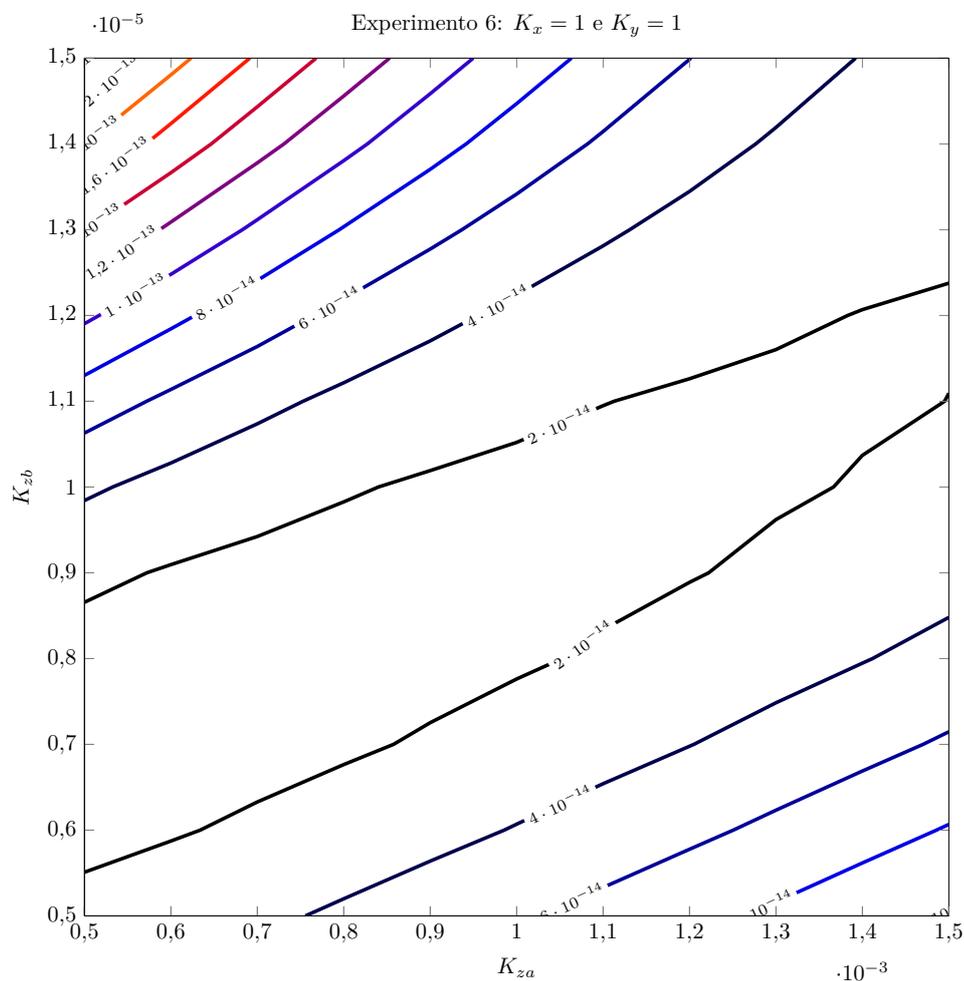


Figura 6.22 – Isolinhas do comportamento K_{za} e K_{zb} vinculado ao mínimo quadrado do experimento 6 de Copenhague de convecção baixa.

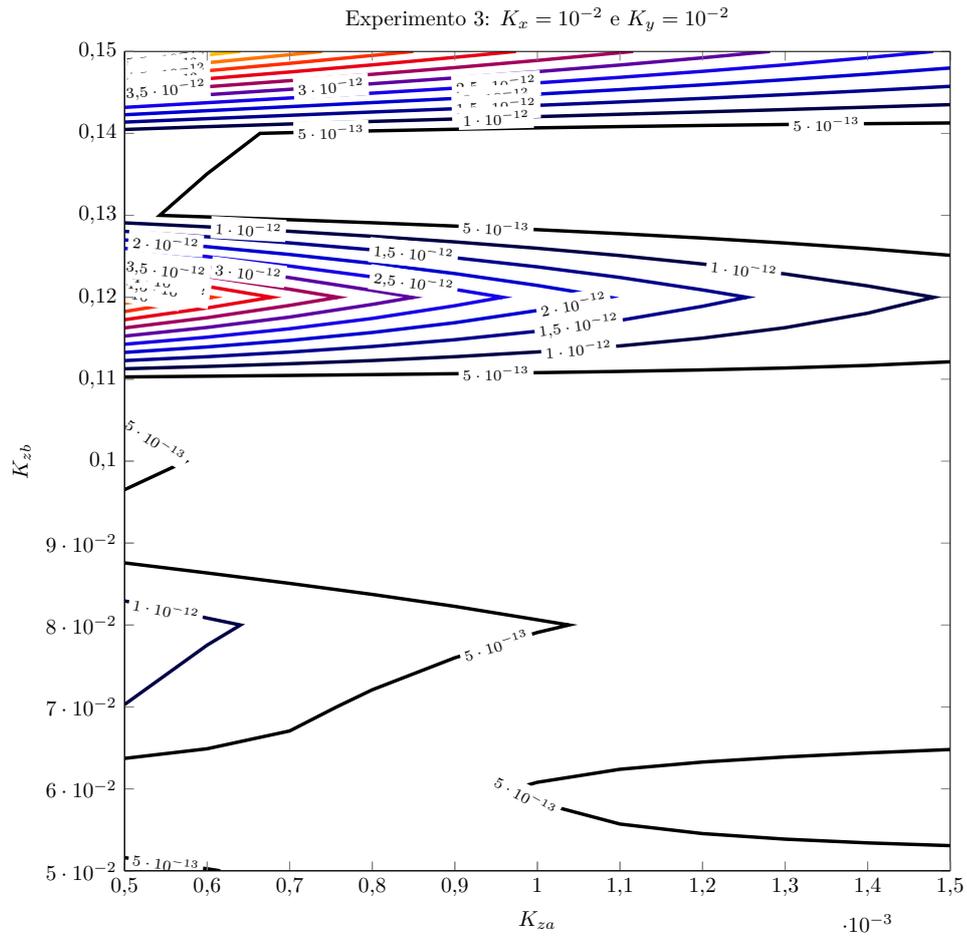


Figura 6.23 – Isolinhas do comportamento K_{za} e K_{zb} vinculado ao mínimo quadrado do experimento 3 de Copenhagen de convecção alta.

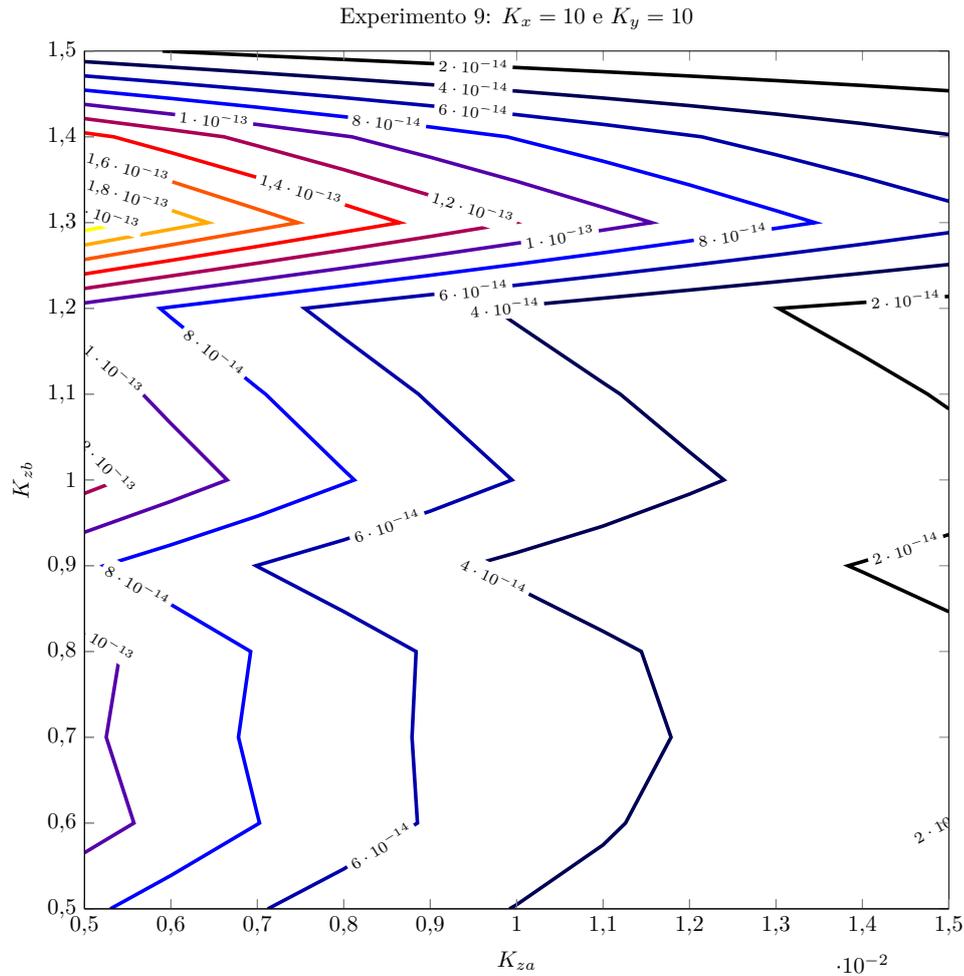


Figura 6.24 – Isolinhas do comportamento K_{za} e K_{zb} vinculado ao mínimo quadrado do experimento 9 de Copenhagen de convecção moderada.

6.2.4 Experimento de Copenhagen aplicado ao Perfil Trigonométrico CLC

Ao encontrar o padrão com perfil simétrico estendeu-se a análise aplicando outro perfil. Então a mesma técnica foi aplicada ao perfil da Equação 4.133 que possui característica de perfil camada limite convectiva. O modelo com fase melhorou 8 dos 9 experimentos. O padrão encontrado que relaciona a estabilidade do experimento à magnitude dos parâmetros apresentado acima no perfil trigonométrico simétrico não teve um bom desempenho. No perfil de camada limite convectiva TRI_{CLC} os padrões só acontecem 3 dos 7 experimentos, veja a Tabela 6.8. Há a necessidade de estudar como a inclusão da fase no modelo afeta o perfil vertical.

Tabela 6.7 – Parâmetros que obtiveram melhor valor de mínimo quadrado para os experimentos de Copenhagem através do modelo sesquilinear. Para o coeficiente vertical dado pela expressão 4.133. Assumindo o modelo sem a fase ($K_{zb} = 0$).

EXP	CLASSIF.	K_x	K_y	K_{za}	K_{zb}	Valor Mínimo
1	CA	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^2$	$0 \cdot 10^0$	$8,91 \cdot 10^{-13}$
2	CM	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^1$	$0 \cdot 10^0$	$3,62 \cdot 10^{-13}$
3	CA	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$0 \cdot 10^0$	$2,86 \cdot 10^{-12}$
4	CB	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$0 \cdot 10^0$	$1,43 \cdot 10^{-12}$
5	CB	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$0 \cdot 10^0$	$1,82 \cdot 10^{-12}$
6	CB	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$0 \cdot 10^0$	$6,53 \cdot 10^{-13}$
7	CA	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^0$	$0 \cdot 10^0$	$8,12 \cdot 10^{-13}$
8	CA	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$0 \cdot 10^0$	$8,61 \cdot 10^{-13}$
9	CM	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$0 \cdot 10^0$	$1,03 \cdot 10^{-13}$

Tabela 6.8 – Parâmetros que obtiveram melhor valor de mínimo quadrado para os experimentos de Copenhagem através do modelo sesquilinear. Para o coeficiente vertical dado pela expressão 4.133 com a presença da fase ($K_{zb} \neq 0$).

EXP	CLASSIF.	K_x	K_y	K_{za}	K_{zb}	P	Valor Mínimo
1	CA	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^2$	$0 \cdot 10^0$	NR	$8,91 \cdot 10^{-13}$
2	CM	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^{-1}$	IND	$2,88 \cdot 10^{-14}$
3	CA	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	R	$1,28 \cdot 10^{-12}$
4	CB	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^2$	NR	$5,55 \cdot 10^{-15}$
5	CB	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	R	$2,87 \cdot 10^{-13}$
6	CB	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-2}$	R	$7,56 \cdot 10^{-14}$
7	CA	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^0$	$1 \cdot 10^{-4}$	NR	$2,30 \cdot 10^{-13}$
8	CA	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-1}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-6}$	NR	$4,01 \cdot 10^{-14}$
9	CM	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^2$	$1 \cdot 10^1$	$1 \cdot 10^{-2}$	IND	$3,54 \cdot 10^{-14}$

6.3 Gradiente de Concentração da Termoelétrica Linhares S.A Simulado em Diferentes Condições de Fonte

Para modelar cenários reais é imposta a necessidade de incluir alterações no modelo que façam ele responder às mudanças de variáveis durante a simulação, ou seja, no decorrer do tempo. Portanto, o modelo agora vai descrever uma fonte contínua por sequência de *puffs* de forma que a concentração final é dada pela integral temporal de cada *puff* de

acordo com a Equação 4.102 e a contribuição dos últimos *puffs* são mais importante que dos primeiros. Para simular a mudança de direção no vento foi acoplada mudanças de coordenadas que orienta o sistema toda vez que há mudança na direção do vento.

A simulação para o cenário da Termoelétrica de Linhares teve como objetivo construir o gradiente de concentração da usina no entorno de 225 km² no período de 90h durante os dias (01/04/2011 00:00 até 04/04/2011 17:00) para no final observar o gráfico de concentração média do período. As informações de dados micrometeorológicos foram as mesmas utilizadas na dissertação de Schramm, 2016. Para calcular o modelo meteorológico o software CALMET [Scire et al., 2000] foi usado. O CALMET subdivide o espaço de simulação em uma grade e para cada bloco são calculadas as variáveis micrometeorológicas. Para simplificar o problema e diminuir o custo computacional calculou-se a média das variáveis velocidade do vento u (m/s), direção do vento DV ($^\circ$) e altura da CLP z_i (m) para cada hora de simulação. Essa simplificação alterou os valores das médias calculadas sobre todo o intervalo 90h.

A seguir é apresentado o comportamento da velocidade do vento para o período de 90 h onde a velocidade média é de 3,4 (m/s), veja a Figura 6.25,

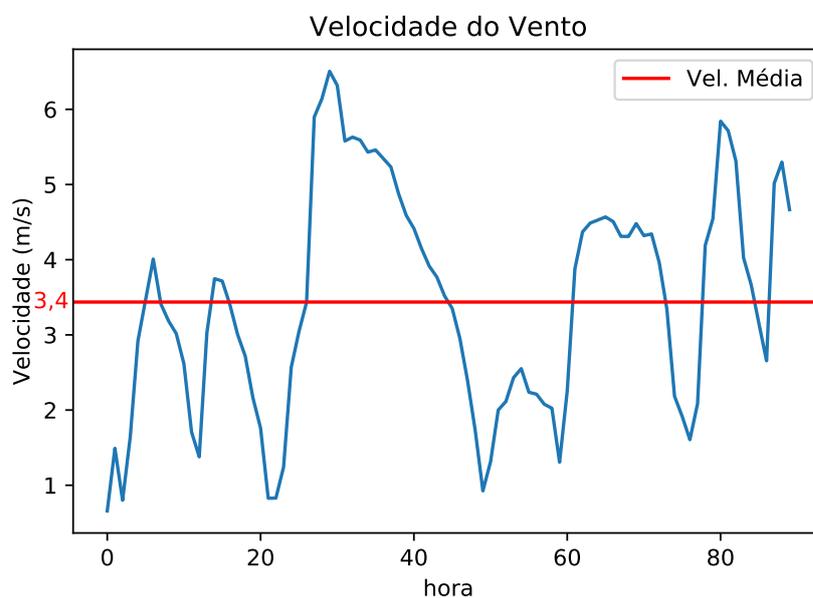


Figura 6.25 – Variação da velocidade u (m/s) nas 90h de simulação.

a variação da altura z_i (m) é apresentada na Figura 6.26:

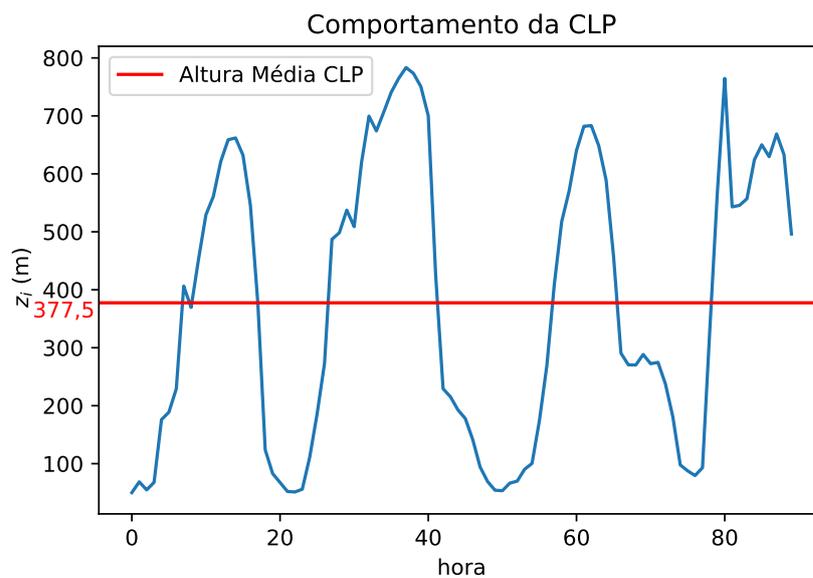


Figura 6.26 – Variação da altura z_i (m/s) nas 90h de simulação.

A DV é dada em graus indica a direção de onde o vento vem. O 0° encontra-se na direção norte. O aumento do ângulo é dado no sentido horário para valores positivos e anti-horário negativos. A rosa dos ventos Figura 6.27 que descreve a distribuição das velocidades no período de 90h mostra que há uma direção entre o oeste e o noroeste, ou seja 270 à 315 graus positivo ou -45 à -90 graus negativos, em que a incidência do vento é acima de 15% do tempo e a intensidade do vento está entre 4 à 5 (m/s).

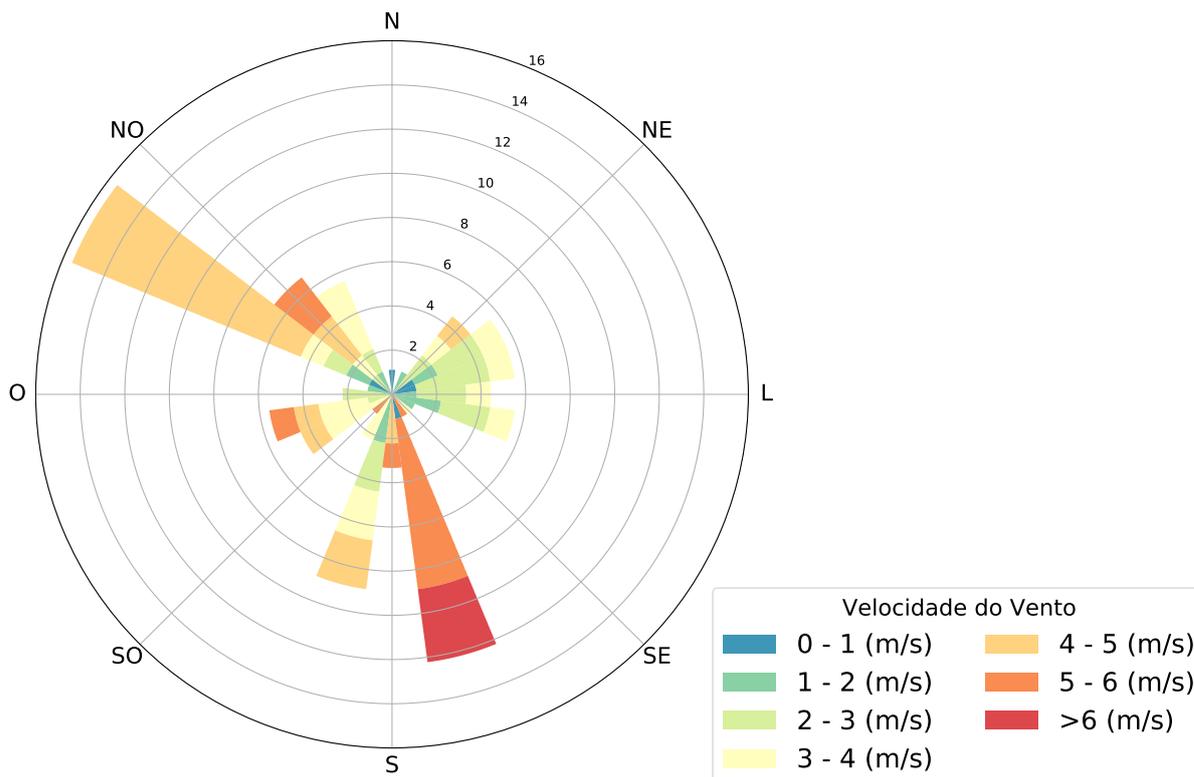


Figura 6.27 – Distribuição das velocidades para o período de 90h de simulação do cenário de Linhares Geração S. A.

De posse dessas informações o modelo com a fonte delta foi simulado para 90h na região de 225 km^2 mostrada na Figura 5.4a. Como resultado observe as três primeiras horas do dia 1 na Figura 6.28. O período é noturno onde os ventos são baixos, com velocidade menor que $1,5 \text{ m/s}$. Identifica-se exatamente onde estão as fontes do problema, pois há um rastro com maior quantidade de poluente na direção do vento, esta pode ser observada pela flecha azul que encontra-se dentro da rosa dos ventos apontando a direção do vento. Devido ao valor da velocidade a presença do poluente da primeira hora é perceptível na hora seguinte como visto na Figura 6.28b. Na terceira hora de simulação há poluente tanto da primeira quanto da segunda hora mostrado na Figura 6.28c. Entretanto há uma característica nos gráficos que é artifício da má convergência dos autovalores A_{nl} da condição de fonte delta. Para que funções trigonométricas representem uma delta há necessidade de infinitos autovalores. O modelo usa para a simulação um conjunto de 10 mil n l 's e ainda impondo a exigência que sejam no mínimo maiores que $\left| \cos\left(\frac{n\pi}{L_y}\right) \cos\left(\frac{l\pi}{L_z}\right) \right| > 0,8$. Como pode ser visto nos resultados das simulações o modelo ainda recebe valores espúrios que acabam inserido comportamento fictícios ao gradiente

de concentração.

No caso da distribuição de concentração para valores de velocidade maiores, ou seja, regimes de camada limite convectiva, chega a ser complicado de identificar o que é comportamento do modelo e o que são apenas artifícios causados pela dificuldade de convergência do modelo com condição de fonte delta Figura 6.29. Outra forma de ver que o modelo com fonte delta tem dificuldades de descrever o comportamento da pluma é analisar a média de concentração do poluente nas 90 h, o resultado não se assemelha em nenhum aspectos com resultados obtidos na dissertação da Schramm, 2016, veja a Figura 6.30, pois não há uma direção que seja mais afetada pelo poluente e sim ocorre uns pontos de concentração.

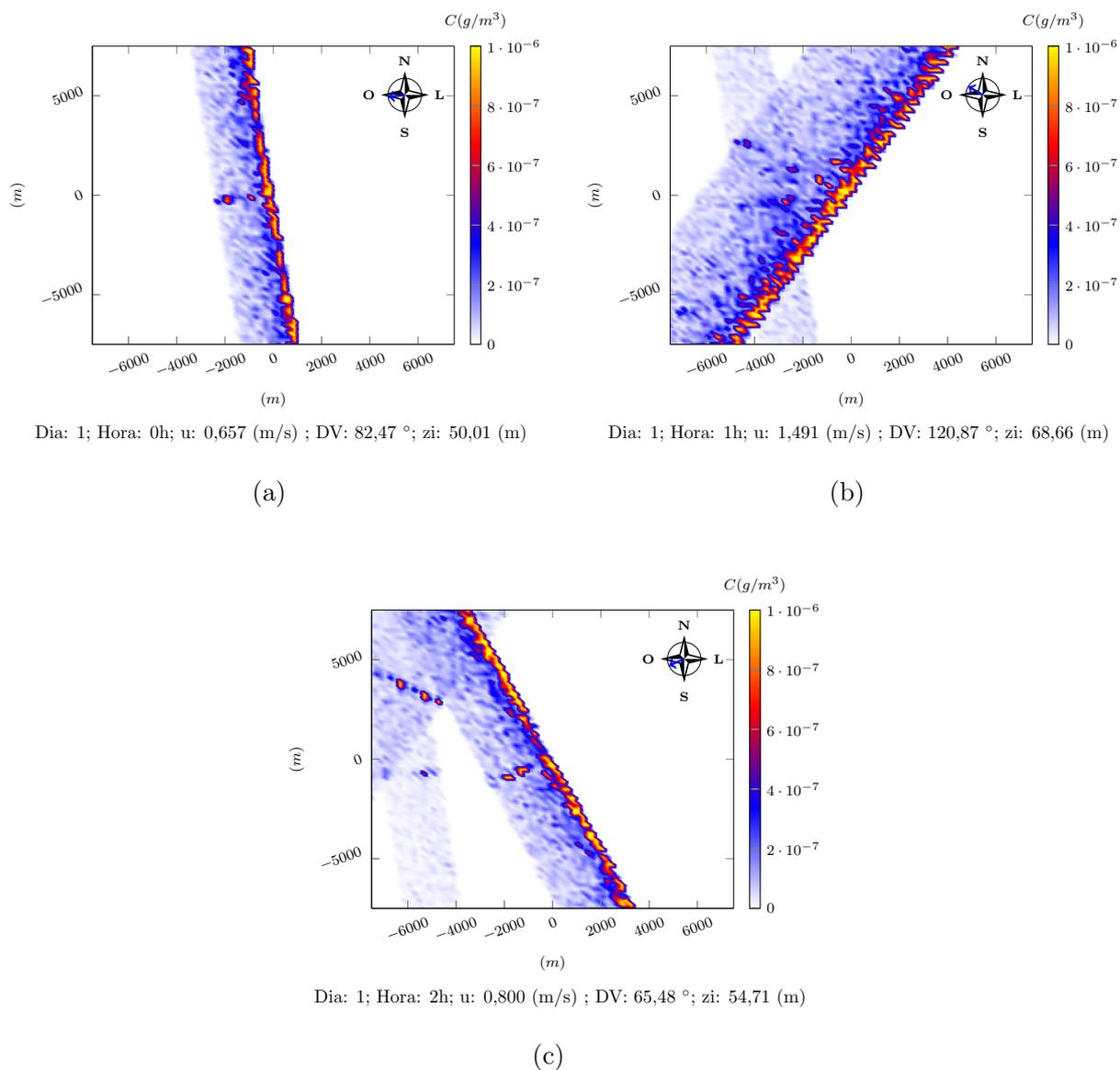


Figura 6.28 – Gráficos das três primeiras horas de simulação do poluente SO_2 para fonte delta onde há regime de CLE.

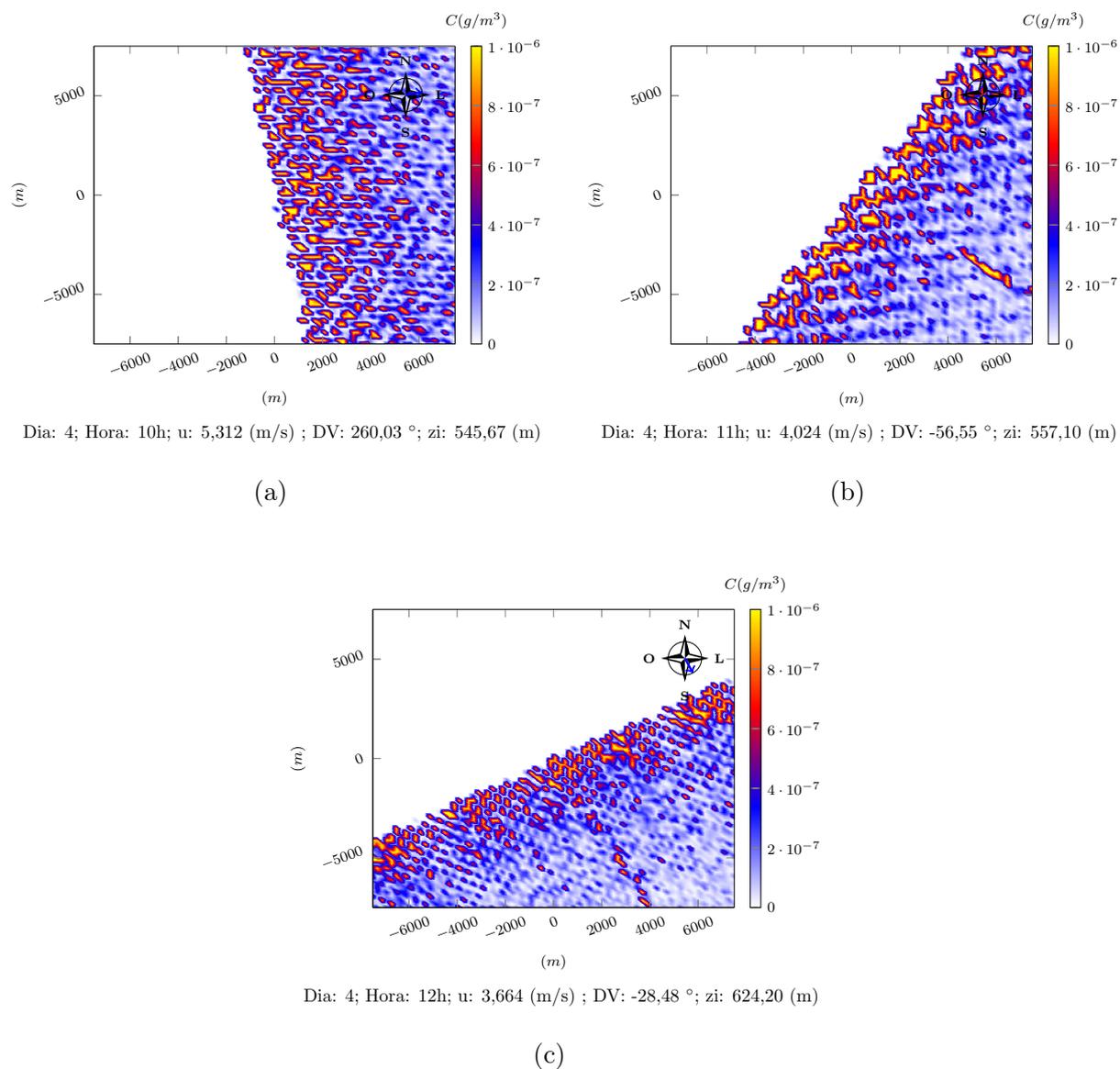


Figura 6.29 – Gráficos de três horas consecutivas de simulação SO_2 onde condição camada limite convectiva para fonte delta.

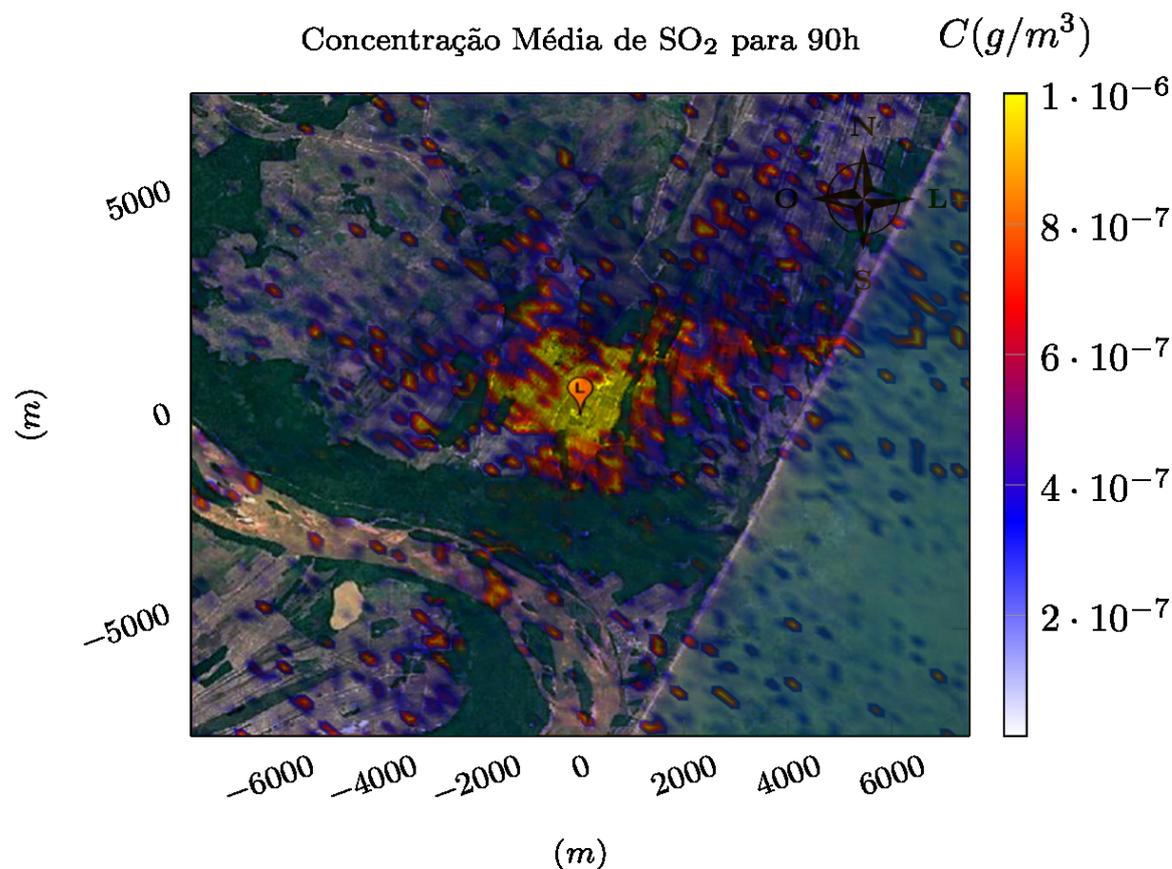


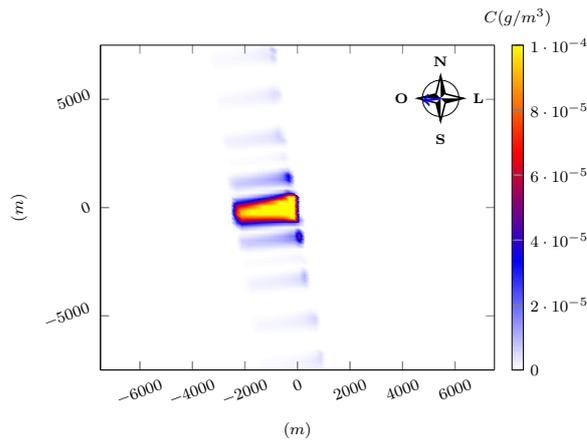
Figura 6.30 – Média da concentração de poluente SO₂ para as 90h de simulação com fonte delta.

Devido essa característica, para simular cenários reais era preciso encontrar algum modo de substituir a condição de fonte onde a convergência não fosse um problema. Resolvendo esse problema seria possível detectar as características de estruturas coerentes incluídos no modelo pela fase, minimizando a presença de ruídos. Para isso foi proposta a condição de fonte gaussiana na Equação 4.5.2. Como se trata de uma equação linear foi implementada a ideia de superposição de fontes. A fonte gaussiana é calculada pela soma de deltas de maneira similar ao método de funções de Green [Butkov, 1968]. Agora basta observar a expressão do A_{nl} na Equação 4.127 da fonte gaussiana e ver que a medida que os números n e l aumentam, a contribuição do fator diminui, fato que não ocorre na expressão do A_{nl} da fonte delta dada pela Equação 4.122.

A fonte gaussiana substituiu a condição da delta e assim simulou-se novamente as 90h para o conjunto de dados da Termoelétrica. Foram usados apenas os 100 primeiros autovalores n l 's, com $\sigma = 1$ que controla o alargamento da distribuição. Com a fonte

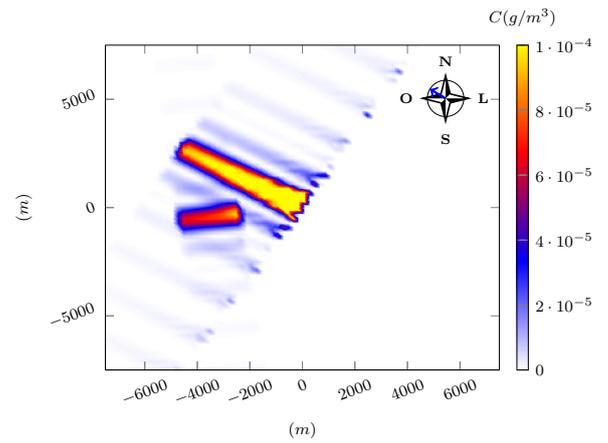
gaussiana os resultados possuem poucos artifícios e uma melhora na descrição física do fenômeno de dispersão de poluentes. Observe o conjunto de Figuras 6.31 que continua a ter característica de memória das horas anteriores devido a baixa velocidade do vento. As fontes possuem uma definição clara do campo de poluição. A pluma parece estar se dispersando de forma uniforme retratando o regime camada limite estável.

Já na Figura 6.32 o regime de estabilidade é a camada limite convectiva que possui ventos com intensidades elevadas assim como altura da camada limite ocorrendo criação de turbilhões que agitam a atmosfera. A simulação nesse regime possui várias formações turbulentas que não aparecem nos regimes estáveis. O que é interessante, pois nesta simulação não há troca de perfis verticais ao simular regimes de estabilidade diferentes. Apenas o perfil trigonométrico é aplicado à ambos regimes e à ambas condições de fontes.



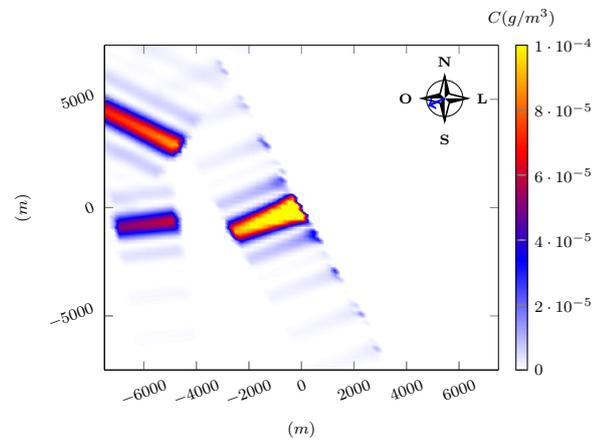
Dia: 1; Hora: 0h; u : 0,657 (m/s); DV : 82,47 °; z_i : 50,01 (m)

(a)



Dia: 1; Hora: 1h; u : 1,491 (m/s); DV : 120,87 °; z_i : 68,66 (m)

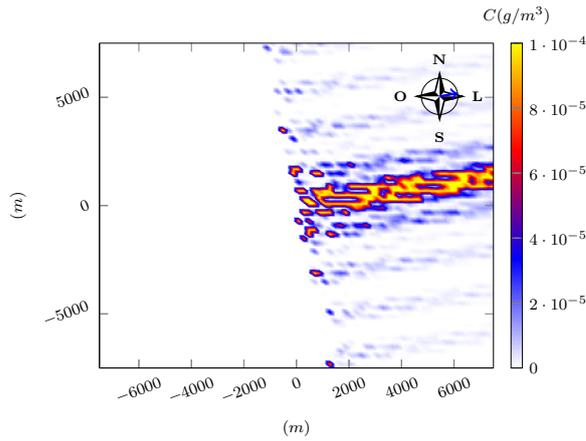
(b)



Dia: 1; Hora: 2h; u : 0,800 (m/s); DV : 65,48 °; z_i : 54,71 (m)

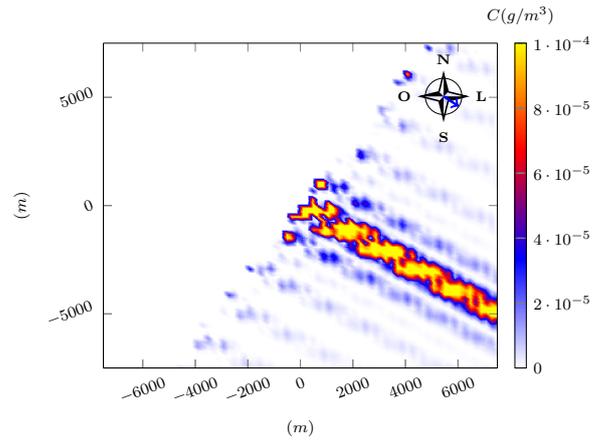
(c)

Figura 6.31 – Gráficos das três primeiras horas de simulação do poluente SO_2 .



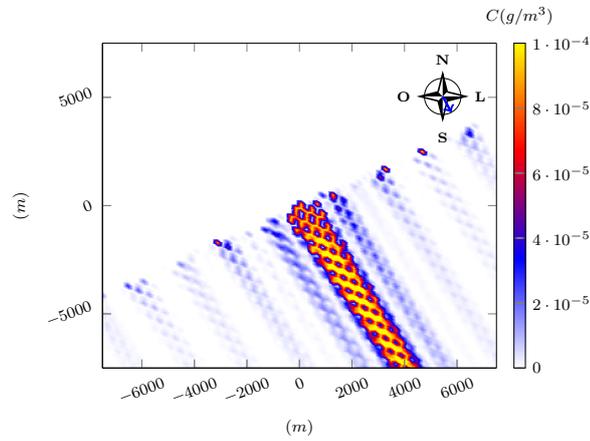
Dia: 4; Hora: 10h; u: 5,312 (m/s); DV: 260,03 °; zi: 545,67 (m)

(a)



Dia: 4; Hora: 11h; u: 4,024 (m/s); DV: -56,55 °; zi: 557,10 (m)

(b)



Dia: 4; Hora: 12h; u: 3,664 (m/s); DV: -28,48 °; zi: 624,20 (m)

(c)

Figura 6.32 – Gráficos de três horas consecutivas de simulação SO_2 onde condição camada limite convectiva.

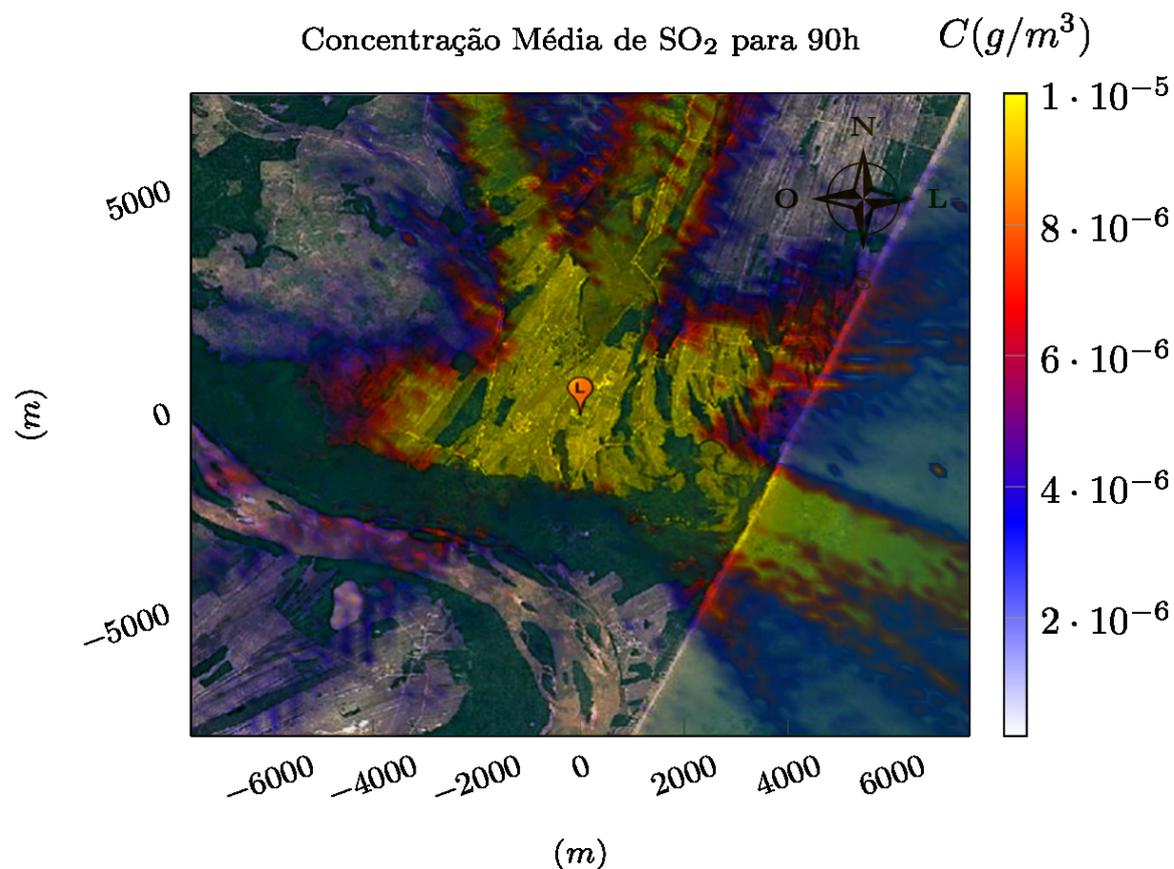


Figura 6.33 – Média da concentração de poluente SO_2 para as 90h de simulação.

6.4 Simulações da Indústria Celulose Riograndense CMPC

O modelo irá simular a dispersão de poluentes da Celulose Riograndense. Uma região 36 km^2 centrada na indústria pode ser observados na Figura 5.8 assim como a posição de suas fontes. O objetivo é analisar o desempenho do modelo em dois regimes de estabilidade. Análises de parâmetros são feitas para estudar o modelo frente introdução da fase e a existência de alguma mecânica que envolva as variáveis micrometeorológicas. Os dados simulados são referentes aos períodos onde os ventos se encontram no quadrantes Leste à Sul, ou seja, as direções estão restritas aos ângulos de 90° à 180° , observando sempre que na meteorologia 0° encontra-se ao norte. A restrição na direção do vento é para garantir que a quantidade de poluente encontrado na simulação seja compatível ao que chega à estação medição de concentração da Celulose Riograndense CMPC proveniente da indústria. Estudos feitos, pela CMPC, para a instalação da estação de medição apontaram o quadrante Oeste - Norte com a região de direção preferencial do vento.

Pela inviabilidade de somar infinitas autofunções dadas pela Equação 4.128 do modelo é determinado um número suficiente de autovalores para obter uma convergência e ainda ser computacionalmente viável. Para encontrar esse valor simulou-se uma região de $8 m^3$ com apenas uma fonte com intensidade $0,2194 (g/s)$. A configuração se assemelha com que foi apresentada na Figura 6.2. Aqui, os limites aplicados são $x = [0, 2]$, $y = [-1, 1]$ e $z = [119, 121]$ dados em metros onde a altura da fonte $H_s = 120m$. A direção do vento fixada à 270° . Essa configuração foi simulada para 1 segundo com 1 milhão de pontos na região. Na Figura 6.34 é observado o comportamento de decaimento da taxa emissão normalizada conforme aumenta-se o valor de autovalores. A diferença diminui, entre a taxa de emissão da fonte normalizada pela constante adimensional se consideradas as taxas anteriores que somam menos autovalores. Para 10 mil autovalores passam a apresentar inconsistências aritméticas então 1024 autovalores é o número suficiente para alcançar um bom resultado como também um desempenho computacional satisfatório.

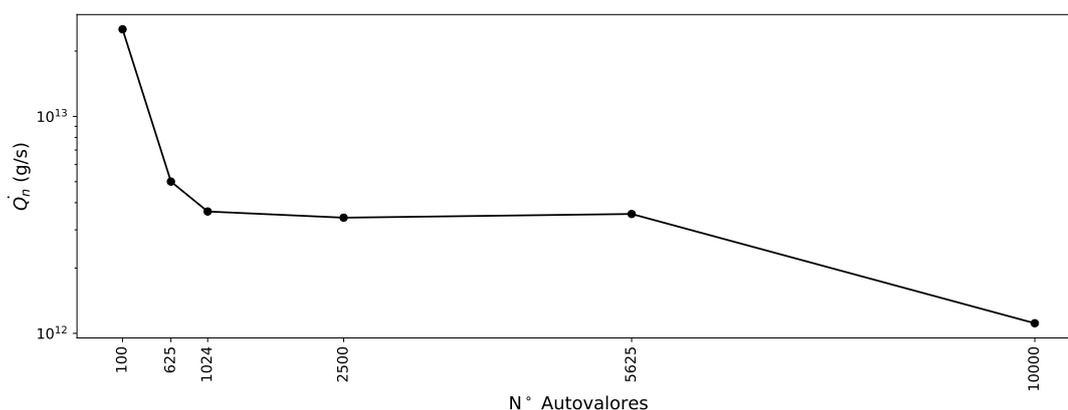


Figura 6.34 – Taxa de emissão da fonte normalizada vinculada ao aumento do número de autovalores.

Para determinar os coeficientes de difusão constantes K_x e K_y e obter concentração compatíveis aos valores observados, dois conjuntos de 20 medições foram selecionados. Uma condição foi imposta para a escolha das medições que iriam formar cada um dos conjunto é que a direção de vento de cada medida experimental estivesse numa faixa de 5° centrado na estação de medição da CMPC como apresentado na Figura 6.35. Dentro dessa condição foram escolhidas as 20 medidas de cada regime aleatoriamente os dados das medidas usadas estão nas Tabelas B.1 e B.2. Nos conjuntos foi aplicado os perfis polinomiais, para CLC dado pela Equação 4.137 e para CLE dado pela Equação 4.135. Os

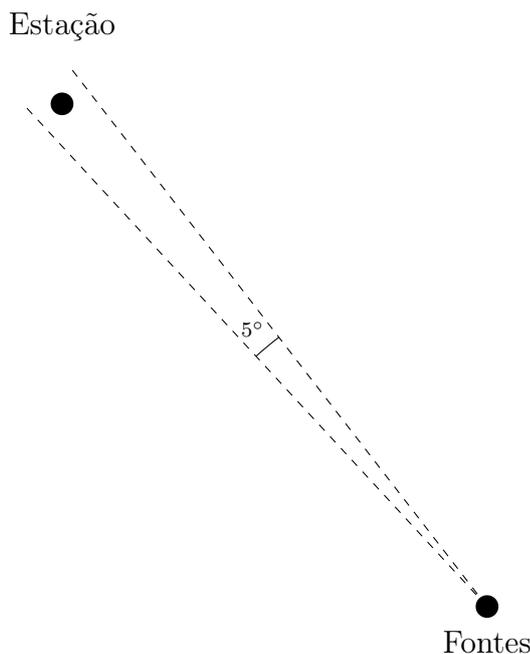


Figura 6.35 – Representação espacial do esquema da condição imposta à direção do vento para a escolha das 20 medições de CLE e CLC.

parâmetros constantes K_x , K_y , vão ser denominados K_{xc} , K_{yc} para CLC e K_{xe} , K_{ye} para CLE. Para uma primeira aproximação impõem-se $K_{xc} = K_{yc}$ e $K_{xe} = K_{ye}$. Simulou-se o modelo e foram determinados os parâmetros através do menor valor do índice estatístico NMSE dado pela Equação 5.5 encontrado para cada conjunto de 20 medidas. Esse índice aponta que as concentrações poluentes que estavam sendo lançado diretamente sobre a estação em regimes de CLC e CLE e as concentrações previstas possuíam valores compatíveis aos medidos na estação. Os valores foram fixados em $K_{xc} = 1000 (m^2/s)$ e $K_{yc} = 1000 (m^2/s)$ para CLC, já para CLE $K_{xe} = 750 (m^2/s)$ e $K_{ye} = 750 (m^2/s)$. Onde os valores aplicados foram 10^4 , 2500, 10^3 , 750, 500, 250 e 10^2 .

Para determinar os parâmetros referentes ao coeficiente de difusão vertical, tanto para CLE, K_{zae} e K_{zbe} quanto para CLC, K_{zac} e K_{zbc} um conjunto medições de 34 horas contínuas foram simuladas. Houve uma variação de parâmetros no coeficiente vertical de 0 até 10^3 que geraram um conjunto de 90 simulações, veja os valores na Figura 6.36. Foram avaliadas as características estatísticas do modelo para cada regime separadamente. Neste conjunto há 11 horas onde o regime se encontra em CLC e 23 horas de regime de CLE. Informações adicionais sobre a micrometeorologia do conjunto de 34 horas contínuas usada

no modelo já foram apresentadas na Seção 5.3.2 e uma tabela completa será colocada no Apêndice B. Usando os resultados estatísticos de cada uma das 90 simulações foram criados dois mapas de calor, Figura 6.36, que apontam qual conjunto de parâmetros obteve a melhor relação $\frac{COR}{NMSE}$, ou seja, quanto maior o valor desta relação melhor os parâmetros descrevem os experimentos de CLC e CLE. Para este conjunto de 34h os valores se mantiveram iguais para os parâmetros CLE $K_{zae} = 100$ e $K_{zbe} = 50$ para CLC $K_{zac} = 100$ e $K_{zbc} = 50$.

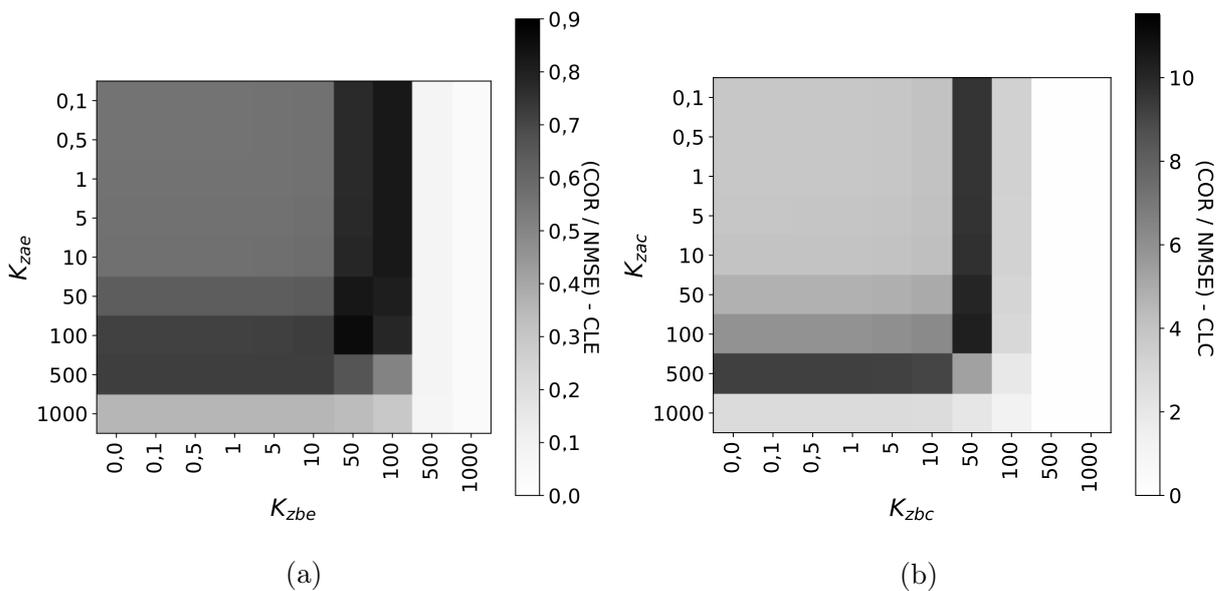


Figura 6.36 – Mapas de calor de $\frac{COR}{NMSE}$ em regime CLE e CLC. Mostra quais regiões possuem bons parâmetros do coeficiente vertical em ambos regimes.

De posse desses valores, os parâmetros dos coeficientes foram aplicados em 2 outros de horas contínuas. Agora serão denominados de Caso I - 34h, Caso II - 43h e Caso III - 29h. Avaliou-se os resultados com e sem a presença da fase para os três casos. Acompanhe os resultados nas Tabelas 6.9 e 6.10.

Tabela 6.9 – Índices estatísticos para os casos I, II e III sem a inclusão da fase.

CASO	REG.	Hs	COR	FS	NMSE	$\frac{COR}{NMSE}$	K_{za}	K_{zb}	$\overline{C_o}$ ($\mu g/m^3$)	$\overline{C_p}$ ($\mu g/m^3$)
I	CLC e CLE	34	0,595	-1,115	0,489	1,216	100	0	1,174	1,391
I	CLC	11	0,864	-0,804	0,146	5,925	100	0	1,300	1,603
I	CLE	23	0,517	-1,241	0,720	0,717	100	0	1,113	1,289
II	CLC e CLE	43	0,675	-1,854	1,921	0,351	100	0	1,474	2,412
II	CLC	22	0,648	-1,860	2,442	0,265	100	0	1,491	2,968
II	CLE	21	0,708	-1,833	1,000	0,708	100	0	1,456	1,830
III	CLC e CLE	29	0,799	-1,686	3,510	0,227	100	0	0,327	0,228
III	CLC	13	0,668	-1,243	1,890	0,353	100	0	0,319	0,098
III	CLE	16	0,832	-1,703	3,835	0,217	100	0	0,333	0,334

Tabela 6.10 – Índices estatísticos para os casos I, II e III com a inclusão da fase.

CASO	REG.	Hs	COR	FS	NMSE	$\frac{COR}{NMSE}$	K_{za}	K_{zb}	$\overline{C_o}$ ($\mu g/m^3$)	$\overline{C_p}$ ($\mu g/m^3$)
I	CLC e CLE	34	0,601	-0,985	0,403	1,489	100	50	1,174	1,074
I	CLC	11	0,878	-0,663	0,086	10,251	100	50	1,300	1,212
I	CLE	23	0,529	-1,125	0,612	0,864	100	50	1,113	1,008
II	CLC e CLE	43	0,650	-1,820	1,449	0,449	100	50	1,474	1,818
II	CLC	22	0,625	-1,829	1,869	0,335	100	50	1,491	2,263
II	CLE	21	0,687	-1,776	0,683	1,006	100	50	1,456	1,352
III	CLC e CLE	29	0,792	-1,610	3,190	0,248	100	50	0,327	0,168
III	CLC	13	0,653	-0,833	3,404	0,192	100	50	0,319	0,063
III	CLE	16	0,833	-1,632	3,106	0,268	100	50	0,333	0,254

No caso I, foi estudado o comportamento através do mapa de calor na Figura 6.36 e assim foi selecionado os parâmetros que obtivessem o melhor desempenho. Então ele é comparado sem e com a inclusão da fase. Observando as tabelas indicadas acima, o caso I, obtém melhores índices estatísticos nas três condições analisadas:

- Todos os experimentos CLC e CLE;
- Apenas experimentos de CLC;
- Apenas experimentos de CLE;

quando há a presença da fase.

No caso II, o índice estatístico COR é menor com a inclusão da fase. Mas observando todos os outros índices eles apresentam valores melhores com a inclusão da fase. Devido à existência de flutuações na concentração o modelo tem efeitos onde o COR menor não necessariamente é uma má representação do experimento. E uma análise sobre os outros índices se faz necessária. Como pode ser observado todos os índices melhoram inclusive o valor de concentração média prevista \overline{C}_p se aproxima mais da concentração média observada \overline{C}_o , apesar de ainda não ser um valor ideal apontando a existência de parâmetros mais adequados. Os coeficientes são altamente conectados com as variáveis meteorológicas, assim aplicando um generalização de igualá-los é incluído um viés.

Para o caso III o modelo sem a fase modelou bem o regime de CLC, segundo os índices estatísticos. Agora o valor \overline{C}_p e \overline{C}_o não estão tão próximos. Já a CLE teve um desempenho levemente melhor com a fase, mas \overline{C}_p pior. Este resultado mostra necessidade de conectar a parametrização à componentes micrometeorológicas, na Tabela 6.11 é possível avaliar a média das variáveis micrometeorológicas para cada período analisado. Percebe-se que as velocidades do vento, velocidade de fricção, altura da camada limite e também o comprimento de Monin-Obukhov são menores no Caso III o que talvez seja os fatores responsáveis pelo desempenho menor ao incluir a fase.

Tabela 6.11 – Média das Variáveis Meteorológicas para os Casos I, II e III.

CASO	REG.	u (m/s)	DV°	z_i (m)	L (m)
I	CLC e CLE	3,700	140,679	1287,059	242,635
I	CLC	4,055	142,345	1560,091	-331,864
I	CLE	3,530	139,883	1156,478	517,396
II	CLC e CLE	3,995	123,660	1490,000	156,460
II	CLC	3,973	124,141	1584,500	-321,714
II	CLE	4,019	123,157	1391,000	657,405
III	CLC e CLE	3,100	110,645	989,724	16,959
III	CLC	3,554	105,892	1310,923	-290,162
III	CLE	2,731	114,506	728,750	266,494

¹ DV - Indica a direção de onde o vento vem em graus. O 0° encontra-se na direção norte e o aumento do ângulo é dado no sentido horário.

O parâmetro do perfil vertical dos modelos de advecção-difusão deve possuir configurações diferentes para cada medida analisada dentro de cada um dos casos. E quando

todas as medições são aproximadas por um único valor informações são perdidas. Os parâmetros devem mudar para cada medição.

Para avaliar a existência de alguma dependência temporal o conjunto de 34h, caso I, que foi simulado 90 vezes com K_z 's diferentes, foi reorganizado. Cada hora medida possui 90 possíveis conjuntos de valores para os coeficientes de difusão vertical. E dentre essas 90 possibilidades foi selecionada a que obteve a menor diferença absoluta entre concentração observada e prevista em cada uma das 34h. Assim criou-se um conjunto de K_z 's que variam no tempo. Simulou-se as 34h com K_z 's. Os índices estatísticos foram calculados, na Tabela 6.12 apresentando um desempenho melhor além de que o índice usado para escolher o melhor parâmetro dentro do conjunto avaliado, $\frac{COR}{NMSE}$, teve um aumento de 1,489 para 86,25 observe as Tabelas 6.10 e 6.12.

Tabela 6.12 – Índices estatísticos para o caso I com o coeficiente de difusão vertical variando no tempo.

CASO	REG.	Hs	COR	FS	NMSE	$\frac{COR}{NMSE}$	$\overline{C_o}$ ($\mu g/m^3$)	$\overline{C_p}$ ($\mu g/m^3$)
I	CLC e CLE	34	0,6946	-0,3355	0,0889	86,25	1,174	1,021
I	CLC	11	0,8912	-0,1542	0,0167	53,61	1,300	1,249
I	CLE	23	0,5465	-0,3724	0,1423	3,85	1,113	0,912

Observe que 13 de 23 medições em CLE tiveram o termo de fase igual a zero o que leva ao mesmo comportamento observado no experimento de Copenhagen onde regimes com menor movimentos turbulentos possuem K_{zb} menor K_{za} . Na CLC há três episódios, mas dois ocorrem próximo a zona de transição de regime. Na Tabela 6.13 é apresentado os valores meteorológicos usados no modelo assim como os K_z 's que foram aplicados e juntamente com os valores de concentração observadas e previstas das 34h contínuas.

Tabela 6.13 – Dados micrometeorológicos, parâmetros dos coeficientes verticais K_z variáveis no tempo onde seu perfil depende do regime e a concentração observada e a prevista pelo modelo do caso I.

HORA	REG.	z_i (m)	L (m)	u (m/s)	DV° ¹	K_{za}	K_{zb}	C_o ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	C_p ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
20	CLE	1932	916,8	5,1	168,6	0,1	0,0	0,85	0,58
21	CLE	1409	578,0	4,1	132,6	0,1	100,0	0,90	0,85
22	CLE	899	311,1	3,1	126,2	50,0	5,0	0,84	0,84
23	CLE	1363	579,7	4,1	133,7	100,0	100,0	0,84	0,84
24	CLE	712	204,9	2,6	124,7	0,1	0,0	0,84	0,80
1	CLE	628	204,9	2,6	124,0	0,1	0,0	0,80	0,76
2	CLE	857	311,5	3,1	140,3	100,0	50,0	0,93	0,95
3	CLE	1102	436,7	3,6	140,4	0,1	100,0	1,06	0,86
4	CLE	1362	579,2	4,1	139,2	50,0	100,0	1,06	1,07
5	CLE	1115	435,8	3,6	137,3	100,0	50,0	1,03	1,19
6	CLE	661	204,6	2,6	120,2	0,1	0,0	0,94	0,56
7	CLE	627	204,6	2,6	120,6	0,1	0,0	0,92	0,58
8	CLC	770	-371,5	2,6	126,7	0,1	0,0	0,90	0,69
9	CLC	840	-123,2	2,6	136,1	5,0	10,0	0,93	0,93
10	CLC	1089	-127,5	3,1	135,2	100,0	10,0	0,89	0,98
11	CLC	1339	-150,0	3,6	140,1	10,0	50,0	1,05	1,05
12	CLC	1851	-252,4	4,6	146,6	100,0	50,0	1,56	1,55
13	CLC	2127	-320,0	5,1	145,6	500,0	0,0	1,73	1,67
14	CLC	2131	-329,7	5,1	144,7	500,0	10,0	1,64	1,67
15	CLC	2120	-367,1	5,1	143,1	500,0	50,0	1,45	1,46
16	CLC	1839	-344,3	4,6	140,5	100,0	50,0	1,46	1,53
17	CLC	1789	-520,5	4,6	143,8	500,0	10,0	1,39	1,39
18	CLC	1266	-744,3	3,6	163,4	0,1	0,0	1,30	0,81
19	CLE	1928	927,4	5,1	177,7	0,1	0,0	1,11	0,07
20	CLE	2619	1697,4	6,2	154,6	1000,0	0,0	1,18	1,08
21	CLE	2631	1697,4	6,2	146,2	1000,0	0,0	1,66	1,59
22	CLE	1998	918,2	5,1	141,3	500,0	50,0	1,48	1,54
23	CLE	1663	737,8	4,6	147,1	0,1	100,0	1,49	1,46
24	CLE	1380	577,5	4,1	146,7	100,0	50,0	1,43	1,66
1	CLE	604	115,6	2,1	128,9	0,1	0,0	1,63	0,83
2	CLE	254	14,2	1,0	158,4	0,1	0,0	1,20	0,38
3	CLE	116	21,2	1,5	138,2	0,1	0,0	1,32	0,73
4	CLE	113	21,2	1,5	142,8	0,1	0,0	1,09	0,76
5	CLE	626	204,4	2,6	127,6	0,1	0,0	1,01	0,97

¹ DV - Indica a direção de onde o vento vem em graus. O 0° encontra-se na direção norte e o aumento do ângulo é dado no sentido horário.

Os parâmetros do coeficiente vertical foram avaliados através da relação de significância deles com as variáveis meteorológicas. A Tabela 6.14 mostra o valores obtidos para todo o conjunto de 34h. Para a parte real do coeficiente vertical o comportamento já era conhecido, onde há correlação com altura da camada limite, as velocidades do vento e de

fricção. Tanto que essas variáveis são acopladas às parametrizações da turbulência aplicadas à outros modelos. A parte imaginária não possui relação significativa na modalidade que avalia o conjunto sem distinguir o regime de estabilidade.

Tabela 6.14 – Relação de significância dos parâmetros do coeficiente vertical variável no tempo, K_{za} e K_{zb} , com as variáveis meteorológicas do caso I.

VARIÁVEIS	K_{za}	K_{zb}
K_{za}	1,000	-0,138
z_i (m)	0,740	0,197
u (m/s)	0,700	0,260
u_* (m/s)	0,670	0,258
L (m)	0,382	0,160
DV°	0,217	-0,039
Temperatura (K)	0,194	0,162
Taxa de Humid.(%)	0,166	-0,335
G (W/m^2)	0,153	-0,087
Pressão (hPa)	-0,046	0,154

Agora quando é estudado separadamente cada regime de estabilidade, Tabelas 6.15 e 6.16, as variáveis que tiveram boa correlação na modalidade anterior permanecem, mas na CLE comprimento de Monin-Obukov passa apresentar uma significância alta, comportamento não observado na CLC, mas pode ser apenas um reflexo. O fluxo de calor, tanto K_{za} e K_{zb} , tem uma relação significativa, positiva em CLC e negativa CLE destacando a mudança de regime.

Tabela 6.15 – A relação de significância dos parâmetros do coeficiente vertical variável no tempo, K_{za} e K_{zb} no regime CLC, com as variáveis meteorológicas do caso I.

VARIÁVEIS	K_{za}	K_{zb}
K_{za}	1,000	-0,075
z_i (m)	0,803	0,353
u (m/s)	0,802	0,339
u_* (m/s)	0,797	0,366
G (W/m^2)	0,507	0,509
Temperatura (K)	0,406	0,448
DV°	0,160	-0,024
Taxa de Humid.(%)	-0,025	-0,250
L (m)	-0,176	0,312
Pressão (hPa)	-0,497	-0,184

Tabela 6.16 – Relação de significância dos parâmetros do coeficiente vertical variável no tempo, K_{za} e K_{zb} no regime CLE, com as variáveis meteorológicas do caso I.

VARIÁVEIS	K_{za}	K_{zb}
K_{za}	1,000	-0,136
L (m)	0,836	0,093
z_i (m)	0,722	0,221
u (m/s)	0,667	0,281
u_* (m/s)	0,641	0,303
Taxa de Humid.(%)	0,274	-0,406
DV°	0,219	-0,030
Pressão (hPa)	0,055	0,265
Temperatura (K)	-0,035	0,417
G (W/m^2)	-0,503	-0,383

Avaliações através da relação de significância é uma forma de procurar indícios de como parametrizar o coeficiente, mas é preciso aplicar em mais conjuntos de dados e observar se padrões irão se repetir. O modelo mesmo sem essa parametrização definida já mostra que é capaz de descrever tanto regime de CLC quanto CLE. Com a parametrização da fase à variáveis micrometeorológica este será um modelo que poderá ser usado para estudar comportamentos turbulentos de forma determinística estocástica.

7 CONCLUSÕES

O presente trabalho é uma abordagem inovadora para a solução do problema de advecção-difusão analítico. Ele propõe a inclusão da fase para simular efeitos oriundos das estruturas coerentes devido à ausência de comportamentos turbulentos na dispersão de poluentes. Tendo como motivação o grande interesse que áreas experimentais e de modelos numéricos para compreender e descrever esses efeitos pela presença de turbulência desenvolvida. Como modelos analíticos tem por característica de construção grande importância, pois abrem a possibilidade de compreensão da essência do fenômeno através das equações que descrevem claramente cada comportamento do modelo. A existência de comportamentos físicos não abordados em modelos analíticos causam lacunas que é nosso dever explorá-las.

Aqui é dado um passo na tentativa de modelos analíticos descreverem características turbulentas. Estudos realizados mostraram que efeitos turbulentos, são dominados por estruturas coerentes e que implicam à presença de uma fase. E a fase é um elemento que não surge em modelos analíticos devido a necessidade de aplicação do fechamento, logo essa característica inibe qualquer possibilidade de que esse comportamento surja espontaneamente. Baseados em estudos uma fase foi introduzida na equação de advecção-difusão para que efeitos compatíveis com a manifestação de turbulência tivessem chance de aparecer na solução. Convenientemente, o termo foi acoplado ao coeficiente de difusão vertical, pois nessa componente estão presentes as variáveis responsáveis pelo surgimento de comportamentos turbulentos na atmosfera, como as termas de calor e a rugosidade. A fase foi introduzida no coeficiente de difusão vertical através de um valor constante complexo. A equação é resolvida analiticamente tendo a solução na forma semi-positiva definida que é uma função distribuição de probabilidade. Desta forma como é resolvida a equação transforma-se o problema determinístico em um problema determinístico com características estocásticas.

O estudo sob a proposta inicia observando duas distribuições submetidas as mesmas condições, mas ao passo que em uma é aplicado o coeficiente real como na Figura 6.3a e na outra o complexo como na Figura 6.3b e desta forma observa-se que as estruturas coerentes surgem no segundo caso tornando a solução com aspectos realísticos ao mostrar características físicas jamais vista em modelos analíticos. Uma análise sobre os parâmetros

foi aplicada para mostrar que além de carregar as estruturas coerentes o modelo mantinha as características de dispersão do poluente vinculadas aos coeficientes na Seção 6.1. Foi demonstrado que o coeficiente que contém a fase contribui para a dispersão vinculado à parte real e à imaginária. Já as estruturas são vinculadas apenas à parte imaginária do coeficiente dispersão K_z na Figura 6.5. Foi avaliado o comportamento ao passo que se distância da fonte na Figura 6.9, ou troca o perfil do coeficiente difusivo ao longo do tempo e da altura z , Figuras 6.13,6.12 e 6.14. O resultado que tornou todo esse estudo sobre o modelo animador foi encontrado quando a característica de meandro foi observada na presença de ventos de baixa velocidade, o que concorda com o fenômeno físico. Muitos modelos buscam esse resultado utilizando várias técnicas que introduzem vários parâmetros, mas o modelo sesquilinear obteve o fenômeno apenas com a inclusão do coeficiente complexo que introduziu a fase no modelo. E o fenômeno desaparece para velocidades altas de ventos concordando novamente com os aspectos do fenômeno físico, Figuras 6.10 e 6.11.

Tendo compreendido a mecânica das distribuições geradas pela solução ao variar os parâmetros o próximo passo foi observar através do experimento de Copenhague o comportamento dos parâmetros do coeficiente complexo K_z onde K_{za} e K_{zb} se apresentaram com características diferentes para cada regime de estabilidade. Neste momento parâmetros empíricos foram colocados de lado e através da técnica de mínimos quadrados foram feitas estimativas dos melhores valores dos parâmetros que aproximavam cada valor do modelo com os valores dos experimentos. Em posse desses parâmetros ótimos foram comparados os três regimes de estabilidade convecção alta, baixa e moderada. Os parâmetros ótimos apresentaram um padrão qualitativo interessante e que condiz com o fenômeno físico. O padrão aponta que o termo responsável pelas estruturas coerentes é dominante em relação ao outro termo para convecção alta. Já para convecção baixa foi encontrado exatamente o oposto ou seja o termo K_{za} se torna dominante. Isso é fisicamente explicado dado que a alta convectividade faz com que haja maior formação de turbilhões e as estruturas coerentes estão mais presentes e visíveis do que para a convecção baixa.

Continuando a busca para solidificar e embasar o nosso resultado anterior passamos à analisar o comportamento dos parâmetros através de gráficos de isolinhas relacionando o comportamento de K_{za} e K_{zb} ao valor de mínimo quadrado apresentando regiões onde havia o comportamento.

O modelo passou a ser aplicado em um cenário real, Termoelétrica Linhares S.A., para isso readaptações como implementação de mudanças de coordenadas foram incluídas. Elas descrevem as alterações na direção do vento durante a simulação. Há poluente residual no sistema, onde este foi lançado nas horas anteriores de simulação, apenas sendo observado quando as condições de velocidade do vento estão mais baixas. Isso foi introduzido com a mudança de coordenadas aliado ao fato da integração ocorrer sob todo o intervalo de tempo para cada ponto do espaço. E para ter uma descrição apropriada para a dispersão de poluentes, principalmente em regime CLC, substituí-se a condição de fonte delta para gaussiana. O modelo passou a descrever a dispersão de forma condizente com aspectos realísticos. Isso ocorreu pois a fonte delta não possui um termo que fizesse com que as flutuações decaíssem com aumento de autofunções somadas à solução. Já a condição gaussiana possui essa característica e ela se reflete no comportamento da distribuição de concentração. A diferença em qualidade de resultados é observada ao aplicar uma simulação de 90h contínuas e calcular a média sobre esse período e analisar como se comporta o gráfico da distribuição de concentração média em ambas situações onde a Figura 6.30 é a fonte delta e a Figura 6.33 é a fonte gaussiana. A distribuição de concentração média da fonte gaussiana é equivalente aos resultados anteriores obtidos para o mesmo período por Schramm, 2016.

Com o modelo sesquilinear funcional em cenários reais foram feitas simulações no cenário da CMPC devido à existência de dados de concentrações observadas. Três grupos de horas contínuas foram selecionados: caso I - 34h, caso II - 43h e caso III - 29h. Mostrou-se a capacidade do modelo representar casos reais tanto para regime CLC como também CLE. Por possuir um grau de liberdade, índice estatístico COR sozinho não basta para avaliar a qualidade da predição do modelo. Precisa-se recorrer, por exemplo, à média das concentrações predita versus observadas como também a relação $\frac{COR}{NMSE}$. O desempenho do modelo foi bom se avaliarmos a simplicidade dos coeficientes de difusão que são constantes e isotrópicos, K_x e K_y e os perfis de CLC e CLE são polinômios que aproximam outros perfis mais complexos e que carregam informações de variáveis meteorológicas. Um conjunto hipotético de K_z 's que variam no tempo foi selecionado a partir das simulações anteriores do caso I. O conjunto de K_z 's selecionados apresentou valores estatísticos melhores se comparados à simulação de coeficiente constante. Os coeficientes variáveis, também apresentaram o padrão dos coeficientes em Copenhague.

Em regime de baixa convecção a fase era menor que o parâmetro que multiplica o perfil. Ao estudar as correlações, K_{za} e K_{zb} com variáveis meteorológicas o K_{za} concorda com resultados já conhecidos e usados nas parametrizações da turbulência. Para K_{zb} não há correlações significativas isso quando é avaliado para as 34h sem distinção de regime. Quando é separado por regime CLC apresenta correlações mais altas para o termo de fase além de que as variáveis com correlação mais altas estão vinculadas a presença de fatores mais turbulentos na atmosfera como temperatura e o fluxo de calor.

O modelo inovador proposto para esse trabalho continua surpreendendo com os resultados positivos. O objetivo inicial foi cumprido, devolver características turbulentas a solução analítica da equação de advecção-difusão fazendo surgir estruturas, flutuações da densidade de concentração, e descrevendo comportamentos como o que surgiu na variação da velocidade, o meandro. Assim como o padrão qualitativo identificado no experimento de Copenhagen e observado novamente no regime de camada limite estável no conjunto de K_z 's variáveis. Ele ainda não se encontra pronto para modelar sozinho por faltar uma compreensão completa à respeito da mecânica que irá controlar o comportamento da fase. Muitos avanços foram feitos, mas ainda não foram suficientes para decodificar o mecanismo que irá otimizar o resultado para cada situação aplicada à ele.

7.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Ações Imediatas

Realizar uma construção espacial e temporal para a fonte gaussiana, que demonstre as mesmas propriedades estruturais encontradas na fonte delta.

Investir no estudo que envolve a avaliação das variáveis meteorológicas para conectar ao termo de fase para construir um coeficiente que varia com o tempo assim identificar padrões que orientem o desenvolvimento da parametrização do coeficiente vertical.

Ações à longo prazo

Investigar a existência, ou propor a realização de algum experimento que possua medições de concentrações feitas em vários pontos em um mesmo momento para comparar a distribuição de concentração obtida pelas medições e assim pelo modelo.

Como encontrar um experimento que possua a configuração acima citada pode ser

uma tarefa utópica é possível tentar recriar o processo acima com uma base de dados de medições de concentrações que possibilite encontrar conjunto de medições que tenham as mesmas configurações apenas variando a direção de vento. O que possibilitará recriar as distribuições de concentração e por fim comparar ao modelo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aguilera-Navarro, M. C., Aguilera-Navarro, V. C., Ferreira, R. C., e Teramon, N. **Os aproximantes de Padé**. Em *Matemática Universitária*, vol. 26/27, p. 49–66, 1999.

Alves, I., Degrazia, G., Buske, D., Vilhena, M., Moraes, O., e Acevedo, O. Derivation of an eddy diffusivity coefficient depending on source distance for a shear dominated planetary boundary layer, **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, vol. 391(24), p. 6577–6586, 2012.

Anfossi, D., Brusasca, G., e Tinarelli, G. Simulation of atmospheric diffusion in low windspeed meandering conditions by a Monte Carlo dispersion model, **Il Nuovo Cimento C**, vol. 13(6), p. 995–1006, 1990.

Anfossi, D., Oetl, D., Degrazia, G., e Goulart, A. an Analysis of Sonic Anemometer Observations in Low Wind Speed Conditions, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 114, p. 179–203, 2005.

Arfken, G. e Weber, H. **Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física**. Elsevier, 6 ed., 2007.

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

Barad, M. L. Project Praire-Grass: A field program in diffusion, **Geophysical Research**, vol. I - II, AFCRF-TR-58-235(59), 1958.

Bell, M. L. e Davis, D. L. Reassessment of the lethal London fog of 1952: Novel indicators of acute and chronic consequences of acute exposure to air pollution, **Environmental Health Perspectives**, vol. 109(SUPPL. 3), p. 389–394, 2001.

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

Bodmann, B. E. J., Zabadal, J. R. S., Schuck, A., Vilhena, M. T., e Quadros, R. **On Coherent Structures from a Diffusion-Type Model**. Em *Integral Methods in Science and Engineering*, cap. 5, p. 65–74. Springer New York, New York, NY, 2013.

Bolzan, M. J. A. **Um Estudo sobre Características do Subdomínio Inercial da Turbulência da Turbulência Desenvolvida em Escoamento Acima e Dentro da Copa da Floresta Amazônica de Terra Firme e Acima do Pantanal Matogrossense**. Tese de Doutorado do Curso da Pós-Graduação em Meteorologia, INPE, 2002.

Brusasca, G., Tinarelli, G., e Baas, D. Particle Model Simulation of Diffusion in Low Wind Speed Stable Conditions, **Atmospheric Environmen**, vol. 26(4), p. 707–723, 1992.

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

Buske, D., de Vilhena, M., Moreira, D., e Bodmann, B. **An Analytic Solution for the Steady-State Two-Dimensional Advection–Diffusion–Deposition Model by the GILTT Approach**. Em Constanda, C. e Potapenko, S., editors, *Integral Methods in Science and Engineering*, p. 27–35. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2008.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D., e Tirabassi, T. **An Analytical Solution for the Transient Two-Dimensional Advection–Diffusion Equation with Non-Fickian Closure in Cartesian Geometry by the Generalized Integral Transform Technique**. Em Constanda, C. e Pérez, M., editors, *Integral Methods in Science and Engineering, Volume 2*, vol. 2, cap. 4, p. 33–40. Birkhäuser Boston, Boston, 2010.

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

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

Buske, D., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., e Bodmann, B. Air Pollution Steady-State Advection-Diffusion Equation: The General Three-Dimensional Solution, **Journal of Environmental Protection**, vol. 03(09), p. 1124–1134, 2012.

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

Carvalho, J. C., T. M. B. Vilhena, M., A. Degrazia, G., e Sallet, M. A General Lagrangian Approach to Simulate Pollutant Dispersion in Atmosphere for Low-wind Condition, **American Journal of Environmental Engineering**, vol. 3(1), p. 8–12, 2013.

Carvalho, J. C. e Vilhena, M. T. M. B. d. Pollutant dispersion simulation for low wind speed condition by the ILS method, **Atmospheric Environment**, vol. 39(34), p. 6282–6288, 2005.

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

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

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

Cirillo, M. C. e Poli, A. a. An intercomparison of semiempirical diffusion models under low wind speed, stable conditions, **Atmospheric Environment. Part A. General Topics**, vol. 26(5), p. 765–774, 1992.

CONAMA. Conselho Nacional do Meio Ambiente, Resolução 15 junho 1989, **Publicada no D.O.U, de 30/08/89, Seção I**, vol. , p. 15.048, 1989.

Corrsin, S. Limitations of Gradient Transport Models in Random Walks and in Turbulence, **Advances in Geophysics**, vol. 18, p. 25, 1974.

Cotta, R. e Mikhaylov, M. **Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. John Wiley & Sons, Baffins Lane, Chinchester, England, 1997.

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

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

Degrazia, G., Anfossi, D., Carvalho, J., Mangia, C., Tirabassi, T., e Campos Velho, H. Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions, **Atmospheric Environment**, vol. 34(21), p. 3575–3583, 2000.

Degrazia, G. A., Buligon, L., Szinvelski, C. R. P., Moor, L., e Acevedo, O. C. Uma Revisão Teórica Sobre Funções De Autocorrelação Aplicadas a Altas E Baixas Velocidades Do Vento, **Ciência e Natura**, vol. 36(3), p. 101–107, 2014.

Degrazia, G. A., Goulart, A., Carvalho, J. C., Szinvelski, C. R. P., Buligon, L., e Timm, A. U. Turbulence dissipation rate derivation for meandering occurrences in a stable planetary boundary layer, **Atmospheric Chemistry and Physics Discussions**, vol. 7(5), p. 15251–15276, 2008.

Degrazia, G. A. e Moraes, O. L. L. A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 58(3), p. 205–214, 1992.

Degrazia, G. A., Moraes, O. L. L., e Oliveira, A. P. An Analytical Method to Evaluate Mixing Length Scales for the Planetary Boundary Layer, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 35(6), p. 974–977, 1996a.

Degrazia, G. A., Moreira, D. M., e Vilhena, M. T. Derivation of an Eddy Diffusivity Depending on Source Distance for Vertically Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 40(7), p. 1233–1240, 2001.

Degrazia, G. A., Timm, A. U., Moreira, V. S., e Roberti, D. R. **Meandering Dispersion Model Applied to Air Pollution**. InTech, 2011.

Degrazia, G. A., Velho, H. F. C., e Carvalho, J. C. Nonlocal Exchange Coefficients for the Convective Boundary Layer Derived from Spectral Properties, **Contributions to Atmospheric Physics**, vol. 70, p. 57–64, 1997.

Degrazia, G. A., Vilhena, M. T., e Moraes, O. L. L. An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion, **Il Nuovo Cimento**, vol. 19C, p. 399–403, 1996b.

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

Denmead, O. T. e Bradley, E. F., **Flux-Gradient Relationships in a Forest Canopy**, p. 421–442. Springer Netherlands, Dordrecht, 1985.

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

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

Firket, J. Sur les causes des accidents survenus dans la vallée de la Meuse, lors des brouillards de décembre 1930., **Bull. Acad. Roy. Med. Belg.**, vol. 11, p. 683–741, 1931.

Ghidaoui, M. e Lam, M., **Shallow Shear Flows in Surface Water**, vol. I, cap. 40, p. 527–543. CRC press, 2013.

Gisch, D. L. **Uma equação constituinte para a dispersão não-linear de poluentes na camada atmosférica turbulenta: fechamento fikian modificado e a presença de fase**. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia, UFRGS, 2014.

Griffiths, D. J. **Introduction to Quantum Mechanics**. Prentice Hall, 1995.

Gryning, S. E. **Elevated Source SF 6 -Tracer Dispersion Experiments in the Copenhagen Area**. Risoc National Laboratory, Roskilde, Denmark, 1981.

Gryning, S. E. e Lyck, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations, **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 23(4), p. 651–660, 1984.

Gryning, S.-e. e Lyck, E. **The Copenhagen Tracer Experiments : Reporting of Measurements**. vol. 1054, 2002.

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

Holmes, P., Lumley, J. L., e Berkooz, G. **Turbulence, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry**. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press, 1996.

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

Ingram, R. G. e Chu, H. Flow Around Islands in Rupert Bay ' An Investigation of the Bottom Friction Effect, **Journal of Geophysical Research**, vol. 92(7), p. 14521–14533, 1987.

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

Jackson, J. D. **Classical electrodynamics**. Wiley, New York, NY, 3rd ed., 1998.

Jha, B. K., Adlakha, N., e Mehta, M. N. Analytic Solution of Two Dimensional Advection Diffusion Equation Arising In Cytosolic Calcium Concentration Distribution, **International Mathematical Forum**, vol. 7(3), p. 135–144, 2012.

Jirka, G. H. e Seol, D. G. Dynamics of isolated vortices in shallow flows, **Journal of Hydro-Environment Research**, vol. 4(2), p. 65–73, 2010.

Junior, J. F. d. O., Pimentel, L. G., e Landau, L. Critérios De Estabilidade Atmosférica Para a Região Da Central Nuclear, **Revista Brasileira de Meteorologia**, vol. 25(2), p. 270–285, 2010.

Kit, E., **Hot-Wire Anemometry in Turbulence Research**, vol. II, cap. 33, p. 447–479. CRC press, 2013.

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

Kumar, A., Jaiswal, D. K., e Kumar, N. Analytical solutions to one-dimensional advection–diffusion equation with variable coefficients in semi-infinite media, **Journal of Hydrology**, vol. 380(3-4), p. 330–337, 2010.

Lin, J. S. e Hildeman, L. M. A. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition, **Atmospheric Environment**, vol. 31, p. 59–71, 1997.

Loeck, J. F. **Efeitos estocásticos em modelos determinísticos para dispersão de poluentes na camada limite atmosférica**. Dissertação de mestrado, UFRGS Escola de Engenharia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica., 2014.

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

Meneghetti, A., Bodmann, B. E. J., e Vilhena, M. T. **A New Diffeomorph Conformal Methodology to Solve Flow Problems with Complex Boundaries by an Equivalent Plane Parallel Problem**. Em Constanda, C., Dalla Riva, M., Lamberti, P. D., e Musolino, P., editors, *Integral Methods in Science and Engineering, Volume 1*, vol. 1, cap. 18, p. 205–214. Springer International Publishing, Cham, 2017.

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

MMA-AP. **Ministério do Meio Ambiente - Áreas Prioritárias - Mapas por Biomas**. Acesso em março 2018, <http://www.mma.gov.br/biodiversidade/biodiversidade-brasileira/%C3%A1reas-priorit%C3%A1rias/item/489>, 2007.

MMA-Conceitos. **Ministério do Meio Ambiente - Conceitos**. Acesso em março 2018, <http://www.mma.gov.br/areas-protetidas/programas-e-projetos/projeto-corredores-ecologicos/conceitos>, 2018.

MMA-Geoprocessamento. **Ministério do Meio Ambiente - Geoprocessamento**. Acesso em março 2018, <http://www.mma.gov.br/governanca-ambiental/geoprocessamento>, 2018.

Moreira, D. **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, 1996.

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

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

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

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

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

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

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., e Carvalho, C. 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), p. 413–424, 2005c.

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

Moreira, V. S., Degrazia, G., Timm, A. U., Roberti, D. R., e Maldaner, S. Connecting Turbulence and Meandering Parameterization to Describe Passive Scalars Dispersion in Low Wind Speed Conditions, **ISRN Atmospheric Sciences**, vol. 2013, p. 1–8, 2013.

Moura, A. **Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal Rio Grande do Sul, 1995.

Möller, S. e Silvestrini, J. H. **Turbulência: fundamentos**. Em *Turbulência*, vol. 4, p. 32. Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânica, 2004.

Nemery, B., Hoet, P. H. M., e Nemmar, A. The Meuse Valley fog of 1930: An air pollution disaster, **Lancet**, vol. 357(9257), p. 704–708, 2001.

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

Nieuwstadt, F. T. M. e Haan, B. J. 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, p. 845–851, 1981.

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

Oetl, D., Goulart, A., Degrazia, G., e Anfossi, D. A new hypothesis on meandering atmospheric flows in low wind speed conditions, **Atmospheric Environment**, vol. 39(9), p. 1739–1748, 2005.

Özisik, M. **Heat Conduction**. John Wiley & Sons, New York, 2 ed., 1974.

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

Paoli, F. D. **Simulação em túnel de vento da dispersão de uma pluma emitida por uma chaminé isolada**. PhD thesis, UFRGS, 2006.

Pasquill, F. The estimation of the dispersion of windborne material, **Meteorol. Mag**, vol. 90(1063), p. 33–49, 1961.

Pérez Guerrero, J., Pimentel, L., Oliveira-Júnior, J., Heilbron Filho, P., e Ulke, A. A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation, **Atmospheric Environment**, vol. 55, p. 201–212, 2012.

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

Rizza, U., Carvalho, J. C., Moreira, D. M., Moraes, M. R., e Goulart, A. G. a Global Analysis of the Atmospheric Pollutant Modeling, **Revista Brasileira de Meteorologia**, vol. 22(1), p. 9, 2007.

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

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

Robson, R. E. Turbulent dispersion in a stable layer with a quadratic exchange coefficient, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 39(3), p. 207–218, 1987.

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

Schramm, J. **Estudo da Dispersão de Poluentes em uma Usina Termelétrica Localizada em Linhares Utilizando o Modelo Calpuff**. Dissertação de mestrado, Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Escola de Engenharia, UFRGS, 2016.

Schwartz, J. **What are people dying of on high air pollution days?**, 1994.

Scire, J. S., Robe, F. R., Fernau, M. E., e Yamartino, R. J. **A user's guide for the CALMET meteorological model (Version 5)**. N° 5, 2000.

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

Seinfeld, J. H. e Pandis, S. N. **Atmospheric chemistry and physics : from air pollution to climate change**. John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, 3 ed., 1963.

SEMA. **Secretaria do Ambiente e Desenvolvimento Sustentável**. Acesso em março 2018, <http://www.sema.rs.gov.br/limites-das-unidades-de-conservacao>, 2018.

Sharan, M. e Gupta, S. Two-dimensional analytical model for estimating crosswind integrated concentration in a capping inversion: Eddy diffusivity as a function of downwind distance from the source, **Atmospheric Environment**, vol. 36(1), p. 97–105, 2002.

Sharan, M. e Kumar, P. An analytical model for crosswind integrated concentrations released from a continuous source in a finite atmospheric boundary layer, **Atmospheric Environment**, vol. 43(14), p. 2268–2277, 2009.

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

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

Sharan, M. e Yadav, A. K. Simulation of diffusion experiments under light wind, stable conditions by a variable K-theory model, **Atmospheric Environment**, vol. 32(20), p. 3481–3492, 1998.

Silva, E. J., Buske, D., Vilhena, M. T., Tirabassi, T., e Bodmann, B. Modeling of Pollutant Dispersion in the Atmosphere Considering the Wind Profile and the Eddy Diffusivity Time Dependent, **American Journal of Environmental Engineering**, vol. 6, p. 12–19, 2016.

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

Stern, A. C. **Air Pollution**. vol. 1. ACADEMIC PRESS, INC, New York, USA, 1968.

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

Suri, B., Tithof, J., Grigoriev, R. O., e Schatz, M. F. Forecasting Fluid Flows Using the Geometry of Turbulence, **Physical Review Letters**, vol. 118(11), p. 114501, 2017.

Tirabassi, T., Buske, D., Moreira, D. M., e Vilhena, M. T. A Two-Dimensional Solution of the Advection–Diffusion Equation with Dry Deposition to the Ground, **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, vol. 47(8), p. 2096–2104, 2008.

Tirabassi, T. e Vilhena, M. T. Advection-Diffusion in the Atmosphere: Equations and Solutions, **Atmospheric Flow Fields: Theory, Numerical Methods and Software Tools**, vol. 39(0), p. 153–173, 2012.

Tropea, C., Yarin, A. L., e Foss, J. F. **Springer handbook of experimental fluid mechanics**. N° 1. Springer Berlin Heidelberg, 2007.

Tsinober, A. **An Informal Conceptual Introduction to Turbulence**. vol. 92. Springer Netherlands, Dordrecht, 2009.

Turner, D. B. Relationships Between 24-Hour Mean Air Quality Measurements and Meteorological Factors in Nashville, Tennessee, **Journal of the Air Pollution Control Association**, vol. 11(10), p. 483–489, 1961.

Ulden, A. V. A surface-layer similarity model for the dispersion of a skewed passive puff near the ground, **Atmospheric Environment. Part A. General Topics**, vol. 26(4), p. 681–692, 1992.

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

Venkatram, A. **Topics in Applied Dispersion Modeling**. Em Venkatram, A. e Wyngaard, J. C., editors, *Topics in Applied Dispersion Modeling*, p. 267–324. American Meteorological Society, Boston, MA, 1988.

Venkatram, A. e Wyngaard, J. C., editors. **Lectures on Air Pollution Modeling**. American Meteorological Society, Boston, MA, 1988.

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

Vilhena, M. T., Bodmann, B., Rizza, U., e Buske, D. **On an Analytical Model for the Radioactive Contaminant Release in the Atmosphere from Nuclear Power Plants**. Em *Nuclear Power- Practical Aspects*. InTech, 2012.

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

Weymar, G. J., Ernst, B., Bodmann, J., Buske, D., e Vilhena, M. T. M. B. Analytical Solution for a Pollutant Dispersion Model with Photochemical Reaction in the Atmospheric Boundary Layer, **American Journal of Environmental Engineering**, vol. 6, p. 20–27, 2016.

Wolanski, E., Imberger, J., e Heron, M. L. Island wakes in shallow coastal waters, **Journal of Geophysical Research**, vol. 89(C6), p. 10553, 1984.

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

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

APÊNDICE A – Dados Micrometeorológicos Termoelétrica Linhares SA.

A.1 Conjunto de 90 horas contínuas

Tabela A.1 – Dados micrometeorológicos usados no modelo para as 90h contínuas no período (01/04/2011 00:00 até 04/04/2011 17:00).

	HORA	z_i (m)	u (m/s)	DV ^o	L (m)
1	0	50,0	0,7	82,5	29,6
2	1	68,7	1,5	120,9	21,8
3	2	54,7	0,8	65,5	20,4
4	3	67,7	1,6	53,9	17,9
5	4	176,0	2,9	41,8	91,8
6	5	188,8	3,5	38,9	82,6
7	6	229,1	4,0	45,9	97,0
8	7	406,3	3,4	61,9	-210,7
9	8	369,5	3,2	79,3	-45,9
10	9	452,6	3,0	94,4	-31,1
11	10	529,5	2,6	100,0	-19,1
12	11	560,9	1,7	110,8	-10,1
13	12	621,4	1,4	188,7	-6,6
14	13	658,9	3,0	241,7	-19,5
15	14	661,9	3,7	237,4	-42,6
16	15	632,1	3,7	241,7	-42,7
17	16	545,6	3,4	248,2	-48,4
18	17	377,5	3,0	259,1	-76,9
19	18	123,8	2,7	266,8	38,3
20	19	82,9	2,2	-89,9	16,5
21	20	67,5	1,8	-82,0	15,7
22	21	52,0	0,8	-63,1	22,2
23	22	51,1	0,8	6,4	24,3
24	23	55,9	1,2	91,4	13,7
25	0	111,1	2,6	108,5	31,7
26	1	185,8	3,0	101,4	91,2
27	2	273,0	3,4	140,1	167,9
28	3	487,1	5,9	166,3	327,8
29	4	498,4	6,1	165,2	329,6
30	5	537,4	6,5	166,2	380,0
31	6	508,9	6,3	166,6	346,4
32	7	620,4	5,6	163,1	-708,1
33	8	699,6	5,6	162,0	-179,7
34	9	674,0	5,6	161,5	-115,7
35	10	706,9	5,4	164,5	-85,9
36	11	740,7	5,5	167,3	-80,4
37	12	764,5	5,3	172,0	-73,3
38	13	783,4	5,2	175,5	-72,9
39	14	773,3	4,9	182,3	-69,1
40	15	750,6	4,6	186,9	-69,2
41	16	700,2	4,4	191,0	-89,9
42	17	424,6	4,1	194,5	-159,9

	HORA	z_i (m)	u (m/s)	DV°	L (m)
43	18	229,2	3,9	196,0	100,3
44	19	215,2	3,8	199,9	92,5
45	20	192,8	3,5	205,0	75,0
46	21	177,8	3,4	204,8	69,4
47	22	141,5	3,0	201,0	47,5
48	23	94,1	2,4	199,7	18,2
49	0	69,2	1,7	190,4	12,0
50	1	54,2	0,9	157,6	15,4
51	2	53,4	1,3	98,0	12,3
52	3	66,4	2,0	86,6	12,3
53	4	69,8	2,1	88,3	12,9
54	5	90,4	2,4	79,0	21,6
55	6	100,4	2,6	77,0	26,2
56	7	174,6	2,2	74,0	-90,7
57	8	269,4	2,2	66,1	-21,1
58	9	408,7	2,1	59,2	-14,0
59	10	517,7	2,0	51,2	-13,2
60	11	570,2	1,3	25,3	-7,1
61	12	640,5	2,3	-58,8	-8,4
62	13	682,1	3,9	-65,7	-34,9
63	14	683,2	4,4	-65,4	-52,3
64	15	648,6	4,5	-64,0	-67,1
65	16	588,9	4,5	-60,9	-95,2
66	17	457,8	4,6	-57,2	-215,9
67	18	290,6	4,5	-60,2	155,0
68	19	270,5	4,3	-63,4	136,2
69	20	270,2	4,3	-65,8	137,2
70	21	288,4	4,5	-59,7	153,3
71	22	272,5	4,3	-54,9	137,1
72	23	274,8	4,3	-48,4	137,6
73	0	237,5	4,0	-43,3	106,1
74	1	180,8	3,3	-36,2	60,5
75	2	97,8	2,2	-27,9	18,8
76	3	87,6	1,9	-34,3	20,0
77	4	79,5	1,6	-59,1	17,6
78	5	93,0	2,1	250,9	18,5
79	6	334,2	4,2	246,9	303,3
80	7	566,8	4,5	255,3	-1939,5
81	8	764,7	5,8	146,6	-426,6
82	9	543,0	5,7	231,3	-143,0
83	10	545,7	5,3	260,0	-80,0
84	11	557,1	4,0	-56,5	-33,8
85	12	624,2	3,7	-28,5	-25,5
86	13	650,1	3,2	-28,7	-16,4
87	14	629,5	2,7	-42,3	-13,0
88	15	668,9	5,0	-49,0	-88,3
89	16	633,0	5,3	-45,5	-158,7
90	17	496,2	4,7	-50,4	-199,0

APÊNDICE B – Dados Micrometeorológicos CMPC Celulose Riograndense

Os dados que foram cedidos pela CMPC Celulose Riograndense e usados estão apresentados abaixo.

B.1 Conjunto 20 medições em regime CLE

Os experimentos usados para calibrar o modelo em regime de CLE onde a direção do vento era de até 2,5° de distância da estação.

Tabela B.1 – Dados micrometeorológicos da 20 medições em regime CLE onde a direção do vento era de até 2,5 graus da estação que se encontra aproximadamente 156,5°.

MÊS	DIA	HORA	G (W/m^2)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	u (m/s)	T (K)	RH %	BAR (hPa)	DV°	C ($\mu g/m^3$)
1	24	2	-51,7	0,5	-9,0	812	198,6	3,1	297,5	78	1006,0	157,6	1,50
1	26	24	-4,6	0,1	-9,0	62	12,9	1,0	294,2	86	1009,0	157,5	0,29
2	8	23	-4,9	0,1	-9,0	107	12,1	1,0	301,0	88	1006,0	157,6	0,43
2	10	7	-10,3	0,2	-9,0	148	29,7	1,5	298,8	89	1010,0	157,9	0,35
2	15	3	-5,0	0,1	-9,0	61	11,8	1,0	295,9	95	1006,0	157,0	0,36
3	8	5	-11,4	0,1	-9,0	126	17,5	1,5	293,2	85	1011,0	158,9	1,34
3	8	6	-11,4	0,1	-9,0	113	17,5	1,5	293,0	87	1012,0	158,5	1,30
3	9	21	-22,5	0,3	-9,0	409	116,0	2,1	294,9	100	1007,0	154,8	1,15
3	21	2	-4,2	0,1	-9,0	254	14,2	1,0	293,9	96	1011,0	158,4	1,20
3	30	23	-11,4	0,1	-9,0	113	17,5	1,5	294,6	92	1015,0	159,1	1,30
3	30	24	-11,4	0,1	-9,0	113	17,5	1,5	294,4	94	1014,0	156,7	1,27
3	31	1	-29,0	0,3	-9,0	332	59,6	2,1	294,4	95	1014,0	158,8	1,11
3	31	2	-41,6	0,4	-9,0	571	122,8	2,6	294,4	96	1014,0	155,6	1,04
4	2	19	-11,2	0,1	-9,0	130	17,7	1,5	300,6	79	1005,0	155,2	0,77
4	8	3	-9,3	0,1	-9,0	113	21,3	1,5	294,9	87	1008,0	154,8	0,24
4	14	19	-28,1	0,3	-9,0	348	67,2	2,1	298,1	87	1009,0	155,0	1,66
4	15	1	-5,0	0,1	-9,0	61	11,7	1,0	295,9	90	1009,0	159,3	1,63
4	15	2	-28,8	0,3	-9,0	333	60,3	2,1	295,9	93	1009,0	155,4	1,65
4	18	24	-25,5	0,3	-9,0	381	88,5	2,1	298,6	98	1008,0	158,5	1,72
4	19	1	-22,3	0,3	-9,0	410	118,0	2,1	298,4	99	1008,0	156,7	1,70

G - Fluxo de calor, T - Temperatura, RH - Taxa de Humidade, BAR - pressão, DV - Indica a direção de onde o vento vem, C concentração medida na estação.
Todas as medições foram realizadas no ano 2016.

B.2 Conjunto 20 medições em regime CLC

Os experimentos usados para calibrar o modelo em regime de CLC onde a direção do vento era de até 2,5° de distância da estação.

Tabela B.2 – Dados micrometeorológicos da 20 medições em regime CLC onde a direção do vento era de até 2,5 graus da estação que se encontra aproximadamente 156,5°.

MÊS	DIA	HORA	G (W/m^2)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	u (m/s)	T (K)	RH %	BAR (hPa)	DV°	C ($\mu g/m^3$)
1	5	15	343,9	0,6	2,7	1198	-64,9	3,1	302,5	63	1006,0	158,6	0,60
1	6	19	31,5	0,6	1,2	991	-485,8	3,1	301,1	84	1005,0	156,2	0,57
1	8	7	18,1	0,5	0,6	760	-500,1	2,6	295,9	82	1009,0	155,7	0,63
1	8	13	348,4	0,9	2,3	2193	-215,4	5,1	298,9	66	1008,0	157,0	0,66
1	9	12	255,4	0,8	2,0	1620	-160,6	4,1	299,9	81	1009,0	155,1	0,57
1	10	16	295,2	0,6	2,5	1187	-72,7	3,1	304,5	62	1003,0	156,6	0,53
1	11	15	314,2	0,9	2,5	1926	-179,7	4,6	303,0	61	1002,0	156,9	0,58
1	12	9	207,6	0,4	1,7	520	-20,0	1,5	301,5	69	1004,0	155,2	0,40
1	12	10	286,1	0,5	2,0	765	-31,8	2,1	302,1	67	1004,0	156,7	0,46
1	12	17	199,6	0,9	2,3	2117	-350,4	5,1	303,6	62	1001,0	155,1	0,49
1	13	17	215,3	0,9	2,4	2201	-328,7	5,1	299,9	80	1006,0	159,6	0,47
1	16	12	379,2	0,7	2,4	1436	-85,0	3,6	302,4	50	1008,0	155,9	0,66
1	16	17	217,3	1,0	2,5	2505	-441,5	5,7	301,9	69	1007,0	158,1	0,44
1	20	16	287,6	1,1	2,6	2843	-431,8	6,2	301,9	66	1010,0	155,3	1,23
1	21	12	337,7	0,9	2,5	1911	-170,4	4,6	302,4	62	1012,0	158,2	0,98
1	22	12	372,2	0,5	2,5	795	-26,6	2,1	302,5	41	1011,0	156,7	1,39
1	24	8	93,2	0,5	1,1	844	-119,3	2,6	300,2	63	1008,0	156,9	1,39
1	27	14	337,9	1,0	-9,0	2533	-297,4	5,7	299,6	60	1011,0	158,8	0,09
1	29	15	345,0	0,9	-9,0	2192	-216,7	5,1	305,4	61	1005,0	156,3	0,47
1	30	10	265,2	0,5	1,8	949	-53,0	2,6	301,4	69	1007,0	156,3	0,37

G - Fluxo de calor, T - Temperatura, RH - Taxa de Humidade, BAR - pressão, DV - Indica a direção de onde o vento vem, C concentração medida na estação.

Todas as medições foram realizadas no ano 2016.

B.3 Conjunto de 34 horas contínuas

Tabela B.3 – Dados micrometeorológicos Caso I de 34h contínuas, fornecidos pela estação de monitoramento da CMPC Celulose Riograndense no período de (19/03/2016 20h até 21/03/2016 05h).

MEDIÇÃO	G (W/m^2)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	u (m/s)	T (K)	RH %	BAR (hPa)	DV°	C ($\mu g/m^3$)
1	-63,9	0,9	-9,0	1932	916,8	5,1	293,9	98	1014,0	168,6	0,85
2	-50,7	0,7	-9,0	1409	578,0	4,1	294,4	92	1015,0	132,6	0,90
3	-37,1	0,5	-9,0	899	311,1	3,1	294,8	85	1015,0	126,2	0,84
4	-50,5	0,7	-9,0	1363	579,7	4,1	295,2	78	1014,0	133,7	0,84
5	-30,1	0,4	-9,0	712	204,9	2,6	294,9	79	1014,0	124,7	0,84
6	-30,1	0,4	-9,0	628	204,9	2,6	294,9	78	1014,0	124,0	0,80
7	-37,0	0,5	-9,0	857	311,5	3,1	295,0	77	1013,0	140,3	0,93
8	-43,7	0,6	-9,0	1102	436,7	3,6	295,4	75	1013,0	140,4	1,06
9	-50,5	0,7	-9,0	1362	579,2	4,1	295,0	76	1014,0	139,2	1,06
10	-43,9	0,6	-9,0	1115	435,8	3,6	294,9	78	1014,0	137,3	1,03
11	-30,1	0,4	-9,0	661	204,6	2,6	294,5	83	1014,0	120,2	0,94
12	-30,1	0,4	-9,0	627	204,6	2,6	294,5	83	1015,0	120,6	0,92
13	25,1	0,5	-9,0	770	-371,5	2,6	294,6	84	1015,0	126,7	0,90
14	90,2	0,5	-9,0	840	-123,2	2,6	295,1	84	1016,0	136,1	0,93
15	146,6	0,6	-9,0	1089	-127,5	3,1	296,0	81	1015,0	135,2	0,89
16	188,7	0,7	-9,0	1339	-150,0	3,6	296,8	77	1015,0	140,1	1,05
17	214,4	0,8	-9,0	1851	-252,4	4,6	296,8	77	1014,0	146,6	1,56
18	223,6	0,9	-9,0	2127	-320,0	5,1	296,9	78	1014,0	145,6	1,73
19	216,1	0,9	-9,0	2131	-329,7	5,1	296,9	80	1013,0	144,7	1,64
20	191,6	0,9	-9,0	2120	-367,1	5,1	296,4	84	1012,0	143,1	1,45
21	150,9	0,8	-9,0	1839	-344,3	4,6	295,5	91	1012,0	140,5	1,46
22	96,1	0,8	-9,0	1789	-520,5	4,6	294,9	96	1012,0	143,8	1,39
23	31,5	0,6	-9,0	1266	-744,3	3,6	294,6	97	1012,0	163,4	1,30
24	-63,2	0,9	-9,0	1928	927,4	5,1	294,1	100	1013,0	177,7	1,11
25	-64,0	1,1	-9,0	2619	1697,4	6,2	294,4	100	1013,0	154,6	1,18
26	-64,0	1,1	-9,0	2631	1697,4	6,2	294,4	96	1013,0	146,2	1,66
27	-63,8	0,9	-9,0	1998	918,2	5,1	294,2	95	1013,0	141,3	1,48
28	-57,2	0,8	-9,0	1663	737,8	4,6	293,9	96	1012,0	147,1	1,49
29	-50,6	0,7	-9,0	1380	577,5	4,1	294,2	95	1013,0	146,7	1,43
30	-22,6	0,3	-9,0	604	115,6	2,1	294,1	94	1012,0	128,9	1,63
31	-4,2	0,1	-9,0	254	14,2	1,0	293,9	96	1011,0	158,4	1,20
32	-9,4	0,1	-9,0	116	21,2	1,5	293,9	98	1010,0	138,2	1,32
33	-9,4	0,1	-9,0	113	21,2	1,5	294,0	100	1009,0	142,8	1,09
34	-30,0	0,4	-9,0	626	204,4	2,6	294,4	100	1009,0	127,6	1,01

G - Fluxo de calor, T - Temperatura, RH - Taxa de Humidade, BAR - pressão, DV - Indica a direção de onde o vento vem, C concentração medida na estação.

B.4 Conjunto de 43 horas contínuas

Tabela B.4 – Dados micrometeorológicos Caso II de 43h contínuas, fornecidos pela estação de monitoramento da CMPC Celulose Riograndense no período de (19/03/2016 20h até 21/03/2016 05h).

MEDIÇÃO	G (W/m^2)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	u (m/s)	T (K)	RH %	BAR (hPa)	DV°	C ($\mu g/m^3$)
1	44,9	0,3	0,7	410	-58,7	1,5	298,4	63	1012,0	136,2	1,50
2	146,2	0,3	1,3	485	-25,3	1,5	299,0	61	1013,0	128,8	1,49
3	232,0	0,7	1,8	1366	-126,1	3,6	298,9	66	1012,0	149,0	1,63
4	297,3	0,5	2,1	987	-48,9	2,6	299,4	64	1012,0	116,1	1,56
5	338,1	0,6	2,2	1192	-66,0	3,1	299,1	59	1012,0	109,9	1,47
6	353,4	0,7	2,3	1423	-90,0	3,6	298,9	61	1011,0	108,1	1,45
7	345,0	0,8	2,4	1658	-125,2	4,1	299,8	60	1010,0	95,3	1,42
8	310,9	0,8	2,4	1647	-136,4	4,1	300,1	58	1010,0	100,6	1,43
9	251,3	0,8	2,3	1619	-162,8	4,1	299,4	60	1009,0	114,0	1,45
10	169,6	0,8	2,0	1575	-228,1	4,1	298,5	67	1009,0	117,8	1,40
11	70,5	0,8	1,5	1765	-693,4	4,6	297,2	78	1008,0	120,5	1,39
12	-37,2	0,6	-9,0	1173	522,9	3,6	296,9	82	1009,0	119,0	1,39
13	-61,0	0,6	-9,0	1068	290,5	3,6	296,9	81	1009,0	122,9	1,41
14	-59,7	0,6	-9,0	1068	298,4	3,6	296,0	87	1009,0	140,0	1,50
15	-64,0	0,9	-9,0	1929	909,9	5,1	294,9	92	1008,0	116,7	1,45
16	-64,0	1,1	-9,0	2618	1688,7	6,2	293,2	92	1008,0	110,6	1,41
17	-64,0	1,0	-9,0	2328	1295,9	5,7	293,0	92	1007,0	114,2	1,41
18	-64,0	1,0	-9,0	2308	1294,5	5,7	291,9	94	1006,0	112,0	1,39
19	-63,7	0,9	-9,0	1957	911,3	5,1	292,1	95	1005,0	120,3	1,43
20	-63,6	0,9	-9,0	1933	911,9	5,1	292,4	92	1004,0	118,4	1,39
21	-63,6	0,9	-9,0	1932	912,9	5,1	292,6	93	1004,0	113,2	1,41
22	-43,8	0,6	-9,0	1193	431,3	3,6	292,0	94	1004,0	115,2	1,37
23	-57,2	0,8	-9,0	1637	732,2	4,6	291,9	97	1004,0	107,8	1,38
24	-64,0	1,0	-9,0	2297	1291,8	5,7	292,6	94	1004,0	107,4	1,38
25	36,3	1,0	0,7	2383	-2438,1	5,7	293,2	87	1004,0	99,0	1,33
26	102,1	0,7	1,0	1621	-356,3	4,1	293,9	87	1004,0	104,8	1,36
27	158,4	0,8	1,4	1569	-241,3	4,1	294,5	86	1005,0	123,5	1,39
28	200,7	0,7	1,7	1360	-141,3	3,6	294,9	88	1005,0	126,8	1,42
29	227,6	0,8	1,8	1603	-176,5	4,1	295,4	86	1004,0	137,7	1,45
30	316,9	0,9	2,2	2171	-233,1	5,1	295,1	90	1004,0	149,6	1,70
31	231,5	1,0	2,0	2478	-415,3	5,7	295,2	92	1003,0	147,7	1,71
32	208,7	1,0	2,1	2477	-456,5	5,7	294,6	91	1003,0	139,7	1,60
33	226,5	1,0	2,2	2486	-424,3	5,7	293,5	95	1004,0	135,7	1,50
34	155,9	0,8	2,0	1670	-244,4	4,1	293,2	96	1004,0	133,1	1,46
35	53,4	0,5	1,4	914	-189,7	2,6	293,8	92	1005,0	137,2	1,70
36	-18,0	0,5	-9,0	907	708,7	3,1	294,8	86	1005,0	129,6	1,55
37	-43,4	0,6	-9,0	1102	436,8	3,6	295,4	82	1005,0	137,1	1,57
38	-36,7	0,5	-9,0	867	312,2	3,1	295,6	79	1006,0	130,0	1,58
39	-29,8	0,4	-9,0	635	205,1	2,6	295,1	78	1006,0	121,5	1,53
40	-22,4	0,3	-9,0	416	115,9	2,1	294,8	77	1006,0	127,6	1,47
41	-29,8	0,4	-9,0	626	204,7	2,6	294,6	80	1005,0	137,7	1,44
42	-36,8	0,5	-9,0	856	310,6	3,1	294,4	81	1005,0	136,3	1,58
43	-10,3	0,1	-9,0	361	19,3	1,5	292,9	94	1005,0	148,8	1,53

G - Fluxo de calor, T - Temperatura, RH - Taxa de Humidade, BAR - pressão, DV - Indica a direção de onde o vento vem, C concentração medida na estação.

B.5 Conjunto de 29 horas contínuas

Tabela B.5 – Dados micrometeorológicos Caso III de 29h contínuas, fornecidos pela estação de monitoramento da CMPC Celulose Riograndense no período de (25/10/2016 03h até 26/10/2016 07h).

MEDIÇÃO	G (W/m^2)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	u (m/s)	T (K)	RH %	BAR (hPa)	DV°	C ($\mu g/m^3$)
1	-56,8	0,8	-9,0	1642	739,7	4,6	294,6	98	1007,0	145,2	0,50
2	-43,7	0,6	-9,0	1143	435,2	3,6	294,4	96	1008,0	118,1	0,41
3	-50,3	0,7	-9,0	1362	578,2	4,1	294,5	93	1009,0	106,7	0,32
4	-43,7	0,6	-9,0	1115	435,7	3,6	294,8	92	1010,0	117,6	0,36
5	16,3	0,6	0,5	976	-908,8	3,1	294,8	91	1010,0	109,1	0,36
6	82,1	0,6	1,0	1042	-207,2	3,1	294,9	91	1011,0	104,2	0,35
7	142,9	0,6	1,3	1088	-129,8	3,1	295,2	87	1011,0	101,4	0,31
8	191,9	0,7	1,5	1341	-147,4	3,6	295,9	84	1011,0	97,2	0,33
9	226,6	0,8	1,7	1858	-239,6	4,6	296,4	81	1010,0	101,7	0,29
10	245,8	0,8	1,8	1629	-166,2	4,1	297,5	74	1009,0	91,4	0,31
11	247,4	0,8	2,0	1618	-165,2	4,1	296,8	76	1009,0	98,9	0,30
12	233,8	0,8	2,0	1611	-173,1	4,1	296,2	78	1008,0	103,3	0,29
13	203,3	0,8	2,0	1594	-195,0	4,1	294,9	84	1008,0	107,0	0,32
14	211,4	0,6	2,1	1161	-94,3	3,1	294,4	85	1008,0	108,0	0,33
15	101,0	0,7	1,7	1282	-255,0	3,6	294,1	83	1009,0	111,9	0,31
16	35,2	0,7	1,2	1473	-967,6	4,1	293,9	84	1009,0	98,7	0,28
17	-41,7	0,6	-9,0	1127	460,1	3,6	293,0	91	1009,0	109,6	0,31
18	-37,1	0,5	-9,0	868	309,2	3,1	293,1	91	1009,0	111,7	0,28
19	-30,1	0,4	-9,0	634	203,5	2,6	293,4	90	1010,0	105,5	0,33
20	-30,0	0,4	-9,0	626	203,5	2,6	293,4	91	1009,0	99,0	0,28
21	-52,3	0,6	-9,0	1084	351,4	3,6	293,2	91	1008,0	104,0	0,30
22	-35,2	0,4	-9,0	637	160,4	2,6	293,4	89	1007,0	108,8	0,29
23	-30,0	0,4	-9,0	626	203,4	2,6	293,1	91	1007,0	128,6	0,34
24	-22,6	0,3	-9,0	414	114,8	2,1	292,9	95	1006,0	114,8	0,31
25	-10,3	0,1	-9,0	144	19,3	1,5	293,1	94	1005,0	102,4	0,32
26	-4,2	0,1	-9,0	63	14,1	1,0	293,1	93	1005,0	108,0	0,28
27	-9,3	0,1	-9,0	113	21,2	1,5	293,1	95	1005,0	114,8	0,31
28	-4,1	0,1	-9,0	62	14,2	1,0	293,5	94	1005,0	137,3	0,38
29	17,2	0,3	0,5	369	-122,9	1,5	294,9	88	1005,0	143,8	0,37

G - Fluxo de calor, T - Temperatura, RH - Taxa de Humidade, BAR - pressão, DV - Indica a direção de onde o vento vem, C concentração medida na estação.