

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

MODELO OPERACIONAL PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA
LIMITE ATMOSFÉRICA COM CONTORNOS PARCIALMENTE REFLEXIVOS

por

Jaqueline Fischer Loeck

Tese para obtenção do Título de
Doutora em Engenharia

Porto Alegre, Junho de 2018

MODELO OPERACIONAL PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA CAMADA
LIMITE ATMOSFÉRICA COM CONTORNOS PARCIALMENTE REFLEXIVOS

por

Jaqueline Fischer Loeck
Mestra 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

Doutora em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann

Aprovada por:

Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia PPGFIS / UFSM

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho PPGMMat / UFPel

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 15 de Junho de 2018

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Linhares Geração S.A. e à Termelétrica Viana S.A. pelo suporte financeiro durante o período de pesquisa e elaboração desta tese. À CMPC Celulose Riograndense pelos dados fornecidos, sem os quais não seria possível finalizar a pesquisa.

Ao professor Bardo pela orientação e por repassar seus conhecimentos, permitindo meu enriquecimento intelectual e científico. Ao Promec e à UFRGS pela oportunidade, assim como à todos os professores que de alguma forma contribuíram com a minha formação ao longo da vida acadêmica.

Aos meus pais pelo apoio e incentivo incondicional, e responsáveis pela pessoa que me tornei. Ao meu companheiro Odilon que percorreu este longo caminho ao meu lado, tornando a vida mais leve e sempre enaltecendo minhas qualidades. Ao meu irmão Jardel e à minha cunhada Roberta, minha família em Porto Alegre, por todos os fins de semana que não conversamos sobre a tese, e os que conversamos também.

Aos amigos Cibele, Debora, Marcelo e Ricardo, pelos momentos de descontração, pelas trocas de conhecimentos e pelo apoio moral nos momentos difíceis. À todos agradeço imensamente.

RESUMO

O presente trabalho propõe um novo modelo para dispersão de poluentes na atmosfera, tal modelo foi idealizado no trabalho de dissertação da autora e continuou-se seu desenvolvimento nesta pesquisa. O modelo é baseado na solução semi-analítica da equação de advecção-difusão para emissão contínua, com resolução através do método de separação de variáveis e da transformada de Fourier. As condições de contorno são tratadas como infinitas reflexões do poluente no solo e no topo da camada limite atmosférica. Adiante, estas reflexões são utilizadas de modo parcial, na tentativa de considerar fenômenos da dispersão que não podem ser explicitados no modelo determinístico, de forma que os contornos podem ser entendidos como estocásticos, ou seja, pode-se interpretar os contornos como uma amostragem de uma distribuição. Além disso, é realizada uma otimização nos contornos parcialmente reflexivos, com o objetivo de desenvolver uma metodologia de otimização e determinar os valores ótimos para a reflexão parcial. Os resultados obtidos foram, primeiramente, comparados com os experimentos de Copenhague e Hanford. Posteriormente, comparou-se o modelo com dados de concentração coletados em uma fábrica de celulose, a CMPC Celulose Riograndense. Simulou-se, também, a dispersão de poluentes emitidos por uma usina termelétrica no Brasil, que faz parte do programa de pesquisa e desenvolvimento tecnológico do setor de energia elétrica da Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL).

Palavras-chave: Dispersão de poluentes; Equação de advecção-difusão; Contornos estocásticos.

ABSTRACT

The present work proposes a new model for pollutant dispersion in the atmosphere, this model was idealized in the dissertation work of the author and continued its development in this research. The model is based on the semi-analytic solution of the advection-diffusion equation for continuous emission, with resolution through the method of separation of variables and the Fourier transform. The boundary conditions are treated as infinite reflections of the pollutant in the soil and at the top of the atmospheric boundary layer. These reflections are used in a partial way in the attempt to consider phenomena of dispersion that can not be explained in the deterministic model, so that the boundaries can be understood as stochastic, that is, one can interpret the boundaries as a sampling of a distribution. In addition, an optimization is performed in the partially reflective boundaries, with the purpose of developing an optimization methodology and determining the optimal values for the partial reflection. The results obtained were firstly compared with the experiments of Copenhagen and Hanford. Subsequently, the model was compared with concentration data collected at a cellulose production plant. The dispersion of pollutants emitted by a thermoelectric plant in Brazil was also simulated, which is part of the research and technological development program of the electric energy sector of the National Electric Energy Agency (ANEEL).

Keywords: Pollutant dispersion; Advection-diffusion equation; Stochastic boundaries.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Objetivos	3
1.2	Organização do Trabalho	4
1.3	Revisão Bibliográfica	4
2	MICROMETEOROLOGIA E DISPERSÃO DE POLUENTES	10
2.1	Camada Limite Atmosférica	11
2.2	Regimes de Estabilidade	11
2.2.1	Camada Limite Convectiva	11
2.2.2	Camada Residual	14
2.2.3	Camada Limite Estável	15
2.2.4	A Estrutura da Turbulência na Camada Limite Convectiva	15
3	MODELO PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA AT- MOSFERA	17
3.1	Modelo Físico-Matemático	17
3.2	Parâmetros Reflexivos	19
3.2.1	Parâmetros Parcialmente Reflexivos	22
4	DADOS PARA COMPARAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO	24
4.1	CMPC Celulose Riograndense	24
4.1.1	Condições Estáveis	25
4.1.2	Condições Convectivas	27
4.2	Linhares Geração S.A.	28
4.2.1	Crescimento da Camada Limite Convectiva	31
4.3	Parametrização da Turbulência	32
4.3.1	Condições Convectivas	32
4.3.2	Condições Estáveis	34
4.4	Perfil de Velocidade do Vento	35
4.5	Índices Estatísticos	36

5	RESULTADOS	38
5.1	CMPC Celulose Riograndense	38
5.1.1	Condições Estáveis	38
5.1.2	Condições Convectivas	84
5.2	Usina Termelétrica Luiz Oscar Rodrigues de Melo	130
6	CONCLUSÃO	144
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	146
	APÊNDICE A Resultados do exame de qualificação	154

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Divisão da troposfera. [Adaptado de Stull, 1988]	10
Figura 2.2	Evolução diária da camada limite atmosférica. [Adaptado de Stull, 1988]	12
Figura 3.1	Esquema para a dispersão baseado em domínio vertical ilimitado.	20
Figura 3.2	Esquema para a reflexão completa com início no solo.	20
Figura 3.3	Esquema para a reflexão completa com início no topo da camada limite atmosférica.	21
Figura 3.4	Esquema para a reflexão parcial com início na camada limite atmosférica.	22
Figura 3.5	Esquema para a reflexão parcial com início no solo.	23
Figura 5.1	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 01.	39
Figura 5.2	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 01.	40
Figura 5.3	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 01.	41
Figura 5.4	Isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 01.	42
Figura 5.5	Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 01.	43
Figura 5.6	Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 01.	44
Figura 5.7	Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 01.	45
Figura 5.8	Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 01.	46
Figura 5.9	Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 01.	47
Figura 5.10	Isolinhas do índice κ para a Simulação 01.	48
Figura 5.11	Gráfico e isolinhas da relação $COR/NMSE$ para a Simulação 01.	49
Figura 5.12	Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 01.	50

Figura 5.13	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 01.	51
Figura 5.14	Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 01.	52
Figura 5.15	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,75$ e $\omega_s = 0,45$ para a Simulação 01.	53
Figura 5.16	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 02.	54
Figura 5.17	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 02.	55
Figura 5.18	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 02.	56
Figura 5.19	Isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 02.	57
Figura 5.20	Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 02.	58
Figura 5.21	Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 02.	59
Figura 5.22	Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 02.	60
Figura 5.23	Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 02.	61
Figura 5.24	Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 02.	62
Figura 5.25	Isolinhas do índice κ para a Simulação 02.	63
Figura 5.26	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 02.	64
Figura 5.27	Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 02.	65
Figura 5.28	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 02.	66
Figura 5.29	Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 02.	67
Figura 5.30	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,7$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 02.	68
Figura 5.31	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 03.	69

Figura 5.32	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 03.	70
Figura 5.33	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 03.	71
Figura 5.34	Isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 03.	72
Figura 5.35	Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 03.	73
Figura 5.36	Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 03.	74
Figura 5.37	Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 03.	75
Figura 5.38	Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 03.	76
Figura 5.39	Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 03.	77
Figura 5.40	Isolinhas do índice κ para a Simulação 03.	78
Figura 5.41	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 03.	79
Figura 5.42	Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 03.	80
Figura 5.43	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 03.	81
Figura 5.44	Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 03.	82
Figura 5.45	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,8$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 03.	83
Figura 5.46	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 04.	85
Figura 5.47	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 04.	86
Figura 5.48	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 04.	87
Figura 5.49	Isolinhas do índice de correlação para (COR) a Simulação 04.	88
Figura 5.50	Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 04.	89

Figura 5.51	Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 04.	90
Figura 5.52	Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 04.	91
Figura 5.53	Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 04.	92
Figura 5.54	Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 04.	93
Figura 5.55	Isolinhas do índice κ para a Simulação 04.	94
Figura 5.56	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 04.	95
Figura 5.57	Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 04.	96
Figura 5.58	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 04.	97
Figura 5.59	Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 04.	98
Figura 5.60	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,1$ para a Simulação 04.	99
Figura 5.61	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 05.	100
Figura 5.62	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 05.	101
Figura 5.63	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 05.	102
Figura 5.64	Isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 05.	103
Figura 5.65	Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 05.	104
Figura 5.66	Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 05.	105
Figura 5.67	Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 05.	106
Figura 5.68	Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 05.	107
Figura 5.69	Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 05.	108
Figura 5.70	Isolinhas do índice κ para a Simulação 05.	109

Figura 5.71	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 05.	110
Figura 5.72	Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 05.	111
Figura 5.73	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 05.	112
Figura 5.74	Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 05.	113
Figura 5.75	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 05.	114
Figura 5.76	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 06.	115
Figura 5.77	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 06.	116
Figura 5.78	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Si- mulação 06.	117
Figura 5.79	Isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 06.	118
Figura 5.80	Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 06.	119
Figura 5.81	Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simu- lação 06.	120
Figura 5.82	Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 06.	121
Figura 5.83	Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simula- ção 06.	122
Figura 5.84	Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 06.	123
Figura 5.85	Isolinhas do índice κ para a Simulação 06.	124
Figura 5.86	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 06.	125
Figura 5.87	Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 06.	126
Figura 5.88	Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 06.	127
Figura 5.89	Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 06.	128
Figura 5.90	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,6$ e $\omega_s = 0,4$ para a Simulação 06.	129

Figura 5.91	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 1$ hora.	132
Figura 5.92	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 2$ horas.	132
Figura 5.93	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 3$ horas.	133
Figura 5.94	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 4$ horas.	133
Figura 5.95	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 5$ horas.	134
Figura 5.96	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 6$ horas.	134
Figura 5.97	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 7$ horas.	135
Figura 5.98	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 8$ horas.	135
Figura 5.99	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 9$ horas.	136
Figura 5.100	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 10$ horas.	136
Figura 5.101	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 11$ horas.	137
Figura 5.102	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 12$ horas.	137
Figura 5.103	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 13$ horas.	138
Figura 5.104	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 14$ horas.	138
Figura 5.105	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 15$ horas.	139
Figura 5.106	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 16$ horas.	139

Figura 5.107	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 17$ horas.	140
Figura 5.108	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 18$ horas.	140
Figura 5.109	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 19$ horas.	141
Figura 5.110	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 20$ horas.	141
Figura 5.111	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 21$ horas.	142
Figura 5.112	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 22$ horas.	142
Figura 5.113	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 23$ horas.	143
Figura 5.114	Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 24$ horas.	143
Figura A.1	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com uma reflexão completa, $\omega_c = 1, 0$ e $\omega_s = 1, 0$, para o experimento de Hanford. . .	155
Figura A.2	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 27 reflexões parciais, $\omega_c = 0, 01$ e $\omega_s = 0, 01$, para o experimento de Hanford. . .	156
Figura A.3	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 85 reflexões parciais, $\omega_c = 0, 003$ e $\omega_s = 0, 003$, para o experimento de Hanford. . .	157
Figura A.4	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 93 reflexões parciais, $\omega_c = 0, 003$ e $\omega_s = 0, 01$, para o experimento de Hanford. . .	158
Figura A.5	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para o experimento de Hanford.	160
Figura A.6	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para o experimento de Hanford.	161

Figura A.7	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para o experimento de Hanford.	162
Figura A.8	Isolinhas do índice de correlação (COR) para o experimento de Hanford.	163
Figura A.9	Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para o experimento de Hanford.	164
Figura A.10	Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para o experimento de Hanford.	165
Figura A.11	Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Hanford.	166
Figura A.12	Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Hanford.	167
Figura A.13	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 1 reflexão completa, $\omega_c = 1,0$ e $\omega_s = 1,0$, para o experimento de Copenhagen.	169
Figura A.14	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 4 reflexões parciais, $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$, para o experimento de Copenhagen.	170
Figura A.15	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 5 reflexões parciais, $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,15$, para o experimento de Copenhagen.	171
Figura A.16	Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 4 reflexões parciais, $\omega_c = 0,3$ e $\omega_s = 0,1$, para o experimento de Copenhagen.	172
Figura A.17	Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para o experimento de Copenhagen.	174
Figura A.18	Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para o experimento de Copenhagen.	175
Figura A.19	Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para o experimento de Copenhagen.	176
Figura A.20	Isolinhas do índice de correlação (COR) para o experimento de Copenhagen.	177

Figura A.21 Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.	178
Figura A.22 Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.	179
Figura A.23 Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.	180
Figura A.24 Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.	181

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Dados das fontes da CMPC Celulose Riograndense.	25
Tabela 4.2	Dados micrometeorológicos da Simulação 01, coletados no dia 28/01/16.	25
Tabela 4.3	Dados micrometeorológicos da Simulação 02, coletados do dia 03/08/16 ao dia 04/08/16.	26
Tabela 4.4	Dados micrometeorológicos da Simulação 03, coletados do dia 02/10/16 ao dia 03/10/16.	26
Tabela 4.5	Dados micrometeorológicos da Simulação 04, coletados no dia 22/01/16.	27
Tabela 4.6	Dados micrometeorológicos da Simulação 05, coletados no dia 23/09/16.	27
Tabela 4.7	Dados micrometeorológicos da Simulação 06, coletados no dia 10/10/16.	28
Tabela 4.8	Dados das fontes da UTE LORM.	29
Tabela 4.9	Dados micrometeorológicos simulados para a UTE LORM, coletados no dia 06/08/16.	30
Tabela 5.1	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,75$ e $\omega_s = 0,45$ para a Simulação 01.	53
Tabela 5.2	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,7$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 02.	68
Tabela 5.3	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,8$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 03.	83
Tabela 5.4	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,1$ para a Simulação 04.	99

Tabela 5.5	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 05.	114
Tabela 5.6	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,6$ e $\omega_s = 0,4$ para a Simulação 06.	129
Tabela 5.7	Dados das concentrações simuladas da UTE LORM.	131
Tabela A.1	Dados micrometeorológicos do experimento de Hanford [Doran e Horst, 1985].	155
Tabela A.2	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 1,0$ e $\omega_s = 1,0$ para o experimento de Hanford.	156
Tabela A.3	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,01$ e $\omega_s = 0,01$ para o experimento de Hanford.	157
Tabela A.4	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,003$ e $\omega_s = 0,003$ para o experimento de Hanford.	158
Tabela A.5	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,003$ e $\omega_s = 0,01$ para o experimento de Hanford.	159
Tabela A.6	Dados micrometeorológicos do experimento de Copenhagen [Gryning e Lyck, 1984].	168
Tabela A.7	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 1,0$ e $\omega_s = 1,0$ para o experimento de Copenhagen.	169
Tabela A.8	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$ para o experimento de Copenhagen.	170
Tabela A.9	Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,15$ para o experimento de Copenhagen.	171

Tabela A.10 Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,3$ e $\omega_s = 0,1$ para o experimento de Copenhagen.	172
--	-----

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ADMM	<i>Advection Diffusion Multilayer Method</i>
AERMIC	<i>American Meteorological Society/Environmental Protection Agency Regulatory Model Improvement Committee</i>
AERMOD	<i>AERMIC Model</i>
AL	Atmosfera Livre
ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica
CALPUFF	<i>California Puff Model</i>
CISP	<i>Calcolo dell'Impatto di una Sorgente Puntuale</i>
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CM	Camada de Mistura
CO	Monóxido de carbono
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
CR	Camada Residual
CS	Camada Superficial
GITT	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>
GILTT	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
GNL	Gás Natural Liquefeito
INEL	<i>Idaho National Engineering Laboratory</i>
LORM	Luiz Oscar Rodrigues de Melo
NO _x	Óxidos de nitrogênio
NO ₂	Dióxido de nitrogênio
OLAD	<i>Over-Land Atmospheric Dispersion</i>
PROMECA	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
SF ₆	Hexafluoreto de enxofre
SO _x	Óxidos de enxofre
SPM	<i>Skewed Puff Model</i>
TRS	Compostos reduzidos de enxofre (<i>Total Reduced Sulphur</i>)
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul

UTE	Usina Termelétrica
UTM	Universal Transversa de Mercator
ZnS	Sulfeto de zinco

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A	Constante, $A = 0, 2$
a	Inclinação da reta obtida por regressão linear
B	Constante, $B = 2, 5$
b	Intersecção da reta obtida por regressão linear com o eixo Oy
C	Constante, $C = 8, 0$
\bar{C}	Concentração média de um contaminante passivo na pluma, g/m^3
C_i	$C_i = \alpha_i(0, 5 \pm 0, 05)(2\pi k)^{-2/3}$
C_o	Concentrações observadas experimentalmente, g/m^3
C_p	Concentrações preditas pelo modelo, g/m^3
COR	Coefficiente de correlação
\bar{c}	Concentração média de um contaminante passivo no <i>puff</i> , g/m^3
F	$F = [1 - (16z/L)]^{1/4}$
$FA2$	Fator de dois
FB	Fração de inclinação
$F_i^E(n)$	Espectro de energia euleriana normalizado pela variância da velocidade euleriana, s
FS	Desvio fracional padrão
f	Frequência adimensional
f_c	Força de Coriolis
$(f_m^*)_i$	Frequência normalizada do pico espectral independentemente da estratificação
$(f_m)_i$	Frequência do pico espectral, s
$(f_m)_{n,i}$	Frequência do pico espectral na estratificação neutra, s
G	Constante
g	Aceleração da gravidade, m/s^2
H_s	Altura da fonte, m
h	Altura da camada limite estável, m
i	Indica as velocidades u , v e w
K_α	Coefficiente de difusão generalizado, onde α indica as direções

	x, y e z , m^2/s
K_x	Coeficiente de difusão na direção x , m^2/s
K_y	Coeficiente de difusão na direção y , m^2/s
K_z	Coeficiente de difusão na direção z , m^2/s
K_0	Constante
K_1	Coeficiente de difusão avaliado na altura z_1 , m^2/s
k	Constante de von Kármán
k_3	Assimetria
k_4	Curtose
L	Comprimento de Obukhov, m
m	Constante relacionada com a instabilidade atmosférica
$NMSE$	Erro quadrático médio normalizado
n	Frequência, s^{-1}
n'	Frequência adimensional
p	Constante relacionada com a rugosidade da superfície
Q	Intensidade da fonte, g/s
\bar{S}	Termo fonte médio
$S_i^E(n)$	Espectro de velocidade euleriana, m^2/s
T	Temperatura, K
t	Variável temporal, s
U	Perfil de velocidade do vento
U_1	Velocidade do vento avaliada na altura z_1 , m/s
\bar{u}	Componente do vento médio orientado na direção x , m/s
u_*	Velocidade de fricção na superfície, m/s
\vec{V}	Vetor de velocidade do vento, m/s
V_d	Velocidade de deposição, m/s
\bar{v}	Componente do vento médio orientado na direção y , m/s
\bar{w}	Componente do vento médio orientado na direção z , m/s
w_*	Escala de velocidade convectiva, m/s
$(\overline{w\theta})_0$	Fluxo de energia na forma de calor na superfície, K.m/s
$(\overline{w'\theta'})_s$	Fluxo de calor cinemático vertical na superfície, K.m/s
X	Distância adimensional da fonte

x	Distância longitudinal da fonte, m
x_0	Coordenada no eixo x onde se encontra a fonte, m
y	Distância lateral da fonte, m
y_0	Coordenada no eixo y onde se encontra a fonte, m
z	Altura acima da superfície, m
z_b	Altura a partir da qual a velocidade do vento é constante, m
z_i	Altura da camada limite convectiva, m
z_t	Altura predeterminada, m
z_0	Comprimento de rugosidade, m
z_1	Altura de na qual K_1 e U_1 são avaliados, m

Símbolos Gregos

α	Indica as direções x , y e z
α_i	Vale 1, $\frac{4}{3}$ e $\frac{4}{3}$ para u , v e w , respectivamente
α_z	Vale 0 ou 1 de acordo com a altura da camada limite z_i
α_1	Constante igual a 1,5
α_2	Constante igual a 1,0
β_i	Razão das escalas de tempo integrais Lagrangeana e Euleriana
β_z	Vale 0 ou 1 de acordo com a altura da camada limite z_i
γ	Gradiente de temperatura potencial acima da camada de mistura, K/m
δ	Funcional delta de Dirac
Θ	Temperatura potencial média, K
κ	Índice estatístico $\kappa = \sqrt{(a-1)^2 + \left(\frac{b}{c_0}\right)^2}$
Λ	Comprimento de Obukhov local, m
$(\lambda_m)_i$	Comprimento de onda
σ_α	Parâmetro de dispersão generalizado, m
σ_i	Desvio padrão da componente da velocidade turbulenta generalizado, m/s
σ_o	Desvio padrão observado
σ_p	Desvio padrão predito
σ_x	Parâmetro de dispersão longitudinal, m
σ_y	Parâmetro de dispersão lateral, m
σ_z	Parâmetro de dispersão vertical, m

τ	Variável temporal, s
Φ_i	Função de similaridade local
ϕ	Latitude da localização da torre
Ψ_m	Função de estabilidade
ψ	Função da taxa de dissipação molecular adimensional
ω_c	Parâmetro de reflexividade na camada limite atmosférica
ω_s	Parâmetro de reflexividade no solo

1 INTRODUÇÃO

Um poluente pode ser definido como qualquer substância que esteja no ar em concentrações altas o suficiente para produzir efeitos mensuráveis e nocivos em seres humanos, animais, plantas ou materiais. Os avanços industriais e tecnológicos provocam uma produção excessiva de poluentes e acarretam o decaimento da qualidade do ar. O impacto ambiental das emissões de poluentes provocados pela combustão de gás natural e carvão está vinculado aos processos de dispersão desses poluentes na atmosfera. A trajetória dos poluentes e sua concentração são estimadas a partir das condições meteorológicas, as quais estão relacionadas à topografia, ao uso e ocupação do solo.

As empresas que produzem energia elétrica decorrente da queima de combustível fóssil ou gás natural devem monitorar e controlar a emissão de poluentes no processo de produção de energia. Pode-se realizar esse monitoramento através de medições, porém estas somente são capazes de fornecer a concentração do poluente em pontos específicos, enquanto um modelo de dispersão permite reconstruir um campo inteiro de concentração em qualquer altura.

O desenvolvimento de modelos matemáticos é indispensável para a gestão ambiental, pois são capazes de calcular o campo de concentrações utilizando dados micrometeorológicos da região observada. Com o aperfeiçoamento das técnicas analíticas e numéricas, os modelos, cada vez mais, se aproximam do fenômeno de dispersão de poluentes na atmosfera, e são utilizados em simulações computacionais capazes de estimar o nível de concentração destes poluentes em tempo real. A partir destas estimativas, esses modelos podem ser utilizados para evitar níveis críticos de poluição, estimar o impacto de novas fontes e, também, validar o estado da qualidade do ar em determinada região.

Cabe ressaltar que os modelos de simulação de dispersão existentes, tais como AERMOD e CALPUFF, além de estarem desatualizados, são baseados em fenômenos meteorológicos do hemisfério norte. É importante salientar, também, que os experimentos de referência utilizados pelos pesquisadores da área de dispersão de poluentes foram, majoritariamente, realizados no hemisfério norte, por exemplo: Hanford, Kinkaid, Prairie-Grass, OLAD, INEL (Estados Unidos da América), Copenhagen (Dinamarca) e Lilleström (Noruega).

Para estimar o campo de concentração de poluentes, a presente pesquisa faz uso da

equação de advecção-difusão, que é obtida através da parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade. A equação de advecção-difusão apresenta o problema de fechamento da turbulência, que pode ser solucionado com a teoria K, baseada na hipótese de transporte por gradiente. A equação de advecção-difusão é considerada determinística e sua solução apresenta apenas valores médios de concentrações, enquanto a dispersão atmosférica é estocástica devido às flutuações naturais que não podem ser reproduzidas por um modelo puramente determinístico.

O modelo proposto neste trabalho faz uso de reflexões parciais nos contornos, que são definidas por parâmetros de reflexão, os quais descrevem uma parametrização para a probabilidade da substância voltar ao domínio. Usualmente, considera-se como condição de contorno vertical fluxo nulo de concentração média ($K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ em $z = 0$ e $z = z_i$), concentração média nula ($\bar{c} = 0$ em $z = z_i$), e no caso de deposição no solo, fluxo de concentração média proporcional à velocidade de deposição V_d ($K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = V_d \bar{c}$ em $z = 0$). Estas condições de contorno podem não ser as mais adequadas, pois uma parcela do material pode ultrapassar a camada limite atmosférica, assim como pode ocorrer infiltração do poluente no solo ou na água. Por este motivo, este modelo, que considera as reflexões parciais, é capaz de reproduzir com precisão mais apurada o fenômeno de dispersão de poluentes, sendo que a deposição não é uma condição na superfície, e sim uma propriedade da própria dinâmica.

A originalidade deste trabalho advém da utilização de reflexões parciais nos contornos verticais, pois não existem pesquisas na área de dispersão de poluentes que consideram este tipo de fenômeno. Ademais, é realizada uma otimização através de índices estatísticos, com o intuito de observar padrões de comportamento para diferentes valores dos parâmetros reflexivos.

No exame de qualificação, que antecedeu esta tese, foram analisados os comportamentos da solução do modelo proposto e os resultados foram comparados com os experimentos de Hanford e Copenhagen. Estes resultados indicaram que o modelo com as reflexões parciais nos contornos ajusta satisfatoriamente as concentrações após as reflexões, de forma que foi dada continuidade à utilização deste modelo. Cabe mencionar que no mesmo exame de qualificação apresentou-se um modelo onde os parâmetros reflexivos eram considerados um fator peso, o qual foi descartado por não cumprir os requisitos necessários de um bom modelo.

O objetivo final da presente pesquisa é utilizar o modelo proposto para simular a dispersão de poluentes emitidos pela Usina Termelétrica Luiz Oscar Rodrigues de Melo (UTE LORM), tal simulação será realizada juntamente com parametrizações realizadas por outros pesquisadores, todos vinculados ao projeto de pesquisa e desenvolvimento em atendimento à lei número 9.991, de 24 de julho de 2000 (alterada pelas leis número 10.438, de 26 de abril de 2002; número 10.848, de 15 de março de 2004; número 11.465, de 28 de março de 2007; número 12.111, de 09 de dezembro de 2009; e número 12.212, de 20 de janeiro de 2010), cuja regulamentação compete à ANEEL.

Em virtude da falta de dados de concentração no entorno da usina termelétrica, serão apresentados apenas os campos de concentração de poluentes, obtidos a partir do modelo proposto em conjunto com os dados meteorológicos coletados por uma torre meteorológica instalada no terreno da usina. Para fins de comparação e validação do modelo, foram utilizados dados meteorológicos e de concentração de uma indústria de celulose, a CMPC Celulose Riograndense.

1.1 Objetivos

O principal objetivo da presente pesquisa é aperfeiçoar um modelo já existente, e idealizado em pesquisa anterior, cujos resultados indicaram uma contribuição significativa na simulação de dispersão de poluentes na atmosfera, de maneira a obter um modelo que incorpore o maior número de características do fenômeno físico possível. A partir desse modelo, objetiva-se a aplicação prática da simulação de dispersão de poluentes emitidos por usinas termelétricas com o propósito de regularização em conformidade à legislação ambiental vigente.

Em uma aplicação direta de modelos de dispersão de poluentes, almeja-se obter o campo de concentração do contaminante em tempo real, sendo que para isto é necessário desenvolver um modelo que tenha baixa exigência computacional e, ainda assim, incorpore diversos aspectos do fenômeno observado. Por este motivo, para simular a dispersão de poluentes emitidos por uma usina termelétrica, será utilizado um modelo matemático semi-analítico, que além da equação de advecção-difusão para modelar a dispersão do poluente na atmosfera, terá vinculado reflexões parciais para simular as interações do ar com o solo e com o topo da camada limite atmosférica. Os modelos, em geral, têm contornos fixos e não permitem incorporar efeitos como adsorção do contaminante no solo, ou

ainda, não consideram que certa quantidade de contaminante ultrapasse a camada limite atmosférica. O modelo estendido que se propõe nesta pesquisa permite a implementação de tais efeitos.

1.2 Organização do Trabalho

Esta tese encontra-se estruturada em 6 capítulos. Na próxima seção deste capítulo apresenta-se uma breve revisão bibliográfica sobre as soluções da equação de advecção-difusão encontradas na literatura especializada. No Capítulo 2 discorre-se sobre o desenvolvimento da camada limite atmosférica. O modelo utilizado e as modificações realizadas no modelo gaussiano clássico são descritos no Capítulo 3. Os dados utilizados para comparar os resultados, assim como a parametrização da turbulência e perfil de velocidade do vento são expostos no Capítulo 4. Os resultados numéricos e estatísticos obtidos com o modelo encontram-se no Capítulo 5. No Capítulo 6 apresenta-se a conclusão e perspectivas futuras para a pesquisa. Por fim, no Apêndice A são expostos os resultados apresentados no exame de qualificação, onde comparou-se o modelo com os experimentos de Hanford e Copenhagen.

1.3 Revisão Bibliográfica

A equação de advecção-difusão é amplamente utilizada para descrever a dispersão de poluentes na camada limite atmosférica, e possui diversas soluções, sendo estas essencialmente classificadas em numéricas e analíticas. Algumas características não podem ser observadas nas soluções numéricas [Nieuwstadt e Van Ulden, 1978; Lamb, 1978; Carvalho, 1996], pois certos parâmetros não aparecem explicitamente na solução. Desse modo, nesta seção será apresentada uma revisão bibliográfica acerca das soluções analíticas da equação de advecção-difusão empregadas na dispersão de poluentes.

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

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0 \quad \text{e} \quad z \rightarrow \infty, \quad (1.1)$$

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

atmosférica.

Um dos diversos métodos utilizados para estudar a dispersão atmosférica consistia em capturar fotografias das emissões contínuas ou *puffs* de fumaça. Roberts, 1923, foi um dos pioneiros na utilização deste método, como também da teoria de Taylor, 1922, aplicada ao problema de espalhamento de fumaça na atmosfera, nesse trabalho foi apresentada uma solução bidimensional para fontes ao nível do solo, com velocidade do vento \bar{u} (m/s) e coeficiente de difusão vertical K_z (m²/s) que seguem leis de potência como função da altura

$$\bar{u} = U_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \quad \text{e} \quad K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^p, \quad (1.2)$$

sendo z_1 (m) a altura na qual U_1 (m/s) e K_1 (m²/s) são avaliados, m está relacionado com a instabilidade atmosférica e p com a rugosidade da superfície, ambos variam entre 0 e 1 [Irwin, 1979]. Foram obtidas expressões para as distribuições de densidade a partir de fontes pontuais instantâneas e contínuas, assim como para longas fontes em linha na direção oposta ao vento [Sutton, 1932].

Chamberlain, 1953 *apud* [Overcamp, 1976], efetuou a primeira tentativa de inclusão de deposição seca nos modelos de dispersão de poluentes, modificando a equação para pluma gaussiana. Este trabalho foi baseado nas equações para deposição de partículas finas e gases de Sutton, 1947. Csanady, 1955, 1957, 1958, utilizou a solução gaussiana com deposição para partículas pesadas.

Rounds, 1955, obteve uma solução bidimensional válida para fontes elevadas com o mesmo perfil de vento dado pela Equação 1.2, mas somente com perfis lineares de K_z . Smith, 1957b resolveu a equação bidimensional de transporte e difusão, sendo \bar{u} e K_z funções de potência da altura, com os expoentes destas funções seguindo a lei conjugada de Schmidt (1- expoente de K_z). No mesmo ano, Smith, 1957a, também apresentou uma solução para o caso de \bar{u} constante, mas com o seguinte K_z

$$K_z = K_0 z^{\alpha_z} (z_i - z)^{\beta_z}, \quad (1.3)$$

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

Gifford Jr., 1957, demonstrou que, a partir de fotografias de *puffs* de fumaça, é possível avaliar como o desvio padrão da partícula relativo ao centro do *puff* varia com o tempo sem fazer nenhuma outra suposição sobre a difusão, além de que as partículas

estão distribuídas normalmente dentro da nuvem. Tal suposição é bem sustentada pelas observações.

Cramer et al., 1958 *apud* [Högström, 1964], examinaram detalhadamente resultados de experimentos com traçador e concluíram que a distribuição da substância na direção contrária ao vento não desvia significativamente da lei do erro normal para nenhuma das amostras. Quando este resultado é estendido para 3 dimensões, a equação para a distribuição da substância em um *puff* emitido instantaneamente é

$$\bar{c} = \frac{Q}{2\sqrt{2}\pi^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \exp \left[- \left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2} + \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right) \right], \quad (1.4)$$

onde σ_x , σ_y e σ_z são os parâmetros de dispersão longitudinal, lateral e vertical (m), respectivamente, e Q é a intensidade da fonte (g/s).

Deardorff e Willis, 1975, deduziram, a partir de medidas em laboratório, a difusão a partir de uma fonte próxima ao solo em uma camada de mistura ao longo do dia, fazendo uso de escalas de similaridade para convecção livre na camada limite. Como conclusão, descobriu-se que a distribuição lateral da concentração é muito próxima de uma gaussiana.

Scriven e Fisher, 1975, determinaram uma solução para transporte em longa escala e deposição de contaminantes, onde \bar{u} é considerado constante e K_z é

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

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

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = V_d \bar{c} \quad \text{em} \quad z = 0, \quad (1.6)$$

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

No mesmo ano, Yeh e Huang, 1975 e Berlyand, 1975 apresentaram soluções para um problema bidimensional com fonte elevada, onde \bar{u} e K_z seguiam perfis de potência e a condição de contorno superior era $K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0$ em $z = \infty$. Demuth, 1978, apresentou uma solução em termos de funções de Bessel, considerando uma camada verticalmente limitada. Na Itália, quatro modelos baseados nas soluções de Yeh e Huang, Berlyand e Demuth têm sido adotados: KAPPA-G [Tirabassi et al., 1986], KAPPAG-LT [Tirabassi et al., 1989], CISP (*Calcolo dell'Impatto di una Sorgente Puntuale*) [Tirabassi e Rizza, 1992] e MAOC [Tirabassi e Rizza, 1993]. Recentemente, Lin e Hildemann, 1997, estenderam as soluções

de Yeh e Huang e Berlyand para o caso de deposição seca no solo. Estas soluções foram formuladas em termos de funções modificadas de Bessel.

Overcamp, 1976, modificou o modelo de pluma gaussiana para considerar deposição de partículas finas, partículas pesadas e gases, combinando uma pluma inclinada para baixo para considerar a sedimentação e também uma velocidade de deposição constante. Ermak, 1977, obteve a solução analítica da equação de difusão atmosférica com coeficientes difusivos como função da distância na direção do vento e velocidade média do vento constante. A deposição de poluentes no solo é considerada, incluindo um termo de sedimentação gravitacional, e também aplicando uma condição de contorno absorvente na superfície do solo. No mesmo ano, Horst, 1977, modificou os modelos atuais de depleção da fonte (*source depletion model*), que diminuem a pluma na dimensão vertical, para um modelo que diminui a pluma gaussiana na vizinhança da superfície de deposição (*surface depletion model*).

Adaptando a teoria da similaridade de Monin-Obukhov, Van Ulden, 1978, obteve a solução para a difusão vertical a partir de fontes contínuas próximas ao solo, supondo que \bar{u} e K_z seguem perfis de similaridade. Seus resultados são equivalentes aos de Roberts, 1923, no entanto obteve um modelo para fontes não superficiais, porém aplicável para fontes dentro da camada superficial.

Nieuwstadt, 1980, apresentou uma solução para um problema unidimensional dependente do tempo, utilizando os polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado por

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

onde G é uma constante e u_* é a velocidade de fricção (m/s). Nieuwstadt e Haan, 1981 utilizaram os polinômios de Jacobi para estender a solução para o caso de crescimento da altura da camada limite.

Koch, 1989, desenvolveu uma solução analítica bidimensional para uma fonte ao nível do solo, na qual o vento e as difusividades seguem os perfis de potência, incluindo os efeitos de absorção de contaminante pelo solo. Chrysikopoulos et al., 1992, apresentaram uma solução tridimensional para uma fonte aérea contínua ao nível do solo, com \bar{u} e K_z dados pelas Equações 1.2, incluindo um termo para deposição seca.

Ainda em 1992, Van Ulden, 1992 propôs uma solução aproximada para a dispersão de poluentes de contaminantes passivos liberados por uma fonte instantânea próxima ao

solo, descrevendo o campo de concentração como uma soma de *puffs*. Esta solução foi utilizada por Tirabassi e Rizza, 1995, no modelo chamado SPM - *Skewed Puff Model*. Os mesmos autores, em 1997, desenvolveram um modelo *puff* não-gaussiano utilizando a expansão de Gram-Charlier para o campo de concentração e o sistema finito de equações para os momentos correspondentes [Tirabassi e Rizza, 1997]. Com base nesta metodologia, foi criado um modelo para aplicações sobre terreno complexo com turbulência não-homogênea, que foi denominado CALPUFF - *California Puff Model* [Scire et al., 2000], que tem sido acoplado a modelos atmosféricos.

Os modelos desenvolvidos por Sharan et al., 1996a, e Sharan et al., 1996b, apresentam soluções em termos de funções de Bessel e combinações lineares da função de Green. Os coeficientes de difusão utilizados eram constantes e foram realizadas parametrizações em termos de distância da fonte. Sharan e Yadav, 1998, descreveram o processo de dispersão em condições de ventos fracos utilizando coeficientes de difusão como função linear da distância da fonte. O modelo de Cirillo e Poli, 1992, forneceu resultados idênticos comparados com os dados do experimento de INEL (*Idaho National Engineering Laboratory*) [Sagendorf e Dickson, 1974].

Stevens, 2000, apresentou uma solução analítica para um modelo de camada limite atmosférica com um perfil para o coeficiente de difusividade e fluxos não-locais em um regime semi-estacionário. As soluções mostram como os diferentes processos contribuem para os perfis semi-uniformes de calor e/ou outros escalares na camada limite convectiva.

Moura et al., 1995, propuseram uma solução analítica para a equação unidimensional dependente do tempo para a dispersão de contaminantes em uma camada limite estável. Para obter os resultados, foi aplicada a transformada de Laplace e utilizado um coeficiente de difusão K_z constante, proposto por Degrazia e Moraes, 1992. Posteriormente, Pires, 1996, apresentou uma solução similar para uma camada limite convectiva, utilizando o coeficiente difusivo de Degrazia et al., 1995. Moreira, 1996, propôs uma solução para o caso bidimensional estacionário usando o mesmo artifício dos trabalhos anteriores, também na camada limite convectiva. A técnica utilizada recebe o nome de ADMM - *Advection Diffusion Multilayer Method*, e tem sido amplamente utilizada para simular a dispersão de poluentes na atmosfera [Vilhena et al., 1998; Degrazia et al., 2001; Moreira et al., 2004, 2005a,b, 2006b; Buligon, 2004; Buligon et al., 2006; Ferreira Neto, 2003; Costa, 2004; Costa et al., 2008].

Outras duas importantes técnicas na obtenção das soluções da equação de advecção-difusão são GITT - *Generalized Integral Transform Technique* e GILTT - *Generalized Integral Laplace Transform Technique*, cujos trabalhos mais relevantes são: [Wortmann et al., 2005; Moreira et al., 2006a; Buske et al., 2007a,b; Tirabassi et al., 2008; Buske et al., 2007c; Tirabassi et al., 2009; Moreira et al., 2009a,b; Buske et al., 2010].

2 MICROMETEOROLOGIA E DISPERSÃO DE POLUENTES

A maneira como um poluente será dispersado é majoritariamente determinada pelos fenômenos físicos que ocorrem na atmosfera, além da topografia do terreno. Por esse motivo faz-se necessário a compreensão da atmosfera e dos fenômenos físicos que nela ocorrem, para então avaliar a dispersão de poluentes.

Os 100 km da atmosfera mais próximos da Terra constituem a baixa atmosfera, também conhecida como homosfera, que é dividida em quatro partes e, em ordem de proximidade da Terra, são: troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera. Os fenômenos físicos mencionados anteriormente ocorrem na troposfera, que é a região que compreende desde o solo até uma altitude de aproximadamente 11 km, e é dividida em duas partes, a *camada limite atmosférica* e a *atmosfera livre* (Figura 2.1).

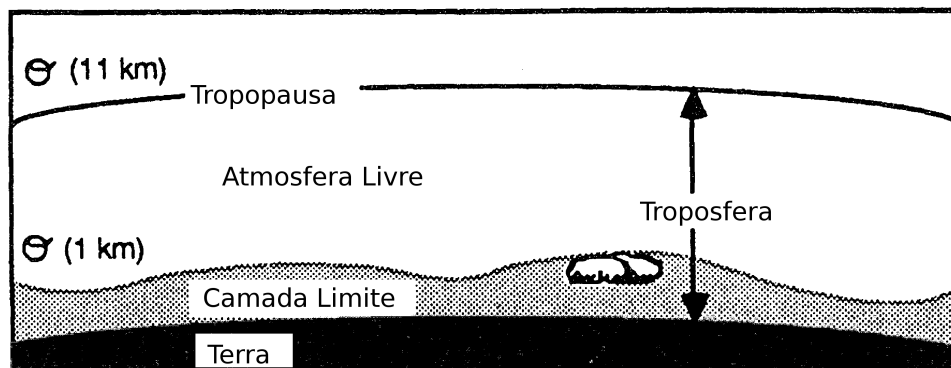


Figura 2.1 – Divisão da troposfera. [Adaptado de Stull, 1988]

A camada limite atmosférica (CLA) compreende a região a partir da superfície da Terra até cerca de 100 a 3000 m de altitude. O restante da troposfera é a atmosfera livre (AL), onde o fluxo de ar não é turbulento, apesar de ser influenciada pela CLA que tem características predominantemente turbulentas.

O topo da CLA é usualmente definido como a altura onde a turbulência desaparece ou se torna insignificante. Próximo à superfície, a turbulência atmosférica se manifesta pela agitação das folhas de árvores, balanço de galhos de árvores e plantas, movimentos irregulares de fumaça e partículas de poeira, geração de ondas na superfície da água, e uma variedade de outros fenômenos visíveis. Na parte superior da CLA a turbulência se manifesta pelos movimentos irregulares de pipas e balões, espalhamento de fumaça e outros poluentes visíveis quando são emitidos por fontes altas [Arya, 1999].

2.1 Camada Limite Atmosférica

Stull, 1988, define a camada limite atmosférica como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da Terra e responde aos forçantes da superfície com uma escala de tempo de cerca de uma hora ou menos. A espessura da CLA muda durante todo o dia, variando de algumas centenas de metros até alguns quilômetros. A temperatura nas proximidades do solo também varia significativamente, e é influenciada pelo calor específico do solo e do ar, e por processos de transferência de energia, tais como condução, radiação, turbulência mecânica e térmica, e advecção [Jacobson, 2005].

Na CLA o transporte é dominado pela advecção e pela turbulência, que consiste em diversos turbilhões de tamanhos diferentes sobrepostos. As forças relativas destes turbilhões com diferentes escalas definem o espectro de energia turbulenta. Particularmente, na superfície acima do continente a estrutura da turbulência na CLA é fortemente influenciada pelo ciclo diurno de aquecimento e resfriamento da superfície, e pela presença de nuvens [Garratt, 1992].

Nas regiões de alta pressão, a camada limite atmosférica tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia. Normalmente, em um período de 24 horas, a camada limite atmosférica pode ser classificada quanto aos seus regimes de estabilidade como: camada limite convectiva (ou camada de mistura), camada residual e camada limite estável, tal qual exemplificado na Figura 2.2. Quando há presença de nuvens na camada de mistura, ela é subdividida em camada de nuvens, onde aparecem as nuvens, e a região abaixo é a subcamada de nuvens. Uma nuvem se forma quando o ar ascendente em uma terma resfriar o suficiente. Uma inversão pode impedir que uma nuvem suba além da camada de mistura [Jacobson, 2005].

2.2 Regimes de Estabilidade

2.2.1 Camada Limite Convectiva

A camada limite convectiva (CLC) começa a se desenvolver após o nascer do sol. O aquecimento da superfície da Terra forma termas de ar quente que se elevam, modificando o topo da CLA. Essa estrutura convectiva dura o dia todo e termina ao pôr do sol, quando o fluxo de calor torna-se negativo. No meio da tarde, a camada limite convectiva pode

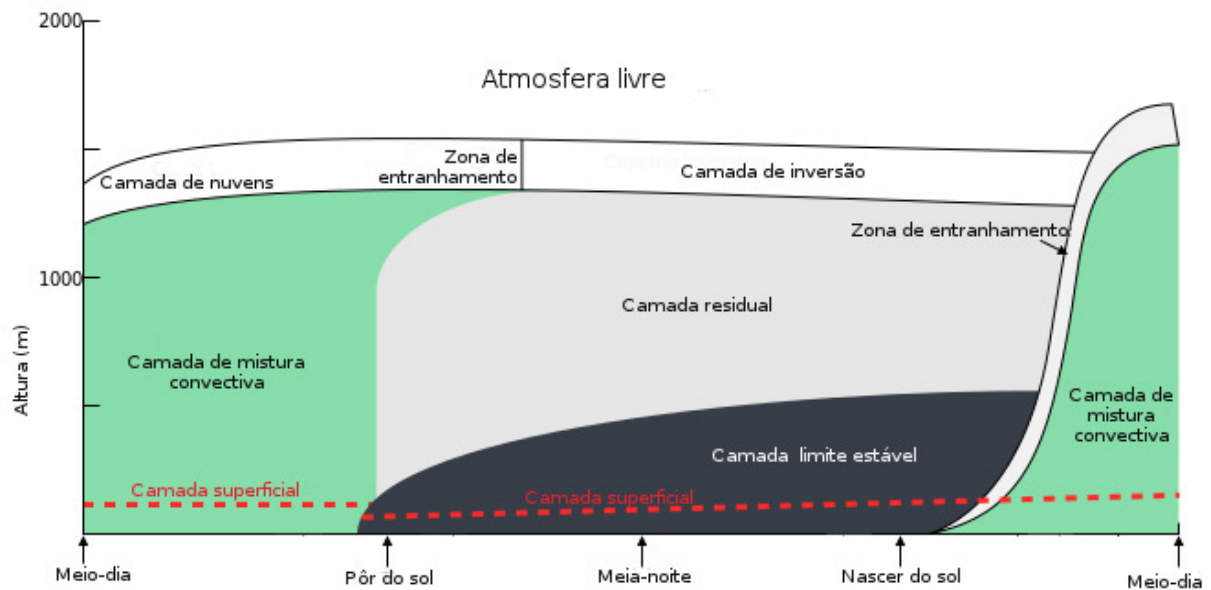


Figura 2.2 – Evolução diária da camada limite atmosférica. [Adaptado de Stull, 1988]

atingir a altura de 1000 a 2000 m. É possível definir camada limite convectiva como a região da baixa atmosfera que se estende do solo ($z = 0$) até a altura onde ocorre fluxo de calor negativo ($z = z_i$, onde z_i (m) é a altura do topo da camada limite convectiva), ou seja, até a base de uma inversão térmica. A CLC é caracterizada por uma forte mistura vertical gerada pelo fluxo de calor turbulento positivo, devido ao aquecimento solar da superfície.

A concentração de poluentes pode aumentar significativamente na camada limite convectiva, pois suas fontes geralmente estão próximas da superfície, além de serem transportados pelos turbilhões e termas que alcançam alturas cada vez maiores no decorrer do dia. A camada limite convectiva é dividida em três camadas de acordo com o comportamento da turbulência, da velocidade do vento e das escalas de temperatura.

2.2.1.1 Camada Superficial

A camada superficial (CS) é uma região de vento forte cisalhante que compreende os 10% inferiores da camada limite atmosférica. Dado que a espessura da camada limite atmosférica varia de 500 a 3000 m, a camada superficial tem cerca de 50 a 300 m de espessura, independentemente de fazer parte da camada de mistura ou da camada limite estável [Jacobson, 2005].

O perfil de temperatura na camada superficial é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura durante o dia, e por um aumento da temperatura com a altura durante a noite (inversão térmica). O fluxo de calor turbulento é aproximadamente constante e há variações significativas (gradientes) de temperatura, velocidade do vento e umidade específica com relação à altura. A direção do vento médio permanece praticamente constante com a altura [Arya, 1999]. O pronunciado gradiente de temperatura é causado pelo rápido aquecimento solar do solo, e é geralmente tão intenso que o ar adjacente ao solo ascende por flutuações e acelera em direção à camada de mistura [Jacobson, 2005].

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

$$L = -\frac{u_*^3}{k \frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0}, \quad (2.1)$$

onde u_* é a velocidade de fricção da superfície (m/s), k é a constante de von Kármán, g é a aceleração da gravidade (m/s²), Θ é a temperatura potencial média (K) e $(\overline{w\theta})_0$ é o fluxo de energia na forma de calor na superfície (K.m/s).

Sob condições neutras, a CS é caracterizada por um perfil de vento logarítmico e perfis quase uniformes de fluxo de momentum (com respeito à altura) e desvio padrão das flutuações da velocidade turbulenta. A condição de estabilidade neutra é uma exceção e não uma regra na baixa atmosfera. Mais frequentemente a troca turbulenta de calor entre a superfície e a atmosfera levam à estratificação térmica na camada superficial e, até certo ponto, em toda a CLA [Arya, 1999].

2.2.1.2 Camada de Mistura

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

(m/s), que é expressa por

$$w_* = \left[\frac{g}{\Theta} (\overline{w\theta})_0 z_i \right]^{1/3}. \quad (2.2)$$

A escala de tempo convectiva z_i/w_* é da ordem de 10 a 20 minutos, este é um típico período de tempo para o ar circular entre a superfície e o topo da camada de mistura. As dimensões dos grandes turbilhões convectivos são expressas em função de z_i , e as velocidades turbulentas são proporcionais a w_* . Valores típicos de z_i e w_* são, respectivamente, 1000 a 2000 m e 2 m/s [Weil e Brower, 1984].

Na CM o gradiente de temperatura não é forte o suficiente para permitir convecção irrestrita, mas também não é fraca o suficiente para impedir alguma convecção. Sob tal condição, a atmosfera é neutramente estratificada e parcelas de ar podem se misturar para cima ou para baixo, mas não aceleram em nenhuma direção. Quando um sistema de alta pressão está presente, uma inversão ascendente de larga escala está presente acima da CM [Jacobson, 2005].

2.2.1.3 Zona de Entranhamento

Região de ar estável no topo da camada de mistura, onde existe entranhamento de ar da atmosfera livre para baixo e penetração convectiva das plumas térmicas¹ para cima. Nesta zona, a estrutura da turbulência pode ser dominada por efeitos de entranhamento, pelas características da camada de inversão e pela atmosfera estável acima. A zona de entranhamento tipicamente se estende de $0,9z_i$ a $1,2z_i$, contudo os limites superior e inferior podem variar em uma faixa mais ampla [Arya, 1999].

2.2.2 Camada Residual

A camada residual (CR) é formada por volta de meia hora antes do pôr do sol, quando as circulações convectivas (termas) cessam, permitindo que a turbulência decaia. A camada residual não permanece em contato com o solo, mas tem sua base modificada pelo avanço da camada limite estável, que surge durante a noite. A camada resultante é neutramente estratificada e a turbulência existente apresenta intensidade praticamente igual em todas as direções, com taxas de dispersão iguais tanto no sentido horizontal quanto no vertical.

¹Ar quente que se eleva até a base de uma inversão térmica.

2.2.3 Camada Limite Estável

A camada limite estável (CLE) é formada ao anoitecer, em decorrência do resfriamento da superfície terrestre, que provoca um fluxo de calor negativo (inversão térmica) e extrai energia cinética dos grandes turbilhões, permitindo que somente pequenos turbilhões sobrevivam. Logo, a turbulência na camada limite estável é menos intensa que na camada limite convectiva, e conseqüentemente, poluentes emitidos na camada limite estável se dispersam lentamente na direção vertical e, mais rapidamente, na horizontal.

Em condições estáveis, a camada limite não é identificada tão facilmente, já que a turbulência é muito mais fraca do que no caso instável. Conseqüentemente, sua profundidade não ultrapassa algumas centenas de metros. À noite, na superfície acima do continente, sob céu limpo e vento fraco, pode ser ainda menor, não mais que 50 a 100 m e fortemente influenciada pelos movimentos de ondas de gravidade internas [Garratt, 1992].

2.2.4 A Estrutura da Turbulência na Camada Limite Convectiva

A turbulência na baixa atmosfera difere da turbulência estudada nos túneis de vento de duas formas. Primeiramente, a turbulência associada à convecção térmica coexiste com a turbulência mecânica. Em segundo lugar, a turbulência da camada limite interage com um escoamento médio que é influenciado pela rotação da Terra [Garratt, 1992]. A turbulência ocorre devido ao cisalhamento do vento (turbulência mecânica) e às flutuações (turbulência térmica), e mistura verticalmente e horizontalmente gradientes de momentum, energia, umidade, gases e partículas [Jacobson, 2005].

Na camada limite convectiva, o aquecimento solar da superfície terrestre gera fluxo de calor sensível turbulento, que dá origem a uma estrutura de plumas térmicas circundadas por ar mais frio, que desce do topo das nuvens em direção ao solo. Para condições suficientemente instáveis, estas estruturas são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional.

A área da camada limite convectiva é ocupada por, aproximadamente, 40% de corrente térmica de ar ascendente (*updrafts*) e 60% por ar mais frio que desce (*downdrafts*). Pela lei de conservação de massa, o ar quente subindo tem uma velocidade maior que o ar frio descendente. A circulação convectiva, incluindo o *downdraft* e o *updraft*, tem escalas

horizontais de $1,5z_i$ [Caughey e Palmer, 1979]. Velocidades verticais em termos podem alcançar 5 m/s ou mais, embora *updrafts* de 1 a 2 m/s sejam os mais comuns [Stull, 1988].

3 MODELO PARA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

3.1 Modelo Físico-Matemático

A modelagem do fenômeno de dispersão de poluentes é implementada através da equação de advecção-difusão que pode ser obtida a partir da equação da continuidade. Para tal, é utilizada a decomposição de Reynolds, que expressa a concentração e as velocidades como a soma de suas médias e flutuações, e também faz-se uso do fechamento Fickiano para turbulência, que pressupõe um fluxo turbulento de concentração proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. No presente trabalho, os coeficientes difusivos K_x , K_y e K_z (m^2/s) são considerados localmente constantes, desta forma, a equação de advecção-difusão é expressa por [Arya, 1999; Stull, 1988]

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \bar{S}, \quad (3.1)$$

onde \bar{c} é a concentração média do poluente (g/m^3), \bar{u} , \bar{v} e \bar{w} são as componentes de vento médio (m/s) orientadas nas direções x , y e z , respectivamente, e \bar{S} é o termo fonte. O desenvolvimento a partir da equação da continuidade, considerando a decomposição de Reynolds e o fechamento Fickiano, até obter-se a equação de advecção-difusão (Equação 3.1) pode ser encontrado em [Loeck, 2014].

Para modelar uma emissão instantânea, também conhecida como *puff*, o termo fonte pode ser descrito por uma condição inicial instantânea denotada pelas funções delta de Dirac. Considerando tal condição inicial e também que os coeficientes difusivos variam seccionalmente com a altura, ou seja, são localmente constantes, e dependem somente de z , obtém-se o seguinte problema de valor inicial

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = K_x \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \quad (3.2a)$$

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = Q\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - H_s), \quad (3.2b)$$

onde x_0 e y_0 são as coordenadas da localização da fonte no plano cartesiano (m) e H_s é a altura da fonte (m). Tal problema de valor inicial pode ser resolvido através do método de separação de variáveis [Özisik, 1974] e da transformada de Fourier [Seinfeld e Pandis,

2006], e tem como solução

$$\bar{c}(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z t^3}} \exp \left[-\frac{(x - x_0 - \bar{u}t)^2}{4K_x t} - \frac{(y - y_0 - \bar{v}t)^2}{4K_y t} - \frac{(z - H_s - \bar{w}t)^2}{4K_z t} \right]. \quad (3.3)$$

A resolução completa da Equação 3.2a com a condição inicial dada pela Equação 3.2b pode ser encontrada em [Loeck, 2014].

A maioria dos problemas de dispersão decorrem de fontes de emissão contínua, que podem ser idealizadas como a superposição de emissões instantâneas, ou seja, uma sequência de *puffs*. Considerando que a cada pequeno intervalo de tempo $d\tau$ ocorre uma emissão instantânea, a emissão contínua é aproximada por

$$\bar{C}(x, y, z, t) \propto \int_0^t \bar{c}(x, y, z, t - \tau) d\tau, \quad (3.4)$$

onde \bar{c} é a concentração para emissão instantânea, \bar{C} para a emissão contínua e t é o tempo no qual se quer calcular a concentração. Fazendo uso da Equação 3.3 na Equação 3.4 obtém-se a solução para a emissão contínua, também conhecida como pluma

$$\bar{C}(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t - \tau)^3}} \exp \left\{ -\frac{[x - x_0 - \bar{u}(t - \tau)]^2}{4K_x(t - \tau)} - \frac{[y - y_0 - \bar{v}(t - \tau)]^2}{4K_y(t - \tau)} - \frac{[z - H_s - \bar{w}(t - \tau)]^2}{4K_z(t - \tau)} \right\} d\tau. \quad (3.5)$$

Tal solução é uma superposição de gaussianas, porém diferentemente da solução de pluma gaussiana clássica, [Zannetti, 1990]

$$\bar{C}(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_z\bar{u}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sigma_y} \right)^2 \right] \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{z - H_s}{\sigma_z} \right)^2 \right], \quad (3.6)$$

a solução obtida neste trabalho não desconsidera nenhum termo a partir de hipóteses simplificativas, o que possibilita a utilização de velocidades em outras direções, assim como a obtenção de um perfil completo para a concentração de poluentes. Cabe ressaltar que a superposição de gaussianas não é gaussiana, e também, no caso para a solução do modelo *puff* o fato de K_z ser localmente constante torna a solução gaussiana apenas localmente.

Visto que as soluções dadas pelas Equações 3.3 e 3.5 são obtidas através da transformada de Fourier, são válidas para o domínio vertical infinito $z \in (-\infty, \infty)$, porém a

camada limite atmosférica e o solo limitam a dispersão, de forma que é necessário mapear o intervalo infinito para o intervalo finito $z \in [0, z_i]$, onde z_i (m) é a altura do topo da camada limite atmosférica.

3.2 Parâmetros Reflexivos

Para justificar o mapeamento do intervalo infinito $z \in (-\infty, \infty)$ para o finito $z \in [0, z_i]$, primeiramente consideramos um corte na distribuição em $z = 0$ e $z = z_i$, respectivamente. Geralmente as condições de contorno para o problema de dispersão de poluentes são fluxo zero ou concentração zero nos contornos, contudo a hipótese de Fick sugere que deveria haver algum fluxo pelos contornos. Neste sentido, reproduzimos da observação que a camada até a altura onde ocorre a inversão de temperatura pode ser considerada pelo menos parcialmente desacoplada do sistema de fluxo de vento acima. Logo, em um sistema dissociado ideal, a contribuição perdida deveria ser recuperada ao adotar-se contornos reflexivos, os quais intuitivamente concordam com um conjunto de partículas simples, onde o poluente que atinge o solo ou o topo da camada limite atmosférica retorna completamente para o domínio. Para as distribuições isto significa que, mesmo após as reflexões, as caudas das gaussianas que ultrapassam o domínio são espelhadas de volta para o intervalo finito $z \in [0, z_i]$.

Formalmente, as reflexões no solo e na camada limite atmosférica podem ser interpretadas como contribuições devido à fontes virtuais em algumas alturas efetivas em ambos os lados, abaixo do solo e acima da camada limite atmosférica [Barratt, 2001], estas alturas são os centros das gaussianas formadas no solo e no topo da camada limite atmosférica, como exemplificado nas Figuras 3.1, 3.2 e 3.3. As sequências que representam o máximo da imagem são

$$\left. \begin{array}{l} H_s \rightarrow -H_s - 2nz_i \\ H_s \rightarrow H_s + 2nz_i \end{array} \right\} \forall n \in \mathbb{Z}. \quad (3.7)$$

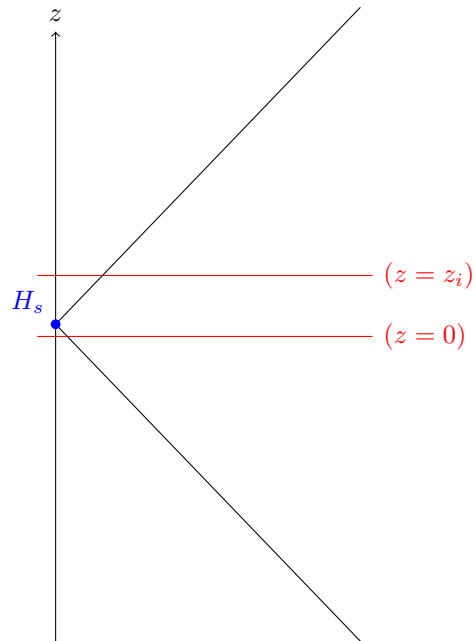


Figura 3.1 – Esquema para a dispersão baseado em domínio vertical ilimitado.

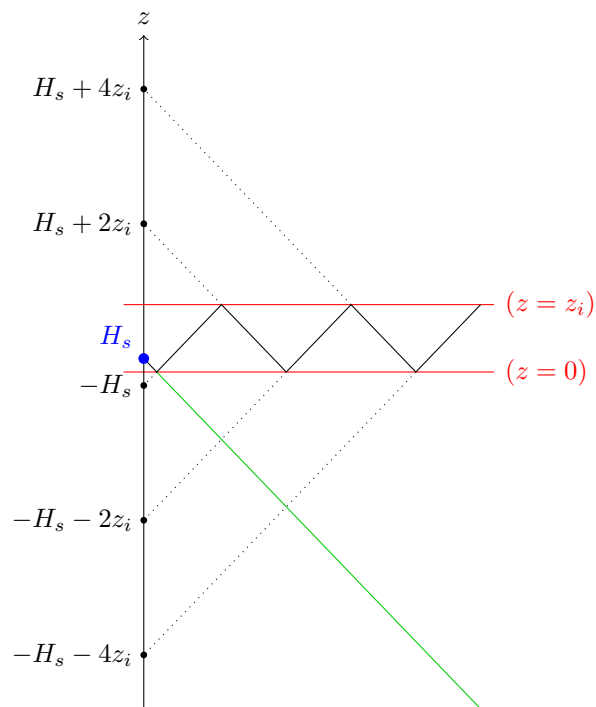


Figura 3.2 – Esquema para a reflexão completa com início no solo.

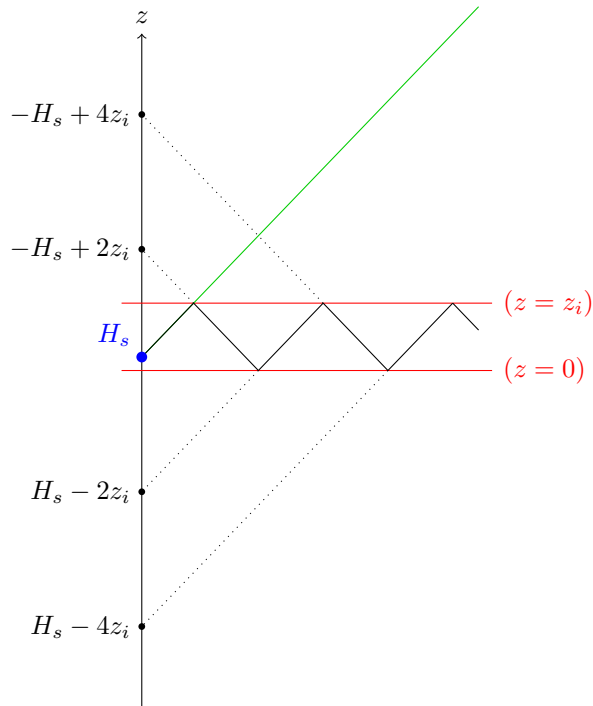


Figura 3.3 – Esquema para a reflexão completa com início no topo da camada limite atmosférica.

Substituindo as duas seqüências representadas pela Equação 3.7 na solução para emissão contínua descrita pela Equação 3.5, obtém-se a solução para emissão contínua com reflexão completa

$$\begin{aligned} \bar{C}(x, y, z, t) = \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-\tau)^3}} \exp\left(-\frac{[x-x_0-\bar{u}(t-\tau)]^2}{4K_x(t-\tau)}\right. \\ \left.-\frac{[y-y_0-\bar{v}(t-\tau)]^2}{4K_y(t-\tau)}\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{[z-H_s-2nz_i-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)}\right) \right. \\ \left. + \exp\left(-\frac{[z+H_s+2nz_i-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)}\right) \right] d\tau, \end{aligned} \quad (3.8)$$

e agora é válida para $x \in (-\infty, \infty)$, $y \in (-\infty, \infty)$ e $z \in [0, z_i]$.

Observa-se nas figuras expostas que estas reflexões fazem analogia à reflexão especular, no entanto a camada limite atmosférica não produziria esse efeito, sendo necessário um efeito similar à reflexão difusa. Contudo, as trajetórias do poluente não são abordadas, tornando sua implementação complexa. Algo semelhante pode ser desenvolvido da mesma maneira que as reflexões parciais, que serão apresentadas na próxima subseção.

3.2.1 Parâmetros Parcialmente Reflexivos

Até o momento, o modelo não representa nenhuma propriedade que poderia estar associada a um efeito de alguma característica estocástica. Como alternativa a uma camada limite com limites constantes, é possível simular uma amostra de uma distribuição com diferentes alturas de camada limite ao mudar a posição das imagens refletidas que compõem o total das distribuições. Para este fim, são introduzidos os fatores de redução ω_c e ω_s nas sequências descritas pela Equação 3.7, onde ω_c representa o fator de redução na camada limite atmosférica e ω_s no solo. As Figuras 3.4 e 3.5 ilustram o comportamento das reflexões parciais que iniciam na camada limite e no solo, respectivamente, onde $\omega_c > \omega_s$. Observe nas figuras que a reflexão parcial é análoga à reflexão difusa.

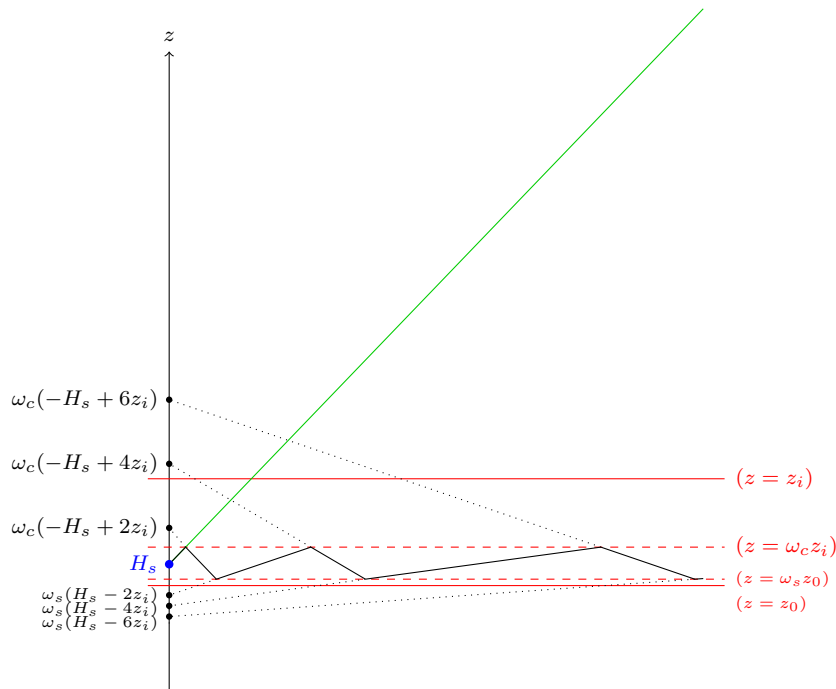


Figura 3.4 – Esquema para a reflexão parcial com início na camada limite atmosférica.

É importante compreender que, quando $n = 0$ nas sequências que representam as reflexões, o modelo ainda considera a contribuição de uma fonte virtual localizada em $z = -\omega_s H_s$. Já quando $n = 1$, além da reflexão referente à fonte virtual, existem outras quatro reflexões ocorrendo. Quando a reflexão inicia no solo tem-se mais duas reflexões com centro em $z = \omega_c(H_s + 2z_i)$ e em $z = \omega_s(-H_s - 2z_i)$. Para a reflexão que inicia na camada limite, as reflexões têm centro em $z = \omega_c(-H_s + 2z_i)$ e $z = \omega_s(H_s - 2z_i)$.

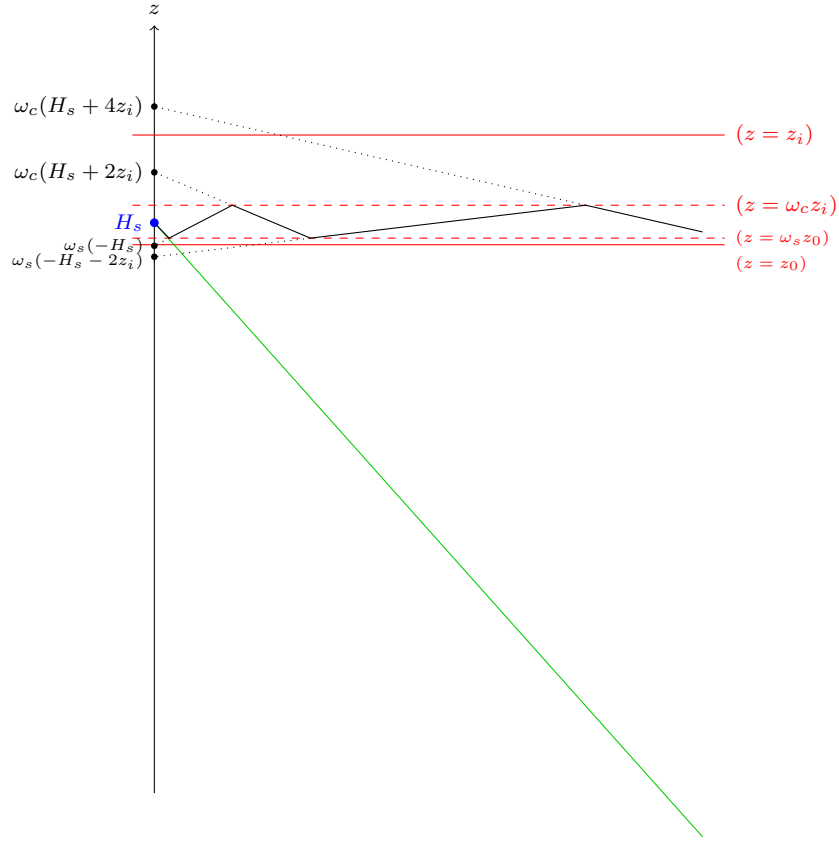


Figura 3.5 – Esquema para a reflexão parcial com início no solo.

Note que o sistema mantém sua característica determinística, porém limitadas amostras de configurações da camada limite com diferentes alturas e centros podem ser interpretadas como uma manifestação de estocasticidade, que são usadas para estudar o comportamento da nova solução. Desta forma, a solução para emissão contínua com reflexão parcial nos contornos estocásticos é dada por

$$\begin{aligned}
 \bar{C}(x, y, z, t) = & \frac{Q}{\sqrt{64\pi^3 K_x K_y K_z}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{(t-\tau)^3}} \exp\left(-\frac{[x-x_0-\bar{u}(t-\tau)]^2}{4K_x(t-\tau)}\right. \\
 & \left. -\frac{[y-y_0-\bar{v}(t-\tau)]^2}{4K_y(t-\tau)}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{[z-H_s-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)}\right) \right. \\
 & \left. + \exp\left(-\frac{[z+\omega_s H_s-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)}\right) \right. \\
 & + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^1 \left[\exp\left(-\frac{[z-\omega_c((-1)^m H_s+2nz_i)-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)}\right) \right. \\
 & \left. + \exp\left(-\frac{[z+\omega_s((-1)^m H_s+2nz_i)-\bar{w}(t-\tau)]^2}{4K_z(t-\tau)}\right) \right] \Bigg\} d\tau. \tag{3.9}
 \end{aligned}$$

4 DADOS PARA COMPARAÇÃO E VALIDAÇÃO DO MODELO

Ao trabalhar com modelos matemáticos, é imprescindível que estes modelos sejam comparados e validados com estudos e medições já realizadas anteriormente. Em um primeiro momento, comparou-se o modelo apresentado com os experimentos de Hanford [Doran e Horst, 1985] e Copenhagen [Gryning e Lyck, 1984]. Os resultados podem ser considerados satisfatórios e estão relacionados no Apêndice A.

Dando continuidade à pesquisa, o modelo proposto, juntamente com os dados coletados pela torre meteorológica instalada nas proximidades da Usina Termelétrica Luiz Oscar Rodrigues de Melo (UTE LORM), seria utilizado na simulação da dispersão de poluentes e, conseqüentemente, na comparação com dados de concentração. No entanto, os dados de concentração não estavam disponíveis em tempo de utilizá-los no presente trabalho. Como consequência, os dados meteorológicos fornecidos foram utilizados apenas para simular o modelo proposto e gerar o campo de concentração de poluentes no entorno da usina. A fim de validar o modelo proposto de forma mais realista e com dados meteorológicos situados no hemisfério sul, fez-se uso de dados fornecidos pela empresa de celulose CMPC Celulose Riograndense, localizada em Guaíba - RS.

A comparação entre modelo e medições é realizada através de alguns índices estatísticos, que também serão apresentados neste capítulo. Além disso, neste capítulo efetua-se a demonstração para a obtenção do coeficiente de difusão generalizado, assim como são expostos os perfis de velocidade de vento utilizados nas simulações.

4.1 CMPC Celulose Riograndense

A CMPC Celulose Riograndense produz celulose e papel, e como consequência emite na atmosfera material particulado, óxidos de nitrogênio (NOx), óxidos de enxofre (SOx) e compostos reduzidos de enxofre (TRS), sendo que o último emite forte odor característico e foi o poluente utilizado nas simulações, pois é um composto específico das indústrias de celulose, e portanto não há contribuição externa. Os poluentes oriundos da fabricação de celulose são emitidos continuamente por 3 fontes de alturas diferentes, as localizações das fontes e suas respectivas taxas de emissão de TRS encontram-se na Tabela 4.1.

A estação de monitoramento e qualidade do ar está localizada em $x = 468011$ m

Tabela 4.1 – Dados das fontes da CMPC Celulose Riograndense.

Fonte	x (m) (UTM)	y (m) (UTM)	Altura (m)	Emissão (g/s)
Fonte 01	469295,42	6666428,61	120	0,219444
Fonte 02	469585,75	6666333,73	150	0,219444
Fonte 03	469961,31	6666487,15	145	0,219444

e $y = 6668548,98$ m do fuso SH22 e meridiano central -51 no sistema de coordenadas UTM (Universal Transversa de Mercator), isto é, aproximadamente 2 km de distância das fontes. A estação coleta dados micrometeorológicos de hora em hora, sendo que para a comparação foram utilizados apenas os dados onde a direção do vento tem orientação leste-sul, pois coincide com a localização da estação. O comprimento de rugosidade do terreno foi considerado $z_0 = 1,0$ m, que é um típico valor para terreno urbano com poucas edificações. A altura simulada é de $z = 3,0$ m, pois o instrumento de medição das concentrações se encontra nesta altura.

No total realizou-se 6 simulações, sendo 3 delas sob condições estáveis e as outras 3 sob condições convectivas. Os dados das simulações são apresentados nas Tabelas 4.2 a 4.7.

4.1.1 Condições Estáveis

Tabela 4.2 – Dados micrometeorológicos da Simulação 01, coletados no dia 28/01/16.

Hora	u_* (m/s)	h (m)	L (m)	$ V $ (m/s)	Direção do vento (° com o eixo N)
20	0,4	626	163,5	2,6	129,2
21	0,27	348	61,1	2,1	136,9
22	0,13	129	17,6	1,5	115,6
23	0,27	335	61,2	2,1	128,3
24	0,13	126	17,6	1,5	124,4

Tabela 4.3 – Dados micrometeorológicos da Simulação 02, coletados do dia 03/08/16 ao dia 04/08/16.

Hora	u_* (m/s)	h (m)	L (m)	$ V $ (m/s)	Direção do vento (° com o eixo N)
18	0,5	843	252	3,1	120,1
19	0,58	1060	281,7	3,6	128,9
20	0,48	817	191,2	3,1	128,3
21	0,48	807	191,1	3,1	130,7
22	0,38	575	119,4	2,6	138,6
23	0,38	567	119,5	2,6	137,9
24	0,26	335	57,2	2,1	141,8
1	0,13	126	17,4	1,5	153,5

Tabela 4.4 – Dados micrometeorológicos da Simulação 03, coletados do dia 02/10/16 ao dia 03/10/16.

Hora	u_* (m/s)	h (m)	L (m)	$ V $ (m/s)	Direção do vento (° com o eixo N)
19	0,48	932	193,6	3,1	117,6
20	0,38	587	120,9	2,6	136,1
21	0,48	808	193,2	3,1	124,2
22	0,48	808	193,1	3,1	119,8
23	0,38	576	120,7	2,6	119,1
24	0,48	808	192,9	3,1	128,4
1	0,48	808	192,7	3,1	137
2	0,38	576	120,4	2,6	138
3	0,13	204	17,4	1,5	129,1
4	0,38	568	120,4	2,6	141,9
5	0,13	200	17,4	1,5	148,6
6	0,13	114	17,4	1,5	155,8
7	0,31	408	115,1	2,1	137,8

4.1.2 Condições Convectivas

Tabela 4.5 – Dados micrometeorológicos da Simulação 04, coletados no dia 22/01/16.

Hora	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	$ V $ (m/s)	Direção do vento (° com o eixo N)
11	0,47	2,27	1276	-28,7	2,1	136
12	0,48	2,45	1422	-26,6	2,1	156,7
13	0,48	2,62	1676	-25,9	2,1	130,9
14	0,48	2,74	1960	-26,2	2,1	143,8
15	0,7	2,76	2185	-91,2	3,6	132,1
16	0,85	2,66	2352	-194,2	4,6	119,2
17	0,84	2,43	2458	-255,5	4,6	114,1
18	0,82	2,01	2510	-434,8	4,6	113,2
19	0,63	1,04	2510	-1416,2	3,6	110,7

Tabela 4.6 – Dados micrometeorológicos da Simulação 05, coletados no dia 23/09/16.

Hora	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	$ V $ (m/s)	Direção do vento (° com o eixo N)
10	0,77	1,45	490	-179,2	4,1	169
11	1,03	1,82	767	-349	5,7	166,8
12	0,94	2,22	1258	-235,6	5,1	176,9
13	1,11	2,35	1593	-424,7	6,2	159,2
14	1,12	2,52	1864	-405,2	6,2	150,4
15	1,28	2,47	2063	-710,2	7,2	153
16	1,19	2,26	2120	-766,3	6,7	153,8
17	1,09	1,82	2131	-1153,4	6,2	158,5
18	0,89	0,78	2131	-7951,1	5,1	167,4

Tabela 4.7 – Dados micrometeorológicos da Simulação 06, coletados no dia 10/10/16.

Hora	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	$ V $ (m/s)	Direção do vento (° com o eixo N)
8	0,33	0,9	320	-38,2	1,5	147,7
9	0,35	1,29	440	-22,3	1,5	148,9
10	0,46	1,69	667	-34,2	2,1	137,3
11	0,55	2	940	-47,5	2,6	163,7
12	0,78	2,18	1105	-126,7	4,1	158,4
13	0,94	2,26	1199	-217,2	5,1	164,2
14	1,04	2,26	1282	-306,1	5,7	167,9
15	0,85	2,24	1434	-198,2	4,6	160,8
16	1,02	2,1	1560	-451,4	5,7	144,6
17	1,01	1,76	1614	-756,8	5,7	141,2
18	0,99	0,97	1615	-4396,7	5,7	133,1

4.2 Linhares Geração S.A.

A Linhares Geração S.A. controla a Usina Termelétrica Luiz Oscar Rodrigues de Melo (UTE LORM), antes denominada Usina Termelétrica Linhares, que tem como propósito gerar energia elétrica a partir de gás natural liquefeito (GNL). Na combustão do gás natural há emissão de óxidos de enxofre (SOx), óxidos de nitrogênio (NOx) e monóxido de carbono (CO), sendo que nas simulações foi utilizado dióxido de nitrogênio (NO₂). A UTE LORM é composta por 24 chaminés de emissão contínua, suas localizações e taxas de emissão de NO₂ encontram-se na Tabela 4.8. O comprimento de rugosidade do terreno foi considerado $z_0 = 0,3$ m e as concentrações foram calculadas em $z = 1,0$ m.

Tabela 4.8 – Dados das fontes da UTE LORM.

Fonte	x (m) (UTM)	y (m) (UTM)	Altura (m)	Emissão (g/s)
Fonte 01	416068	7839906	20	2,877
Fonte 02	416067	7839903	20	2,877
Fonte 03	416067	7839901	20	2,877
Fonte 04	416071	7839906	20	2,877
Fonte 05	416070	7839903	20	2,877
Fonte 06	416070	7839900	20	2,877
Fonte 07	416021	7839919	20	2,877
Fonte 08	416020	7839916	20	2,877
Fonte 09	416020	7839913	20	2,877
Fonte 10	416024	7839918	20	2,877
Fonte 11	416023	7839915	20	2,877
Fonte 12	416023	7839912	20	2,877
Fonte 13	415964	7839934	20	2,877
Fonte 14	415963	7839931	20	2,877
Fonte 15	415963	7839929	20	2,877
Fonte 16	415967	7839933	20	2,877
Fonte 17	415966	7839931	20	2,877
Fonte 18	415966	7839928	20	2,877
Fonte 19	415917	7839947	20	2,877
Fonte 20	415916	7839944	20	2,877
Fonte 21	415916	7839941	20	2,877
Fonte 22	415920	7839946	20	2,877
Fonte 23	415919	7839943	20	2,877
Fonte 24	415919	7839940	20	2,877

A torre meteorológica instalada no terreno da usina coleta dados de minuto em minuto em 11 alturas diferentes e está localizada em $x = 415977,97$ m e $y = 7840150,57$ m do fuso SE24 e meridiano central -39 no sistema de coordenadas UTM, aproximadamente 200 m de distância das fontes. Os dados da simulação são apresentados na Tabela 4.9.

Tabela 4.9 – Dados micrometeorológicos simulados para a UTE LORM, coletados no dia 06/08/16.

Hora	u_* (m/s)	w_* (m/s)	z_i (m)	L (m)	$ V $ (m/s)	Direção do vento (° com o eixo N)
0	0,25	0,00	603,37	442,56	1,11	128,70
1	0,35	0,00	630,19	340,95	1,03	26,50
2	0,12	0,00	1959,41	10001,10	0,86	84,10
3	0,19	0,00	158,87	40,80	1,73	102,00
4	0,28	0,00	740,91	589,80	1,34	37,30
5	0,16	0,00	1249,27	2964,41	1,06	134,10
6	0,31	0,00	2340,44	5423,87	0,29	53,20
7	0,35	0,00	1901,82	3105,12	1,19	94,80
8	0,22	0,45	464,81	-132,72	1,86	106,50
9	0,42	1,15	641,60	-76,62	3,12	69,10
10	0,32	1,52	897,08	-20,87	2,75	36,60
11	0,53	1,58	1093,33	-105,90	3,31	20,10
12	0,86	1,49	1219,95	-603,02	1,88	278,10
13	0,76	1,50	2327,84	-752,08	3,87	289,40
14	1,05	2,69	2434,70	-363,08	5,89	297,20
15	0,89	2,34	2551,78	-349,31	7,51	306,00
16	0,85	1,67	2620,43	-871,79	7,32	303,10
17	0,77	0,84	2655,78	-5112,32	4,86	297,50
18	0,64	0,00	1595,65	1209,04	3,68	307,80
19	0,61	0,00	1199,99	717,41	3,16	301,40
20	0,49	0,00	2748,99	4687,01	2,89	306,30
21	0,49	0,00	792,75	389,78	3,03	320,40
22	0,34	0,00	427,26	165,61	0,90	108,20
23	0,25	0,00	3776,14	17333,97	0,99	355,90

Nos dados coletados pela torre meteorológica não estão inclusas a altura da camada limite convectiva (z_i) e a escala de velocidade convectiva (w_*) que, conforme mencionado anteriormente, são os parâmetros mais importantes para descrever esta camada e são dependentes um do outro. Desta forma, buscou-se na literatura a maneira mais adequada de formular tais parâmetros. A equação diferencial ordinária que é capaz de descrever o crescimento da camada limite convectiva é exposta na subseção seguinte. Uma vez obtida a altura da camada limite para determinado conjunto de dados, é possível obter prontamente a escala de velocidade convectiva através da fórmula [Stull, 1988]

$$w_* = u_* \left(\frac{-z_i}{kL} \right)^{1/3}, \quad (4.1)$$

onde u_* é a velocidade de fricção (m/s), k é a constante de von Kármán e L é o comprimento de Obukhov (m).

A altura da camada limite estável (h) também não é fornecida pela torre meteorológica, mas esta pode ser calculada pela fórmula $h = 0,4(u_*L/f_c)^{1/2}$ [Zilitinkevich, 1972], onde $f_c = 2\Omega \sin(\phi)$ é a força de Coriolis e $\phi = -19^\circ 31' 53''$ é a latitude da localização da torre. Cabe mencionar que na UTE LORM ocorre um fenômeno singular devido à grande quantidade de calor emitida pelos trocadores, permitindo surgir uma camada limite estável durante o dia em sua proximidade. Tal fenômeno ainda não implementou-se, pois exige uma modificação no modelo proposto.

4.2.1 Crescimento da Camada Limite Convectiva

De acordo com Batchvarova e Gryning, 1990, quando a camada de mistura convectiva é baixa ou a atmosfera está quase neutramente estratificada, o crescimento é controlado principalmente pela turbulência mecânica. Quando a camada é profunda, seu crescimento é controlado principalmente pela turbulência convectiva. A equação diferencial que modela o crescimento da camada de mistura é dada por

$$\left\{ \left[\frac{z_i^2}{(1+2A)z_i - 2BkL} \right] + \frac{Cu_*^2T}{\gamma g[(1+A)z_i] - BkL} \right\} \frac{dz_i}{dt} = \frac{(\overline{w'\theta'})_s}{\gamma}, \quad (4.2)$$

onde $A = 0, 2$, $B = 2, 5$, $C = 8$ são os valores mais utilizados na literatura. O experimento Olad (Over-Land Atmospheric Dispersion) [Biltoft et al., 1999] traz o valor $\gamma = 0,0056$ K/m como referência.

Ainda na equação acima, k é a constante de von Kármán, L é o comprimento de Obukhov (m), u_* é a velocidade de fricção (m/s), T é a temperatura (K), γ é o gradiente de temperatura potencial acima da camada de mistura (K/m), g é a aceleração da gravidade (m/s²) e $(\overline{w'\theta'})_s$ é o fluxo de calor cinemático vertical na superfície (K.m/s)

O primeiro termo do lado esquerdo decorre do efeito das turbulências mecânica e convectiva combinadas. O segundo termo é devido ao efeito *spin-up* [Zilitinkevich, 1975]. O efeito *spin-up* é importante somente nas proximidades do solo ou quando o ar está quase neutramente estratificado. A altura cresce conforme γ decresce. No limite $\gamma = 0$, o crescimento é controlado completamente pelo termo *spin-up*. No limite o efeito do parâmetro de Coriolis é desprezado, tornando a formulação inapropriada.

O crescimento da camada de mistura é controlado principalmente pela turbulência

convectiva quando sua altura é maior que $-1,4L$. Ou seja,

- $z_i > -1,4L \Rightarrow$ turbulência convectiva;
- $z_i < -1,4L \Rightarrow$ turbulência mecânica;
- $z_i \simeq -1,4L \Rightarrow$ turbulência convectiva = turbulência mecânica.

4.3 Parametrização da Turbulência

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

Os parâmetros de dispersão são modelados de acordo com os regimes de estabilidade da camada limite atmosférica. Degrazia et al., 2001, propuseram um modelo para o coeficiente de difusão turbulenta generalizado (K_α) para condições convectivas, enquanto Degrazia e Moraes, 1992, propuseram um modelo para o mesmo coeficiente para condições estáveis, ambos os modelos são formulados a partir da teoria estatística de difusão [Taylor, 1922] e do espectro de energia cinética turbulenta, onde K_α é função da distância da fonte.

Taylor, 1922, sugere em sua teoria, que a difusão turbulenta é diferente em regiões próximas e afastadas de uma fonte contínua. Na proximidade da fonte, as partículas de fluido retêm elementos de memória de seu ambiente turbulento inicial. Para grandes tempos de viagem, esta memória é perdida e as partículas seguem apenas as propriedades locais da turbulência [Batchelor, 1949].

4.3.1 Condições Convectivas

O parâmetro de dispersão generalizado σ_α proposto por Pasquill e Smith, 1983, é dado por

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\text{sen}^2(\pi n t / \beta_i)}{n^2} dn, \quad (4.3)$$

com $\alpha = x, y, z$ e $i = u, v, w$, onde $F_i^E(n) = \frac{S_i^E(n)}{\sigma_i^2}$ é o espectro de energia euleriana normalizado pela variância da velocidade euleriana, β_i é a razão das escalas de tempo integrais lagrangeana e euleriana, n é a frequência e t é o tempo de viagem.

Uma expressão que descreve a evolução dos coeficientes de difusão K_α ao longo do tempo foi formulada por Batchelor, 1949, e é escrita como

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt}, \quad (4.4)$$

que diz que o coeficiente de difusão generalizado é a derivada da variância espacial em relação ao tempo. Substituindo a Equação 4.3 na Equação 4.4 obtém-se

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \operatorname{sen} \left(\frac{2\pi n t}{\beta_i} \right) \frac{dn}{n}. \quad (4.5)$$

A equação para o espectro de velocidade turbulenta sob condições instáveis pode ser expressa como função das escalas convectivas como [Degrazia, 1998] *apud* [Degrazia et al., 2001]

$$\frac{n S_i^E(n)}{w_*^2} = \frac{1,06 C_i f \psi^{2/3} (z/z_i)^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3} \{1 + 1,5 [f/(f_m^*)_i]\}^{5/3}}, \quad (4.6)$$

onde

- $C_i = \alpha_i (0,5 \pm 0,05) (2\pi k)^{-2/3}$ com $\alpha_i = 1, \frac{4}{3}, \frac{4}{3}$ para u, v, w respectivamente e $k = 0,4$ é a constante de von Kármán [Champagne et al., 1977];
- $f = \frac{nz}{U(z)}$ é a frequência adimensional;
- z é a altura acima do solo (m);
- $U(z) = \bar{u}$ é a velocidade média do vento na altura z_n ;
- $(f_m^*)_i$ é a frequência normalizada do pico espectral independentemente da estratificação;
- z_i é a altura do topo da camada limite instável (m);
- w_* é a escala de velocidade convectiva;
- ψ é a função da taxa de dissipação molecular adimensional, de acordo com Højstrup, 1982, $\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2}$, onde L é o comprimento de Obukhov.

A integração analítica da Equação 4.6 sobre todo o domínio de frequências resulta na variância da velocidade turbulenta euleriana

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06 C_i \psi^{2/3} (z/z_i)^{2/3} w_* z}{(f_m^*)_i^{5/3} U} \int_0^\infty \left[1 + 1,5 \frac{nz}{U(f_m^*)_i} \right]^{-5/3} dn, \quad (4.7)$$

logo

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06C_i\psi^{2/3}(z/z_i)^{2/3}w_*^2}{(f_m^*)_i^{2/3}}. \quad (4.8)$$

A Equação 4.8 é usada para normalizar o espectro, portanto o espectro euleriano normalizado é

$$F_i^E(n) = \frac{z}{U(f_m^*)_i} \left[1 + 1,5 \frac{nz}{U(f_m^*)_i} \right]^{-5/3}. \quad (4.9)$$

Substituindo as Equações 4.8 e 4.9 em 4.5, considerando $\beta_i = \frac{0,55U}{\sigma_i}$ [Wandel e Kofoed-Hansen, 1962; Corrsin, 1963; Hanna, 1981] e a distância adimensional $X = \frac{xw_*}{Uz_i}$, obtém-se

$$K_\alpha = \frac{0,09C_i^{1/2}\psi^{1/3}(z/z_i)^{1/3}w_*z}{(f_m^*)_i^{4/3}} \cdot \int_0^\infty \left[1 + 1,5 \frac{nz}{U(f_m^*)_i} \right]^{-5/3} \text{sen} \left(\frac{11,76C_i^{1/2}\psi^{1/3}z^{1/3}z_i^{2/3}Xn}{U(f_m^*)_i^{1/3}} \right) \frac{dn}{n}, \quad (4.10)$$

onde $(f_m^*)_u = 0,67$, $(f_m^*)_v = 0,67$ [Olesen et al., 1984] e $(f_m^*)_w = \frac{z}{(\lambda_m)_w}$ com o comprimento de onda vertical $(\lambda_m)_w$, sendo [Caughey e Palmer, 1979]

$$(\lambda_m)_w = 1,8z_i \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right) \right]. \quad (4.11)$$

Tomando $n' = 1,5 \frac{nz}{U(f_m^*)_i}$ na Equação 4.10, obtém-se a equação desejada

$$\frac{K_\alpha}{w_*z_i} = \frac{0,09C_i^{1/2}\psi^{1/3}(z/z_i)^{4/3}}{(f_m^*)_i^{4/3}} \cdot \int_0^\infty [1 + n']^{-5/3} \text{sen} \left(\frac{7,84C_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_i^{2/3}Xn'}{(z/z_i)^{2/3}} \right) \frac{dn'}{n'}. \quad (4.12)$$

4.3.2 Condições Estáveis

O mesmo método utilizado para obter o coeficiente de dispersão generalizado sob condições convectivas pode ser empregado para condições estáveis. Portanto, a equação que descreve o coeficiente de difusão generalizado é

$$K_\alpha = \frac{0,644u_*(1 - z/h)^{\alpha_1/2}\Phi_i^{1/2}z}{8\sqrt{\pi}(f_m)_i} \cdot \int_0^\infty \frac{\text{sen} \left[8\sqrt{\pi}\Phi_i^{1/2}(1 - z/h)^{\alpha_1/2}(f_m)_in'Xh/(1,5)^{3/5}z \right]}{1 + n'^{5/3}} \frac{dn'}{n'}, \quad (4.13)$$

onde

- Φ_i é a função de similaridade local, e $\Phi_u = 6,0$, $\Phi_v = 3,3$ e $\Phi_w = 2,5$ [Sorbjan, 1986];
- u_* é a velocidade de fricção (m/s);
- z é a altura acima do solo (m);
- h é a altura da camada limite estável (m);
- $(f_m)_i = (f_m)_{n,i} \left(1 + 3,7 \frac{z}{\Lambda}\right)$ é a frequência do pico espectral;
- $(f_m)_{n,i}$ é a frequência do pico espectral na estratificação neutra, onde $(f_m)_{n,u} = 0,045$, $(f_m)_{n,v} = 0,22$ e $(f_m)_{n,w} = 0,33$ [Olesen et al., 1984];
- $\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1,5\alpha_1 - \alpha_2}$ é o comprimento de Obukhov local (m), onde $\alpha_1 = 1,5$ e $\alpha_2 = 1,0$ [Nieuwstadt, 1984];
- $X = \frac{xu_*}{Uh}$ é a distância adimensional;
- $n' = (1,5)^{3/2} \frac{nz}{U(f_m)_i}$ é a frequência adimensional.

Para mais detalhes da dedução do coeficiente de dispersão sob condições estáveis ver [Degrazia e Moraes, 1992; Loeck, 2014]. O mesmo coeficiente pode também ser obtido por meio de uma formulação algébrica [Degrazia et al., 1996].

4.4 Perfil de Velocidade do Vento

Para determinar o campo de velocidade do vento, é necessário estabelecer o perfil de velocidade do vento, o qual foi parametrizado seguindo a teoria da similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML [Berkowicz et al., 1986], onde perto da superfície e por razão da rugosidade, tem um perfil crescente, sendo que suficientemente longe da superfície a velocidade do vento permanece aproximadamente constante. Se $z_b = \min(|L|; 0,1z_i)$, então

$$U = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) + \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right], \quad z \leq z_b, \quad (4.14a)$$

$$U = \bar{u}(z), \quad z > z_b, \quad (4.14b)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade (m) e Ψ_m é a função de estabilidade. Para condições estáveis a função de estabilidade é $\Psi_m = 1 + 4,7 \frac{z}{L}$ [Businger et al., 1971] e para

condições convectivas é [Paulson, 1970]

$$\Psi_m = 2 \ln \left(\frac{1+F}{2} \right) + \ln \left(\frac{1+F^2}{2} \right) - 2 \tan^{-1}(F) + \frac{\pi}{2}, \quad (4.15)$$

com $F = [1 - (16z/L)]^{1/4}$.

4.5 Índices Estatísticos

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados nas medições é realizada através de índices estatísticos presentes na literatura especializada. Estes índices, introduzidos por Hanna, 1989, são utilizados para validação e comparação de modelos pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera. Outros índices como variância, assimetria e curtose são largamente utilizados em inferência estatística [Keeping, 1995].

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

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

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

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

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

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

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

- Assimetria: $k_3 = \sum_{i=1}^N \frac{(C_p - \overline{C_p})^3}{\sigma_p^3}$.

Terceiro momento estatístico, fornece uma medida da assimetria de uma distribuição, onde N é a quantidade de experimentos. Sendo σ_p^2 a variância, efetua-se esta

divisão a fim de adimensionar o momento.

- Curtose: $k_4 = \sum_{i=1}^N \frac{(C_p - \overline{C_p})^4}{\sigma_p^4}$.

Quarto momento estatístico, fornece uma medida de achatamento da distribuição. Um valor alto da curtose é associado com um pico central alto no polígono de frequências, no entanto, é também demasiadamente dependente da forma da cauda e pode ter pouco a ver com o pico central.

Além dos índices estatísticos expostos acima, foi calculado um índice adicional denotado por κ . Para calcular esse índice, primeiramente é realizada uma regressão linear com os valores de C_o e os valores estimados para C_p , a partir desta regressão obtém-se a inclinação da reta a e a intersecção da reta com o eixo vertical b , ou seja, encontra-se a reta que melhor aproxima a distribuição das concentrações no plano cartesiano. Após obter os valores para a e b , calcula-se o índice κ , que é a medida para o desvio da situação ideal, que no caso ideal deve ser zero [Mello, 2010].

$$\kappa = \sqrt{(a - 1)^2 + \left(\frac{b}{\overline{C_o}}\right)^2}, \quad (4.16)$$

onde $\overline{C_o} = \frac{1}{N} \sum_1^N C_o$ é média dos N valores observados em experimentos.

Considerando que o maior valor para a correlação não necessariamente coincide com o menor erro quadrático médio normalizado, utilizou-se a relação $\frac{COR}{NMSE}$ para encontrar os valores ótimos para ω_c e ω_s . Sabe-se que COR deve ser o maior possível e $NMSE$ o menor, logo, quando $\frac{COR}{NMSE}$ for máximo encontramos um valor ótimo. Fazendo uso da mesma justificativa, utilizou-se, também, a relação $\frac{COR}{\kappa}$.

Cabe ressaltar que diversos trabalhos na área de dispersão de poluentes ainda utilizam índices como fator de dois ($FA2$) e fração de inclinação (FB) [Hanna, 1989], porém na utilização do índice $FA2$ há maior probabilidade de excluir concentrações pequenas, já o índice FB pode aparentar boa concordância quando, ao fazer a média de uma concentração superestimada com uma subestimada, continua na média. O índice $NMSE$ jamais será zero, assim como COR jamais será 1, pois um modelo determinístico não caracteriza completamente um fenômeno estocástico.

5 RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos e estatísticos obtidos no decorrer da pesquisa. Cabe salientar que todos os programas foram desenvolvidos pela autora, sendo que os programas decorrentes da dissertação foram aperfeiçoados, modificados e otimizados para gerar os resultados da presente pesquisa. Para a obtenção dos resultados numéricos utilizou-se a linguagem de programação C.

5.1 CMPC Celulose Riograndense

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos através da simulação da Equação 3.10, de acordo com os dados coletados expostos nas Tabelas 4.2 a 4.7. As simulações estão divididas de acordo com as condições de estabilidade, primeiramente apresenta-se os resultados para os casos estáveis e, em seguida, para os casos convectivos.

5.1.1 Condições Estáveis

Aqui são apresentados os resultados da otimização realizada para as Simulações 01 a 03, com o intuito de determinar quais os valores de ω_c e ω_s que melhor se ajustam às reflexões.

5.1.1.1 Simulação 01

Na Figura 5.1 tem-se um gráfico de superfície de todos os valores para o erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para os ômegas entre 0 e 1,0, na Figura 5.2 apresenta-se as isolinhas do gráfico anterior com indicação dos valores para cada linha, para uma melhor visualização optou-se por apresentar somente as isolinhas com menor valor.

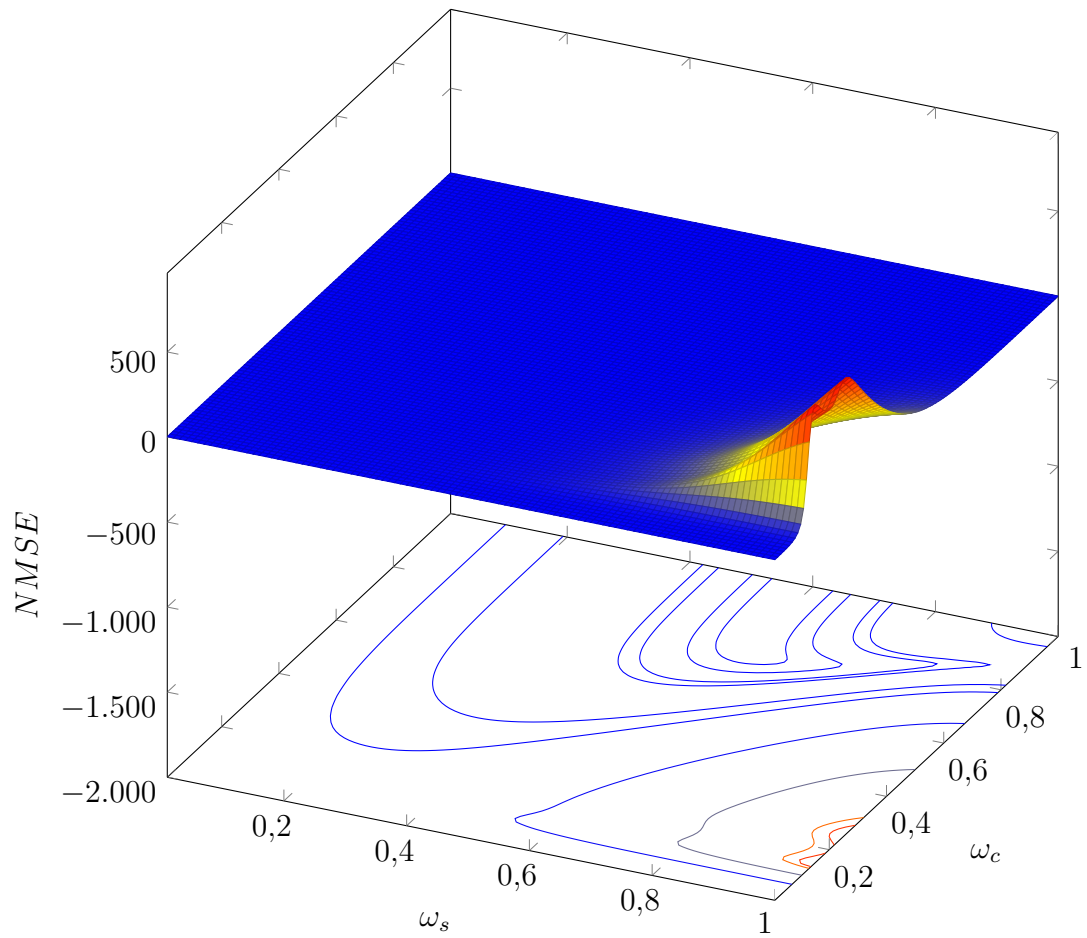


Figura 5.1 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 01.

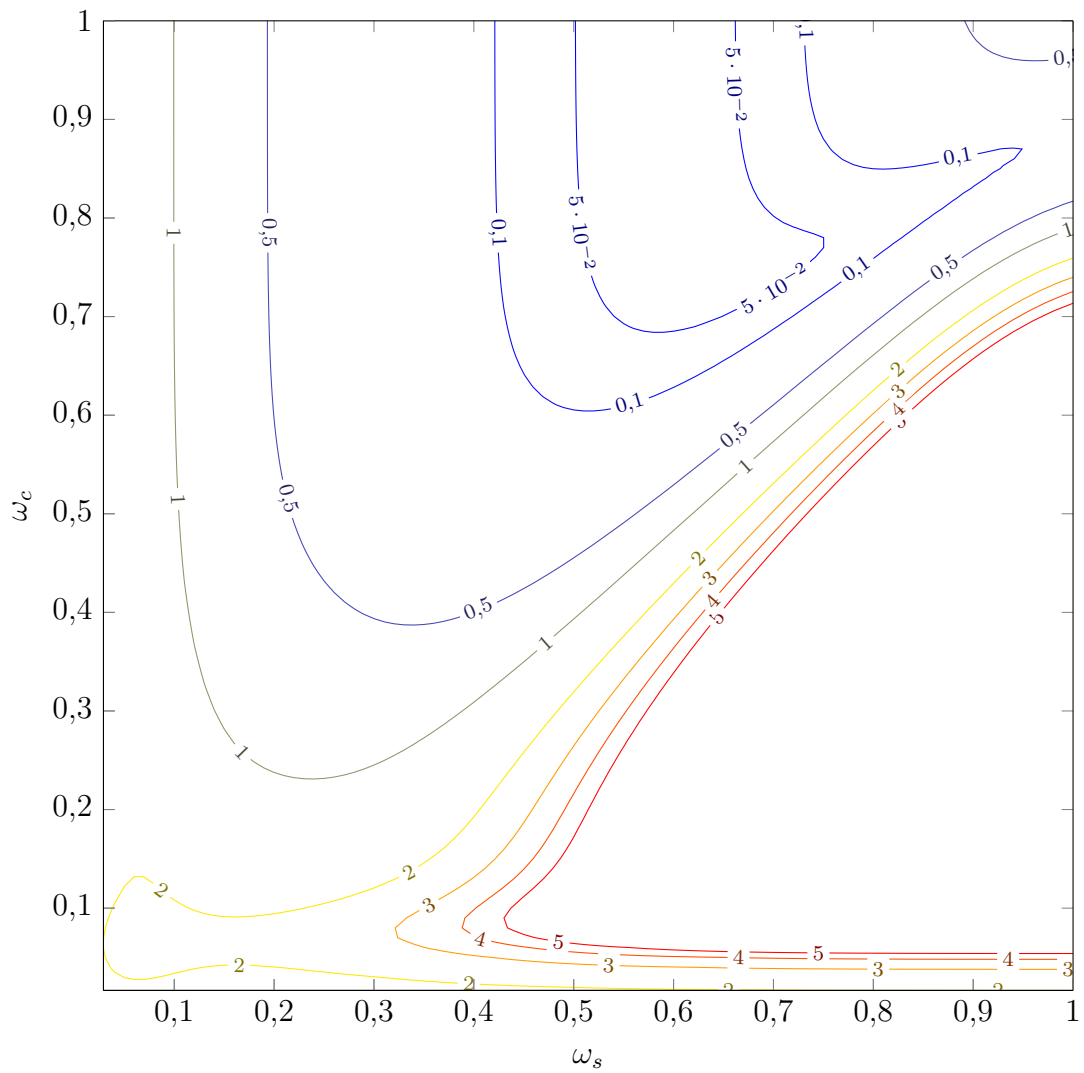


Figura 5.2 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado (*NMSE*) para a Simulação

01.

Para a otimização calculou-se, também, os valores para o índice de correlação (COR) para o mesmo intervalo de ω_c e ω_s , sendo o gráfico apresentado na Figura 5.3 e as isolinhas na Figura 5.4.

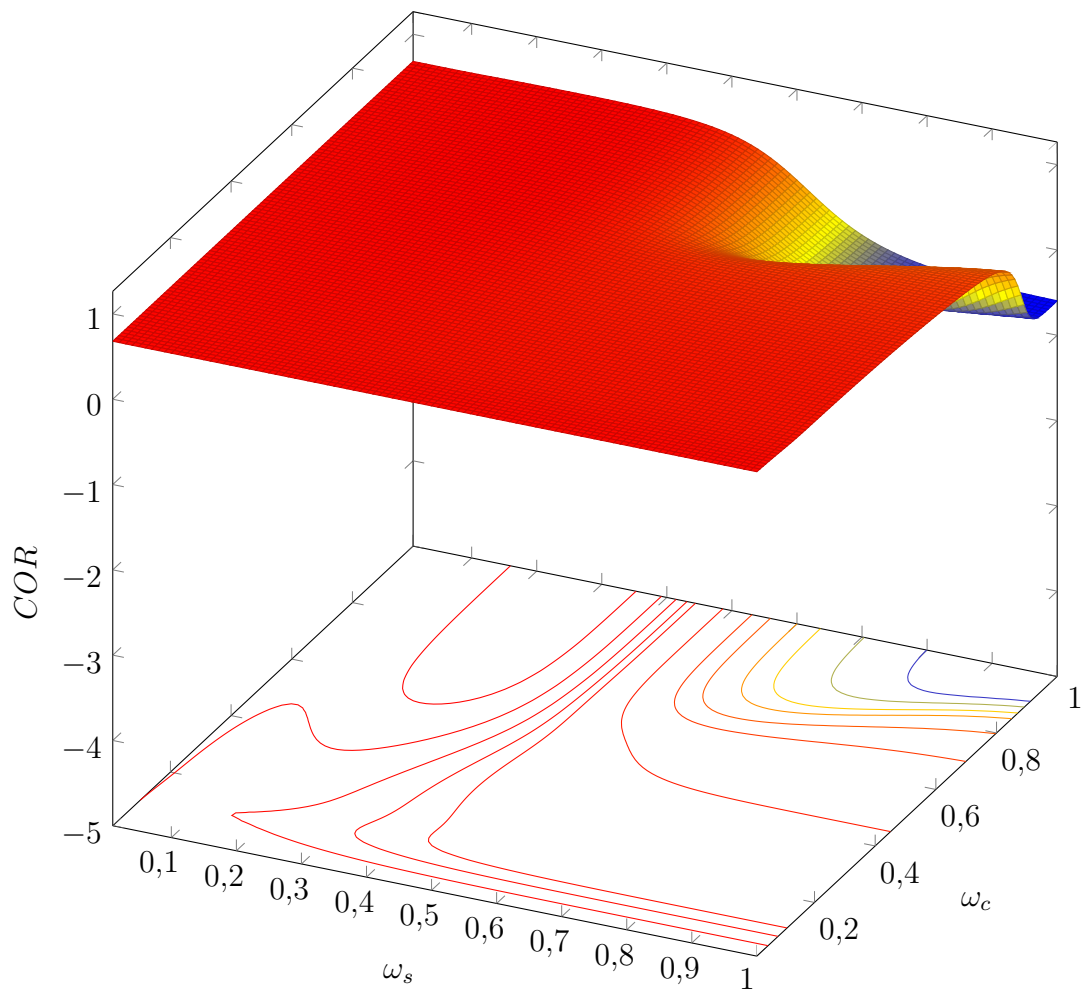


Figura 5.3 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 01.

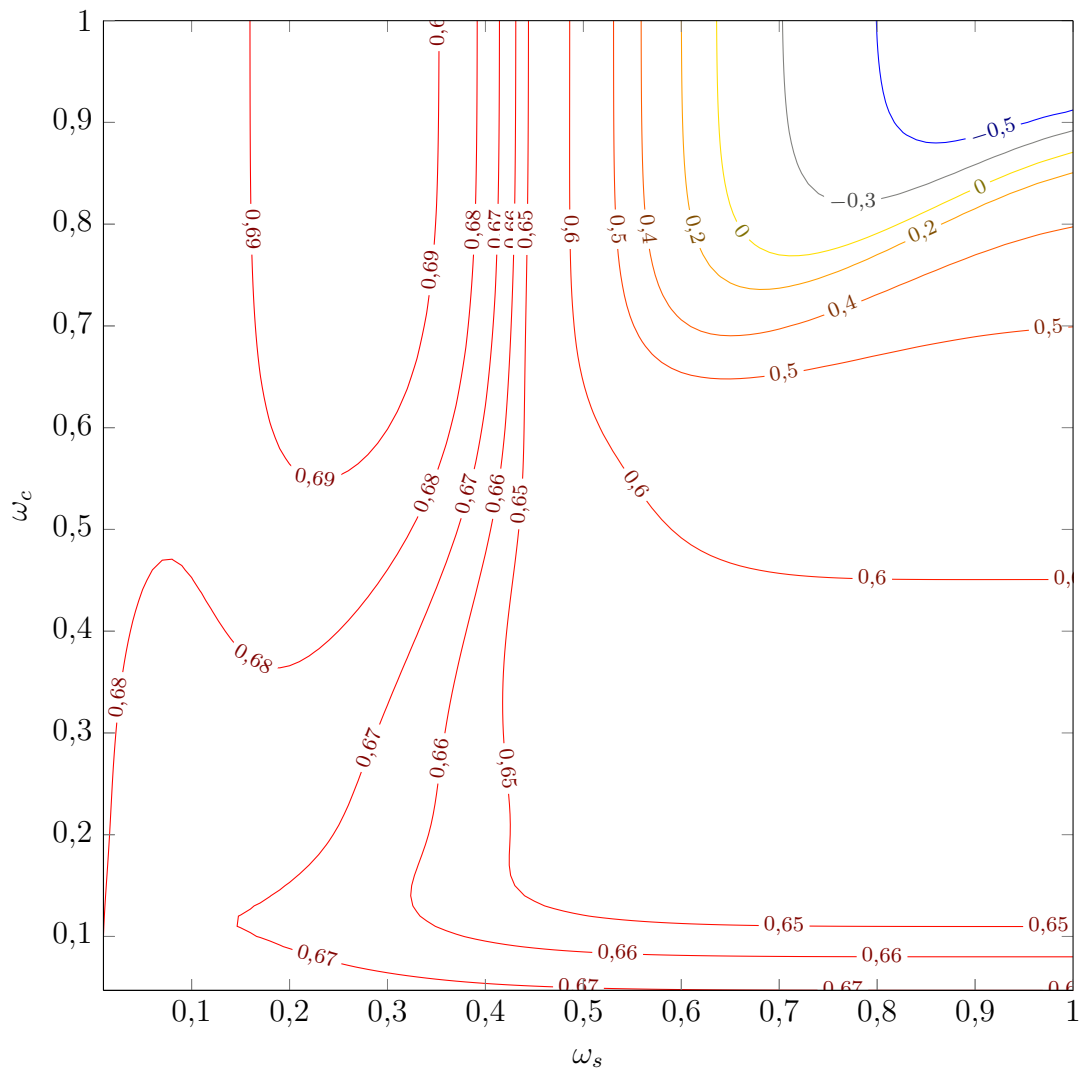


Figura 5.4 – Isolinhas do índice de correlação (*COR*) para a Simulação 01.

Apresenta-se, ainda, os gráficos e isolinhas dos terceiros e quartos momentos estatísticos, também conhecidos como assimetria e curtose, respectivamente. A assimetria é apresentada nas Figuras 5.5 e 5.6, e a curtose nas Figuras 5.7 e 5.8.

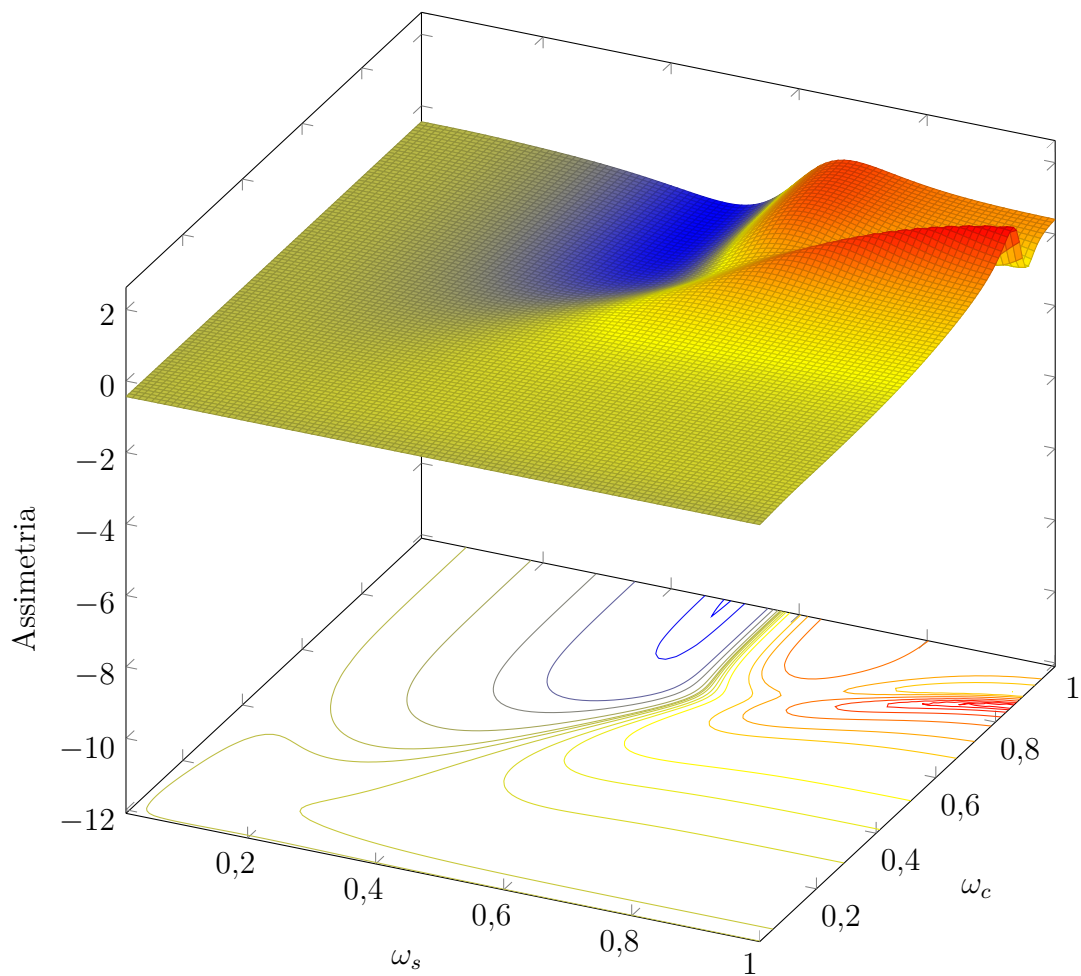


Figura 5.5 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 01.

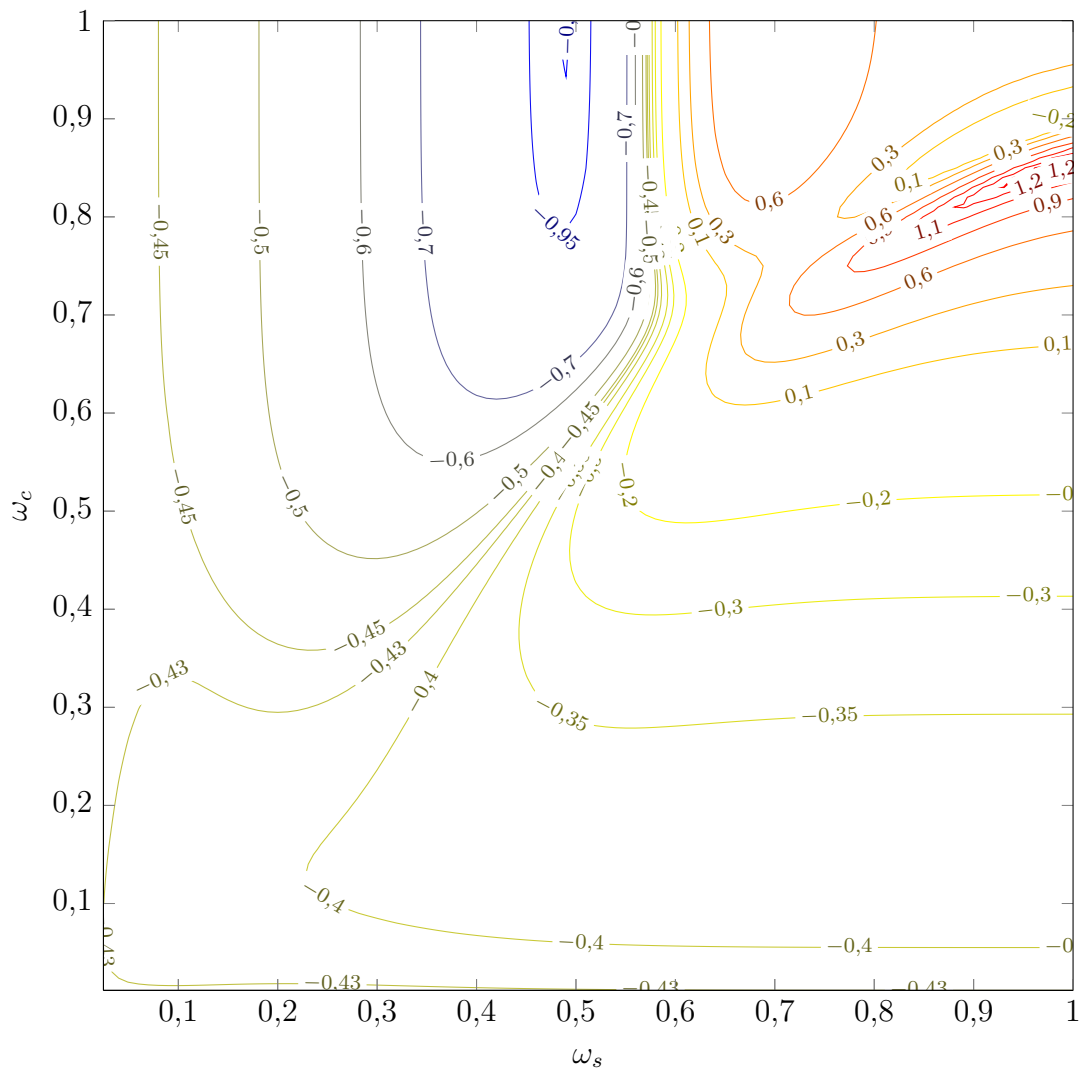


Figura 5.6 – Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 01.

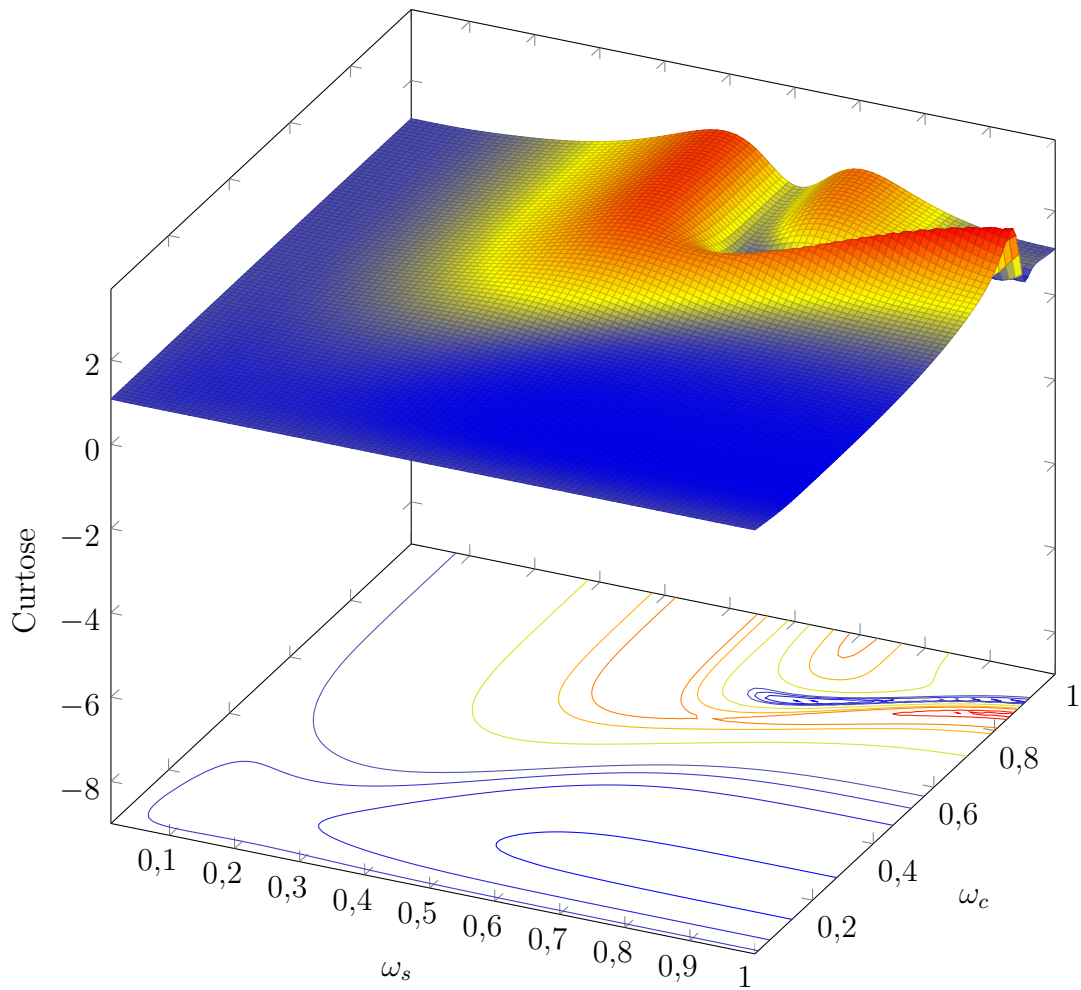


Figura 5.7 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 01.

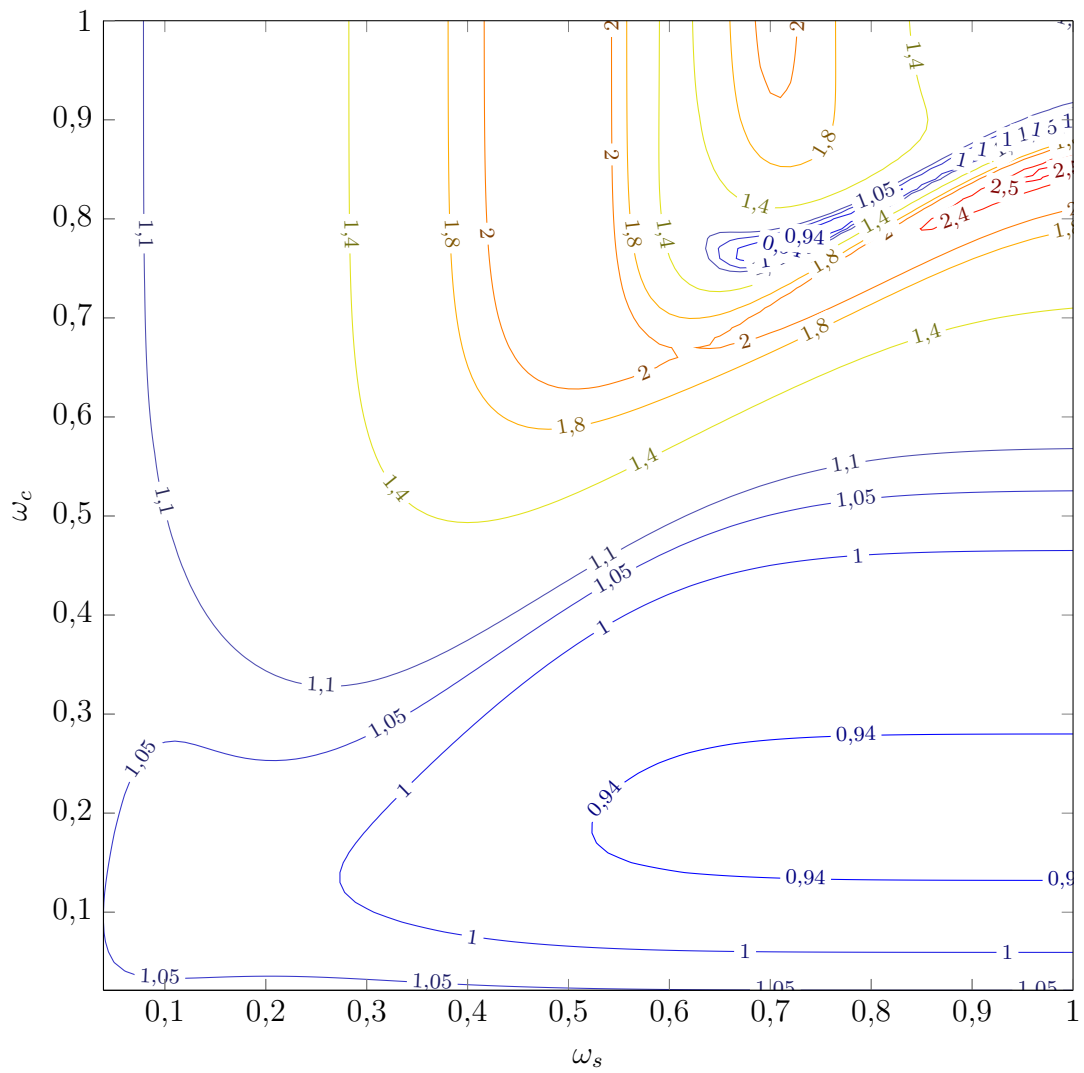


Figura 5.8 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 01.

Os gráficos da otimização para o índice κ são apresentados nas Figuras 5.9 e 5.10. Nas isolinhas são apresentadas apenas aquelas com menor valor.

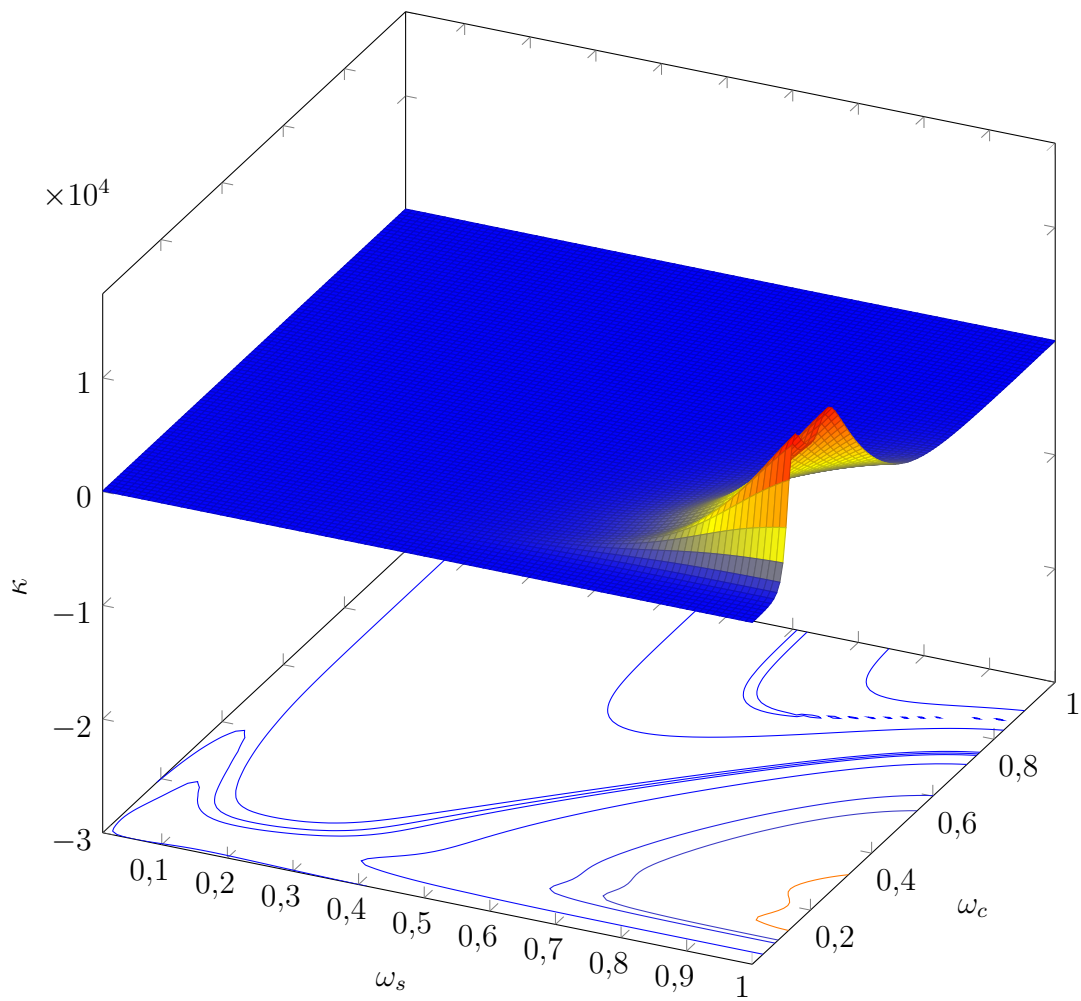


Figura 5.9 – Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 01.

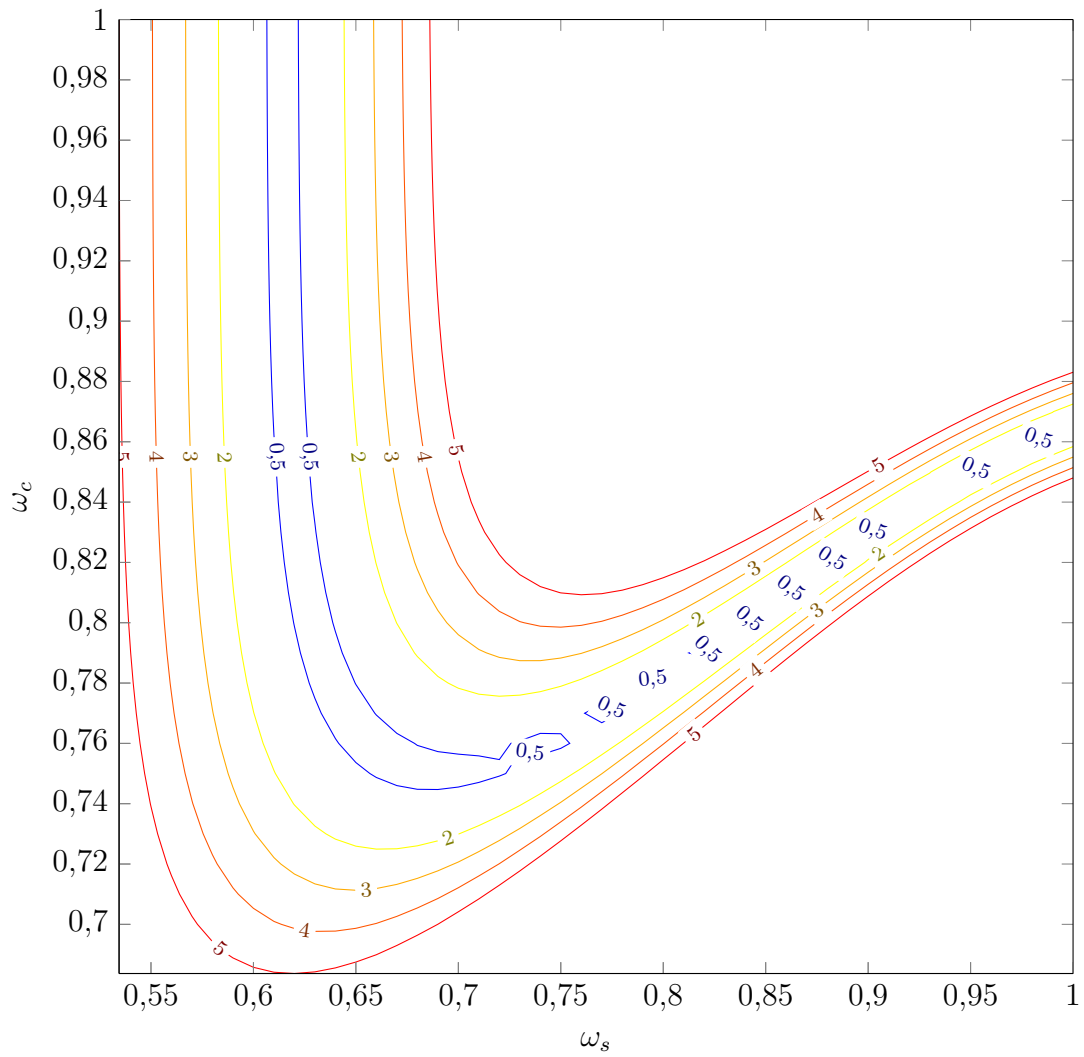


Figura 5.10 – Isolinhas do índice κ para a Simulação 01.

Apresenta-se, nas Figuras 5.11 e 5.12, os gráficos e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ introduzidos no capítulo anterior.

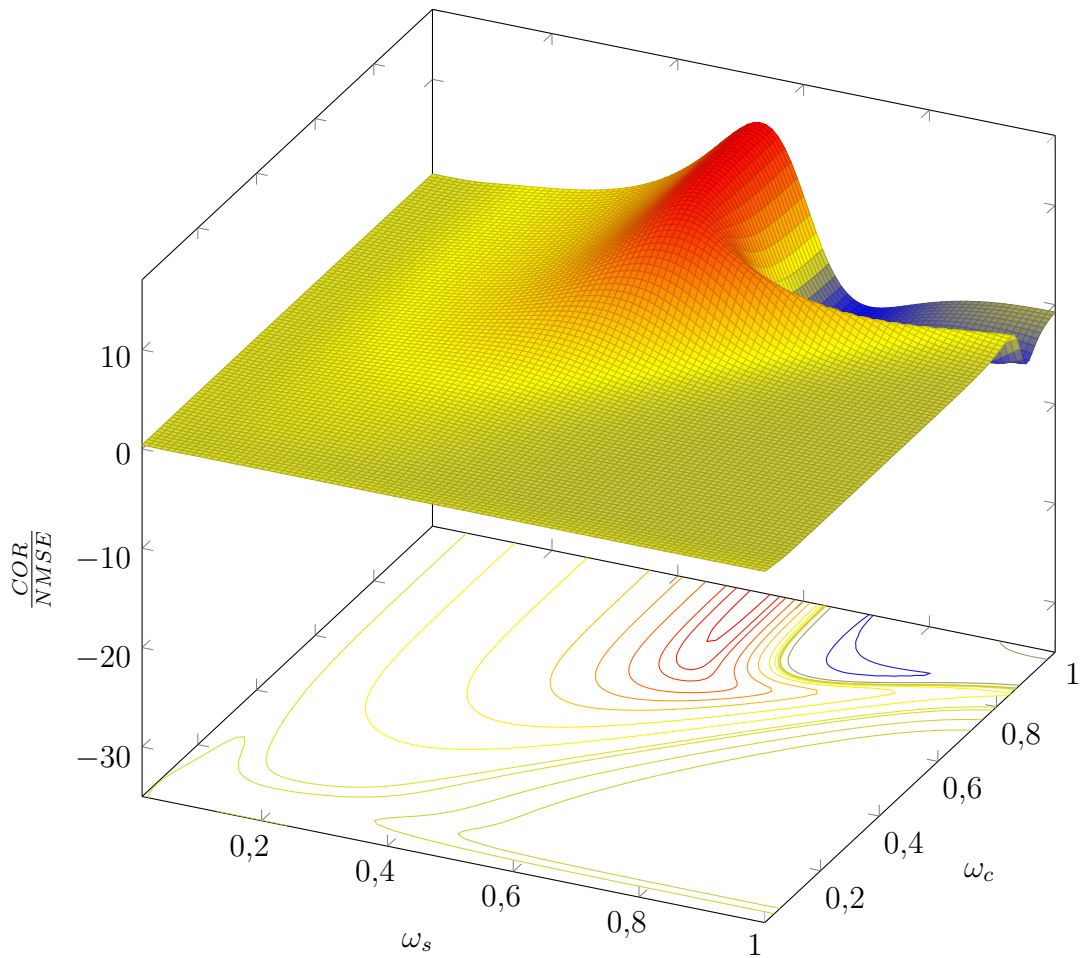


Figura 5.11 – Gráfico e isolinhas da relação $COR/NMSE$ para a Simulação 01.

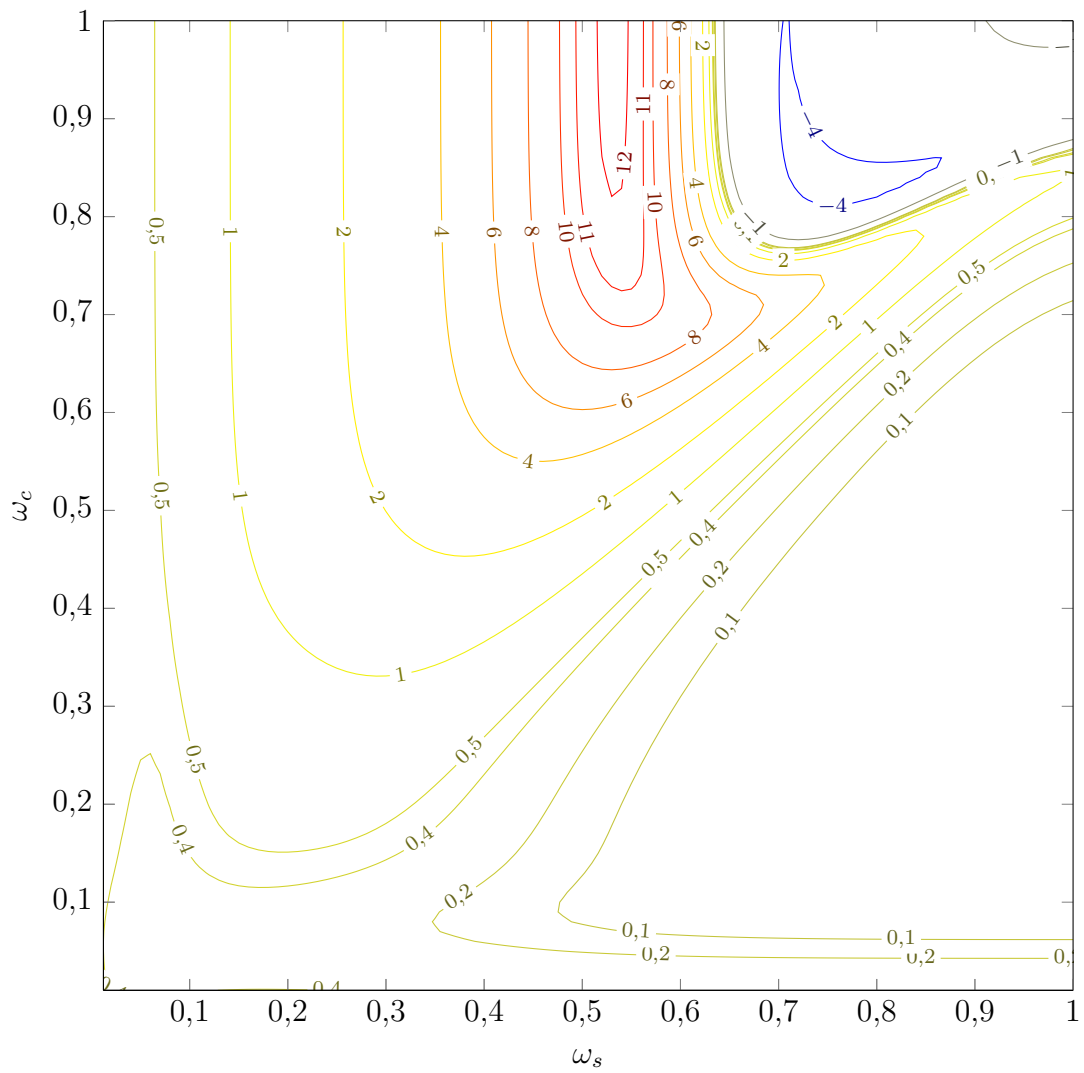


Figura 5.12 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 01.

Para encerrar esta subseção, expõe-se o gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ nas Figuras 5.13 e 5.14.

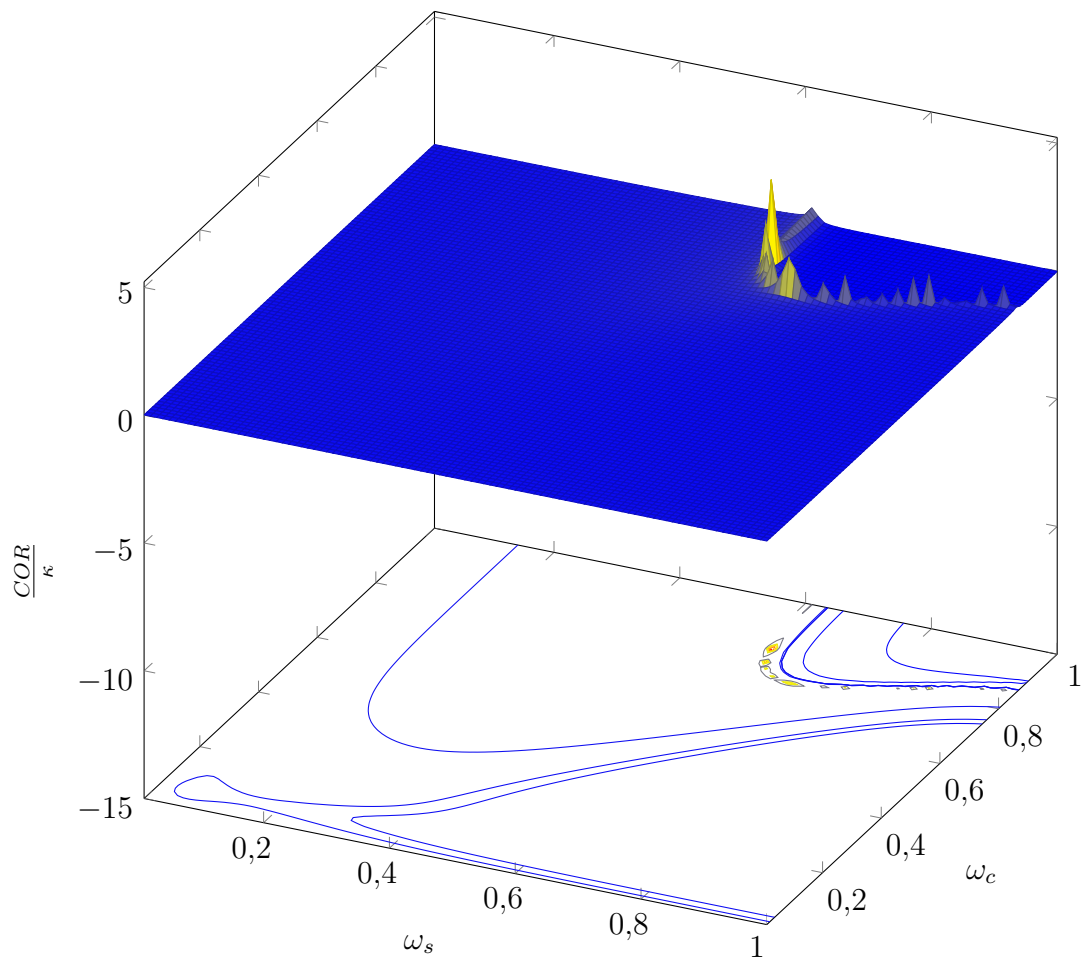


Figura 5.13 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 01.

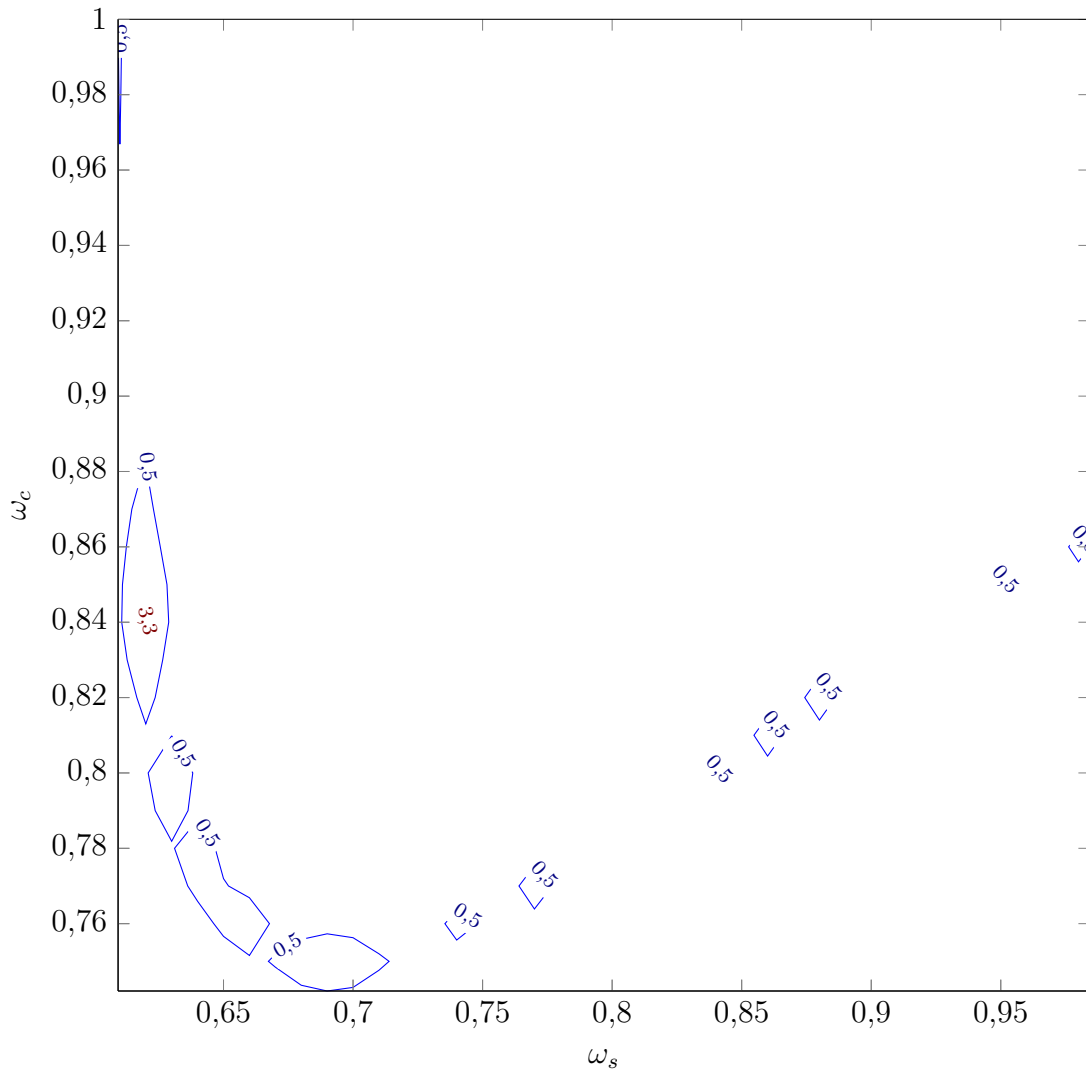


Figura 5.14 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 01.

A motivação para calcular os momentos estatísticos reside na necessidade de compreender o comportamento das distribuições para, posteriormente, aproximar tais distribuições por distribuições conhecidas. Uma vez que o comportamento de uma distribuição é conhecido, é possível reproduzir o comportamento sem, necessariamente, conhecer os valores exatos que estão distribuídos.

Nos gráficos da assimetria, Figuras 5.5 e 5.6, nota-se que em algumas regiões a distribuição é bastante assimétrica, enquanto em outras a assimetria é mais sutil. Em algumas regiões dos gráficos observa-se que a distribuição é quase simétrica. O padrão da curtose exposta nas Figuras 5.7 e 5.8 se assemelha ao padrão da assimetria, portanto, do mesmo modo, existem diferentes valores de curtose para parâmetros reflexivos distintos.

Valores maiores de curtose indicam que é necessário uma distribuição mais homogênea para simular a distribuição em questão.

A região onde se encontra os maiores valores da relação $\frac{COR}{NMSE}$ coincide com a região que tem os maiores valores de $\frac{COR}{\kappa}$. A maior curtose também se encontra nesta região. De acordo com a otimização, para a Simulação 01, um dos valores ótimos encontrados foram $\omega_c = 0,75$ e $\omega_s = 0,45$, após 1 reflexão ($n = 1$). Segue os índices estatísticos e o gráfico de espalhamento encontrados para os valores ótimos.

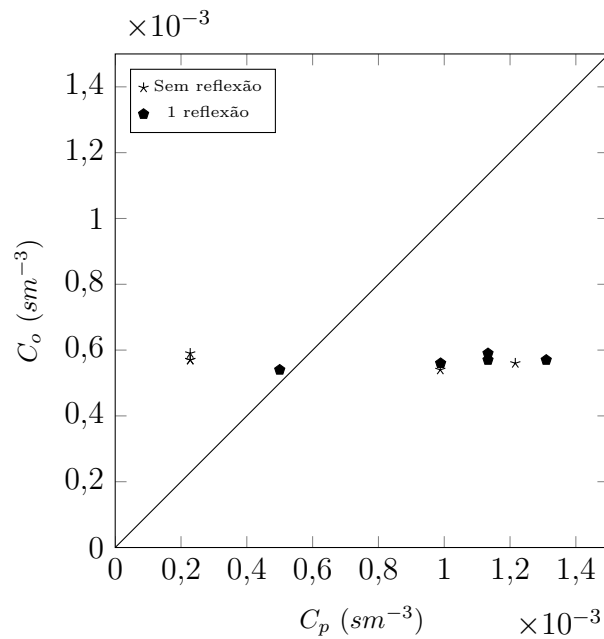


Figura 5.15 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,75$ e $\omega_s = 0,45$ para a Simulação 01.

Tabela 5.1 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,75$ e $\omega_s = 0,45$ para a Simulação 01.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	0,609	-0,583	-1,856	28,947
Com reflexão ($n = 1$)	0,082	0,643	-1,778	10,495

5.1.1.2 Simulação 02

A seguir serão apresentados os resultados da otimização para a Simulação 02, os mesmos índices apresentados na subsecção anterior serão aqui expostos. Nas Figuras 5.16 e 5.17 tem-se o gráfico e as isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), respectivamente; nas Figuras 5.18 e 5.19 o gráfico e as isolinhas do índice de correlação (COR); nas Figuras 5.20 e 5.21 o gráfico e as isolinhas da assimetria; nas Figuras 5.22 e 5.23 o gráfico e as isolinhas da curtose; nas Figuras 5.24 e 5.25 o gráfico e as isolinhas do índice κ ; nas Figuras 5.26 e 5.27 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$; e nas Figuras 5.28 e 5.29 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$. Para os índices $NMSE$ e κ , optou-se por apresentar somente as isolinhas com menor valor, enquanto para a relação $\frac{COR}{\kappa}$ apresenta-se as isolinhas com maior valor.

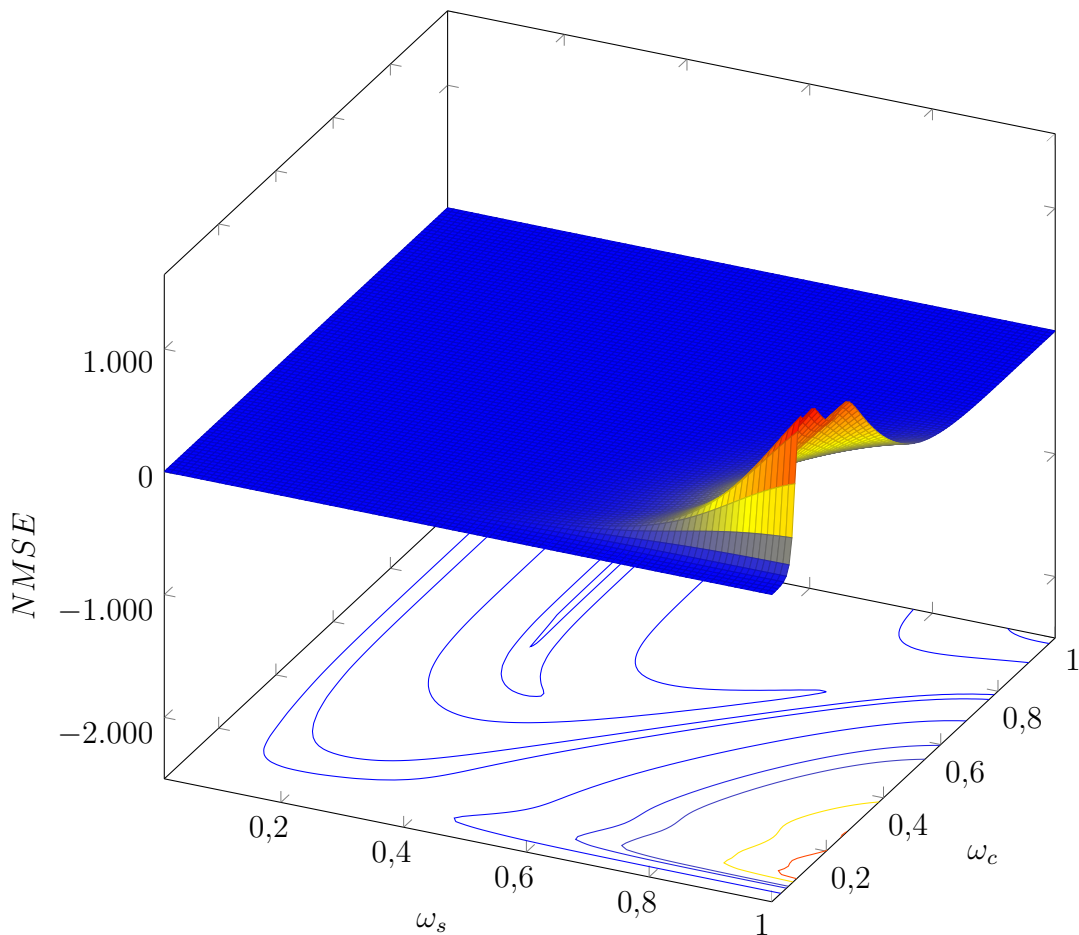


Figura 5.16 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 02.

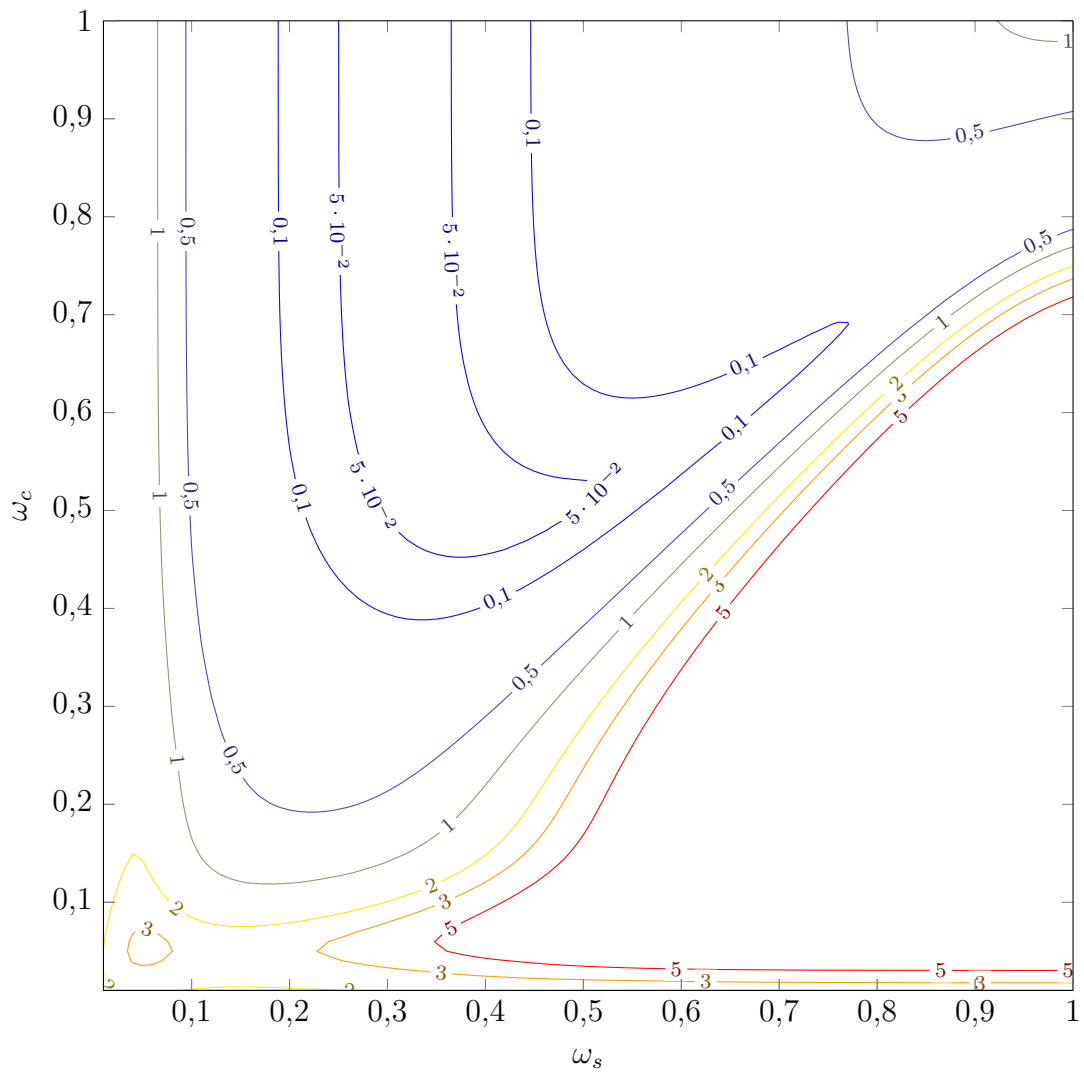


Figura 5.17 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 02.

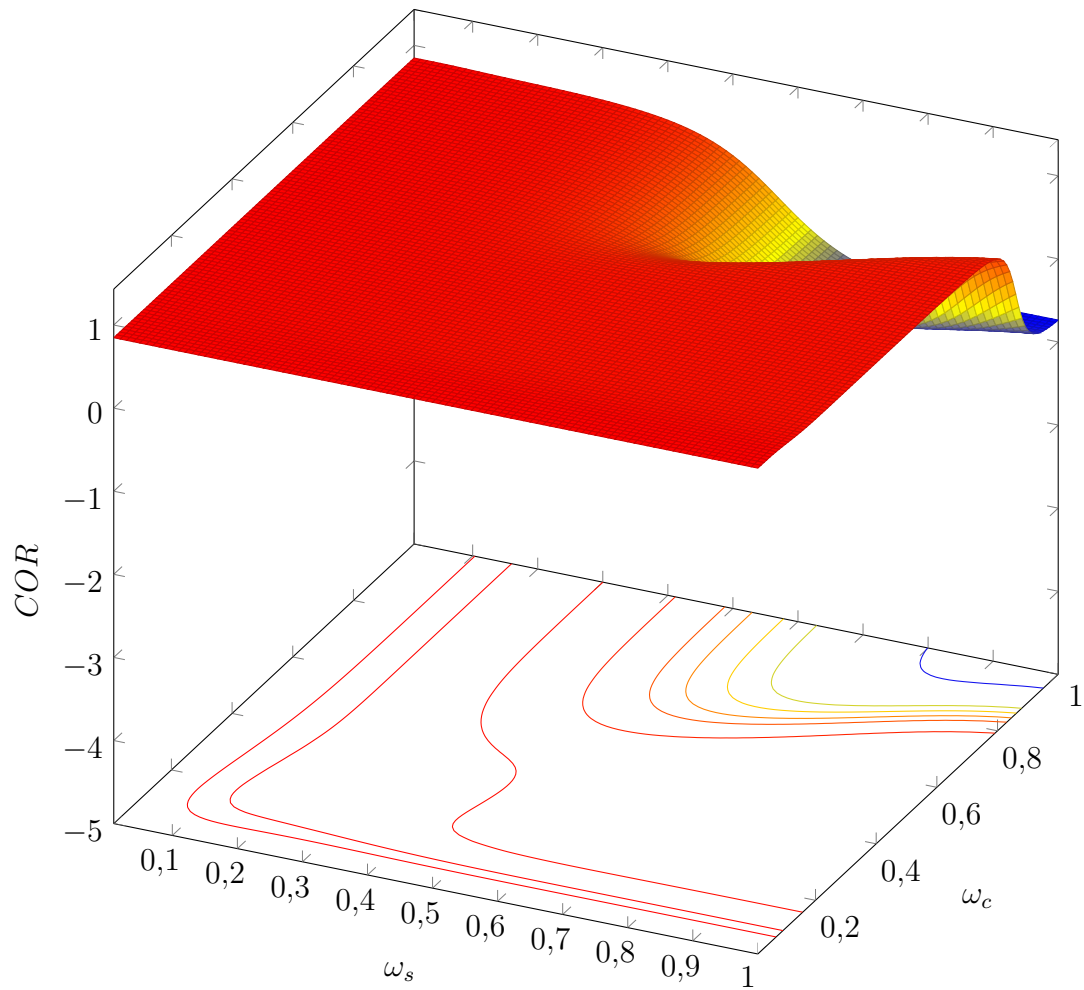


Figura 5.18 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 02.

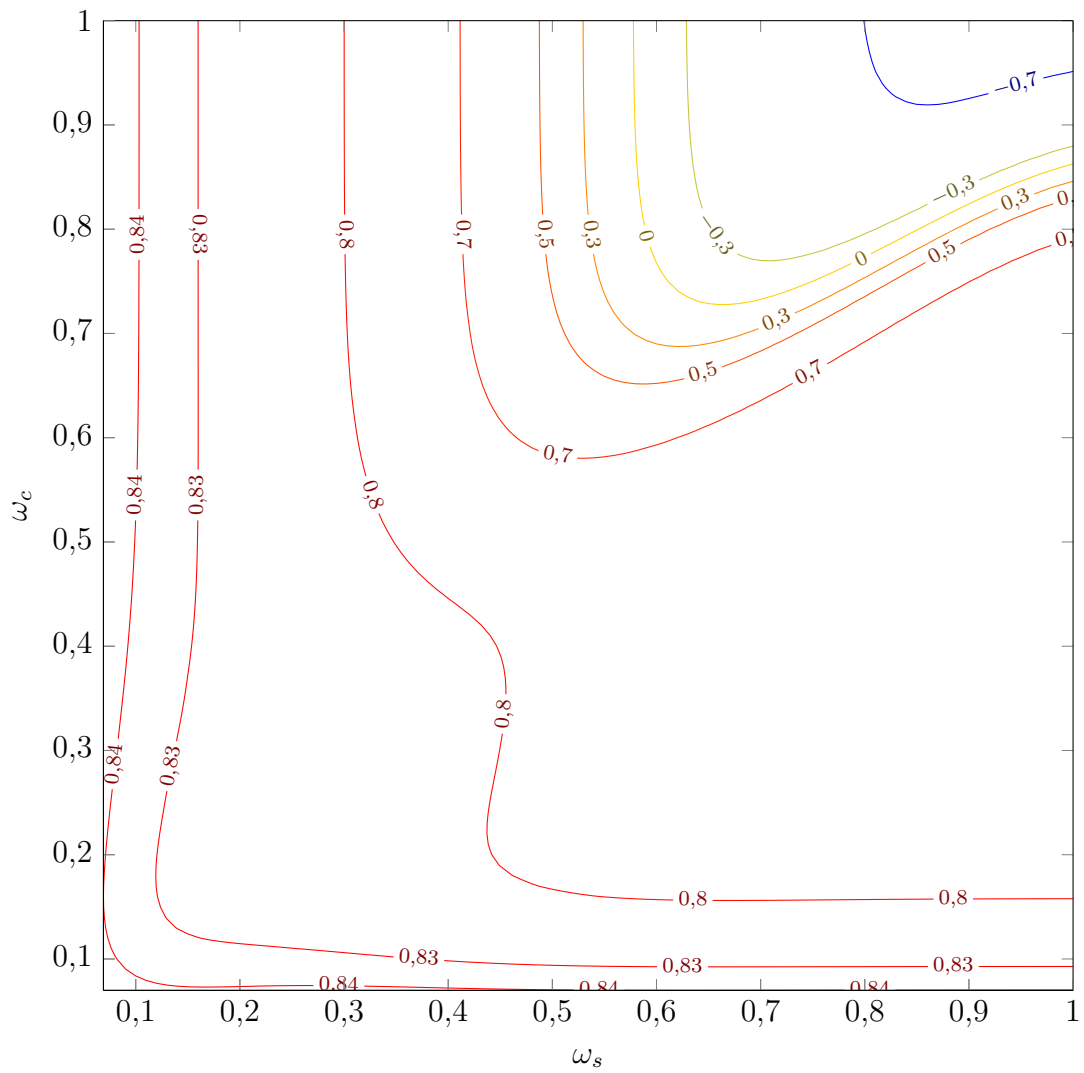


Figura 5.19 – Isolinhas do índice de correlação (*COR*) para a Simulação 02.

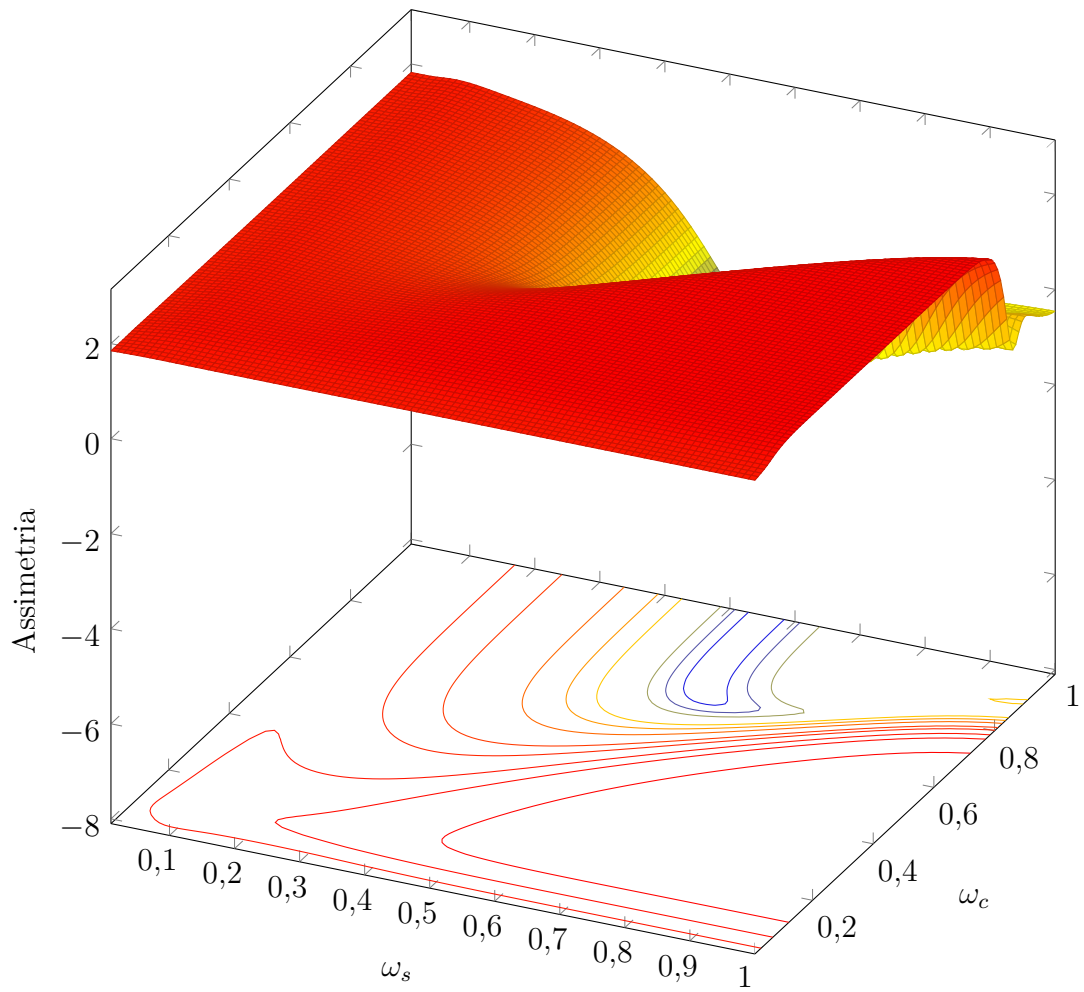


Figura 5.20 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 02.

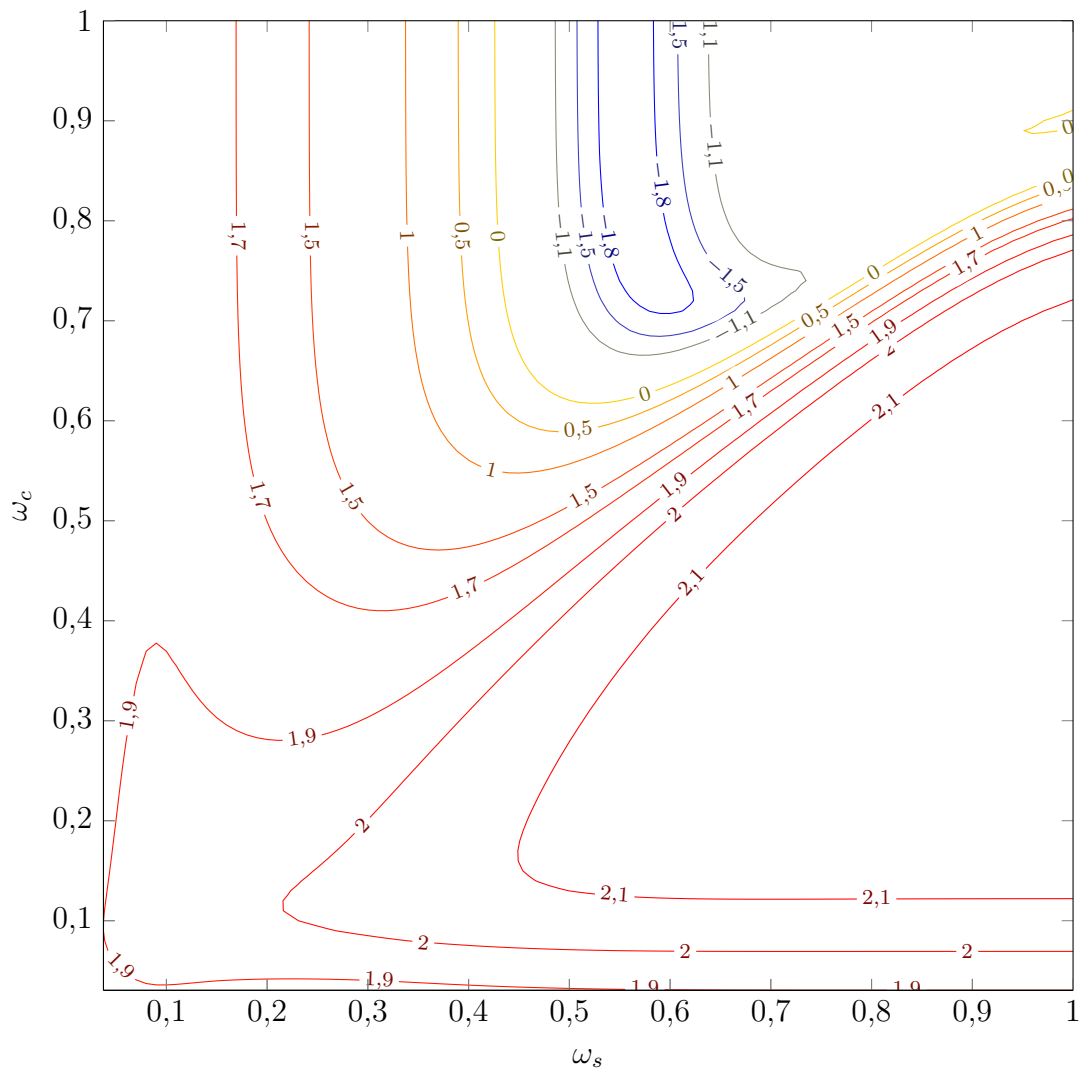


Figura 5.21 – Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 02.

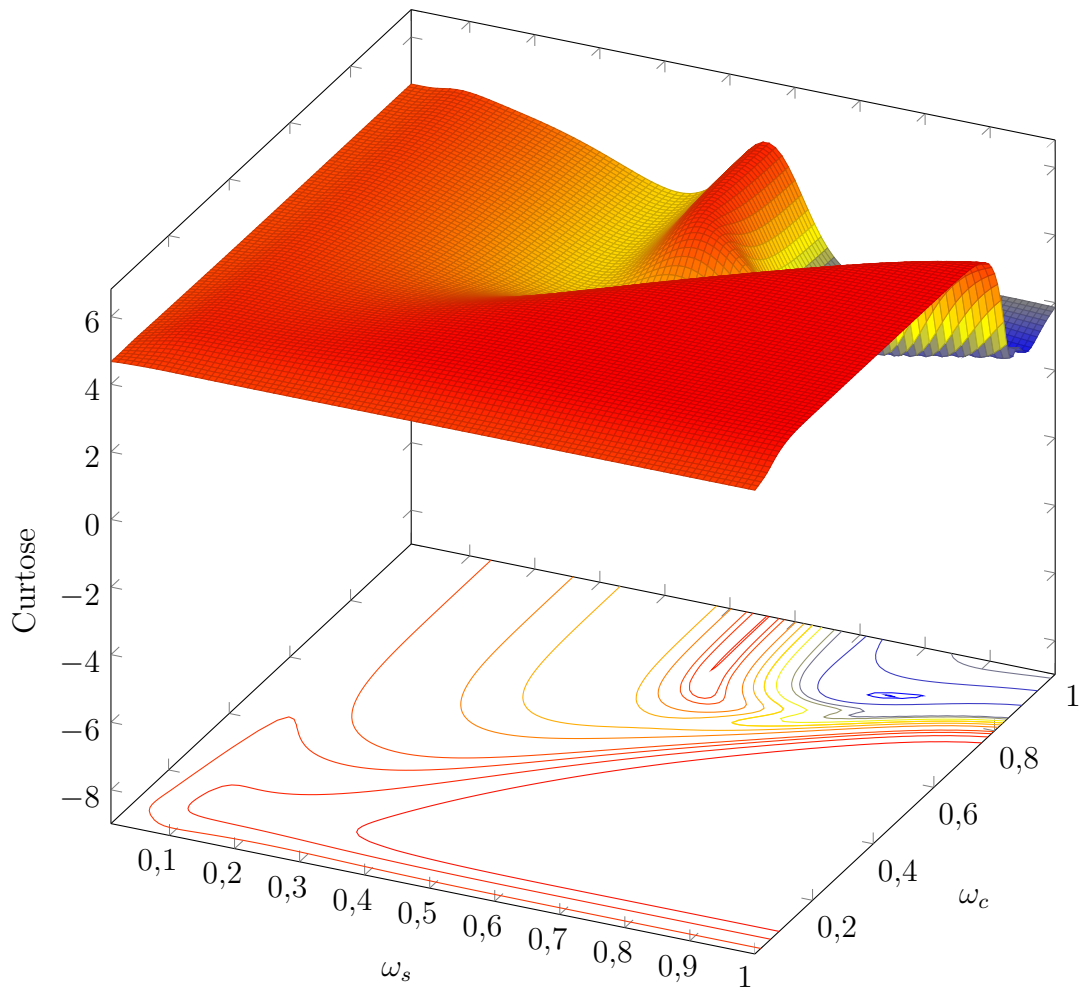


Figura 5.22 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 02.

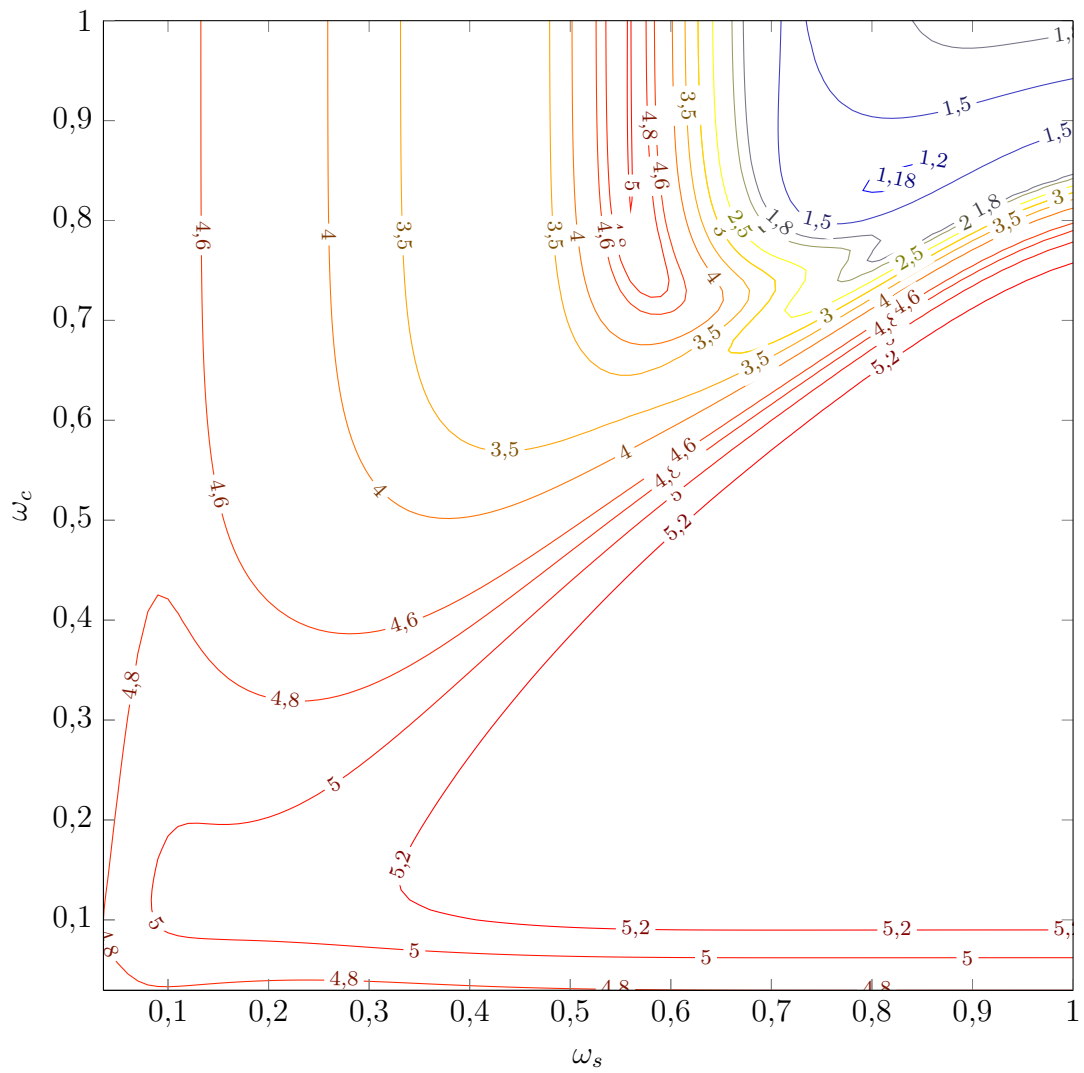


Figura 5.23 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 02.

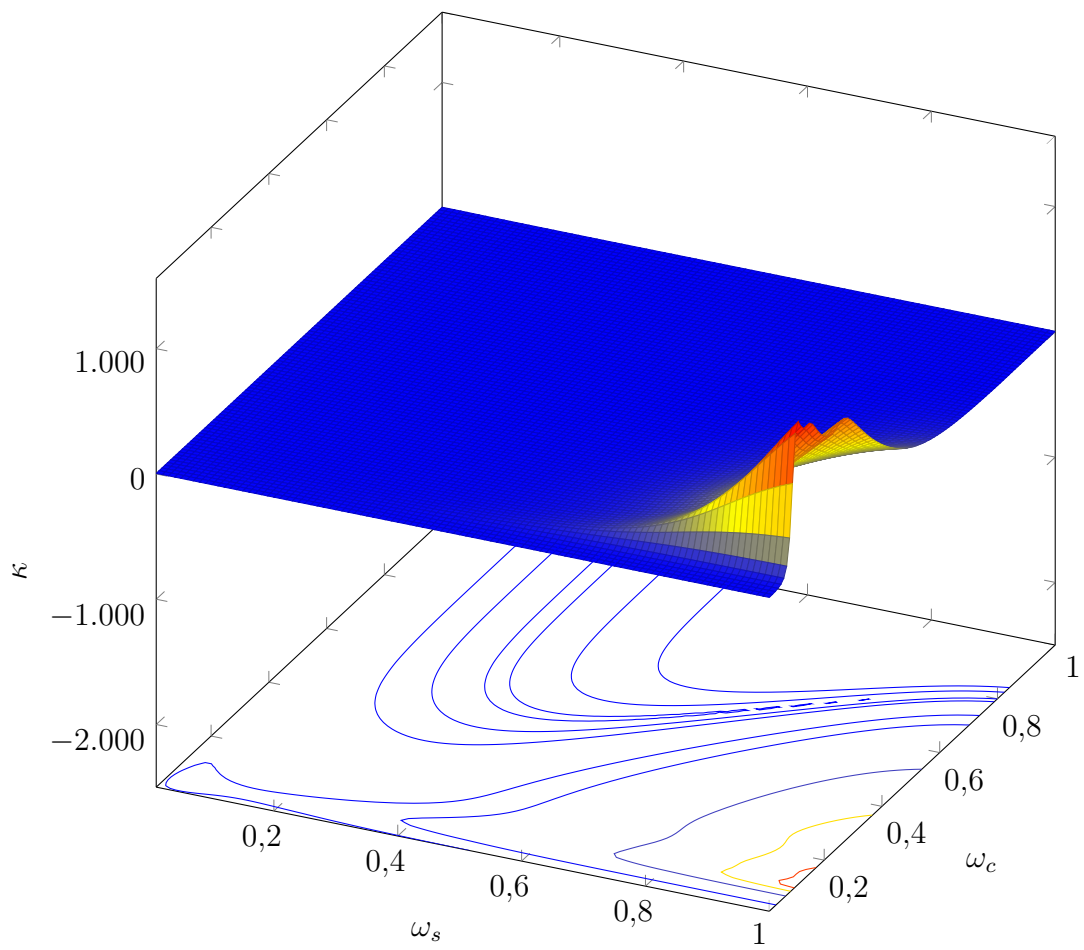


Figura 5.24 – Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 02.

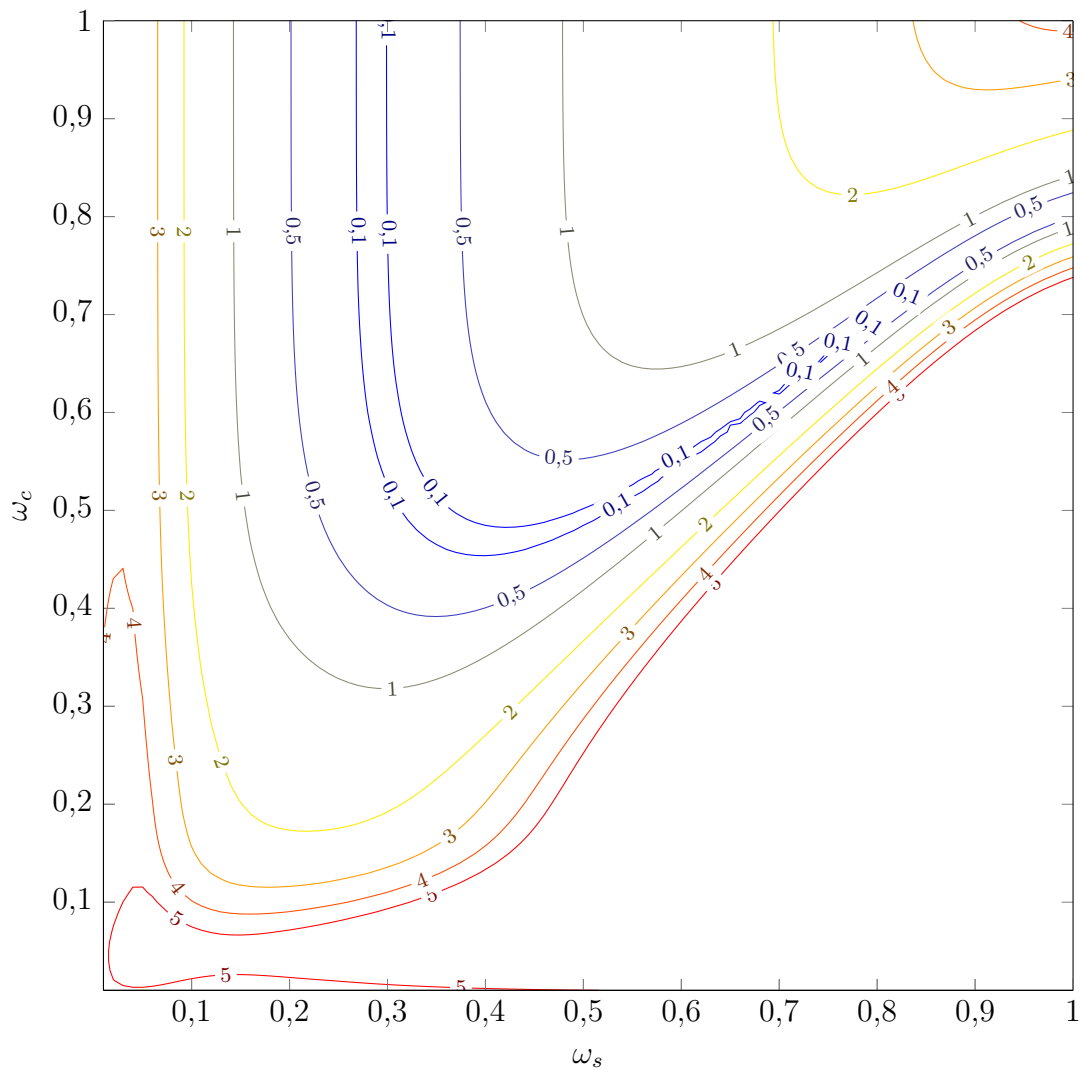


Figura 5.25 – Isolinhas do índice κ para a Simulação 02.

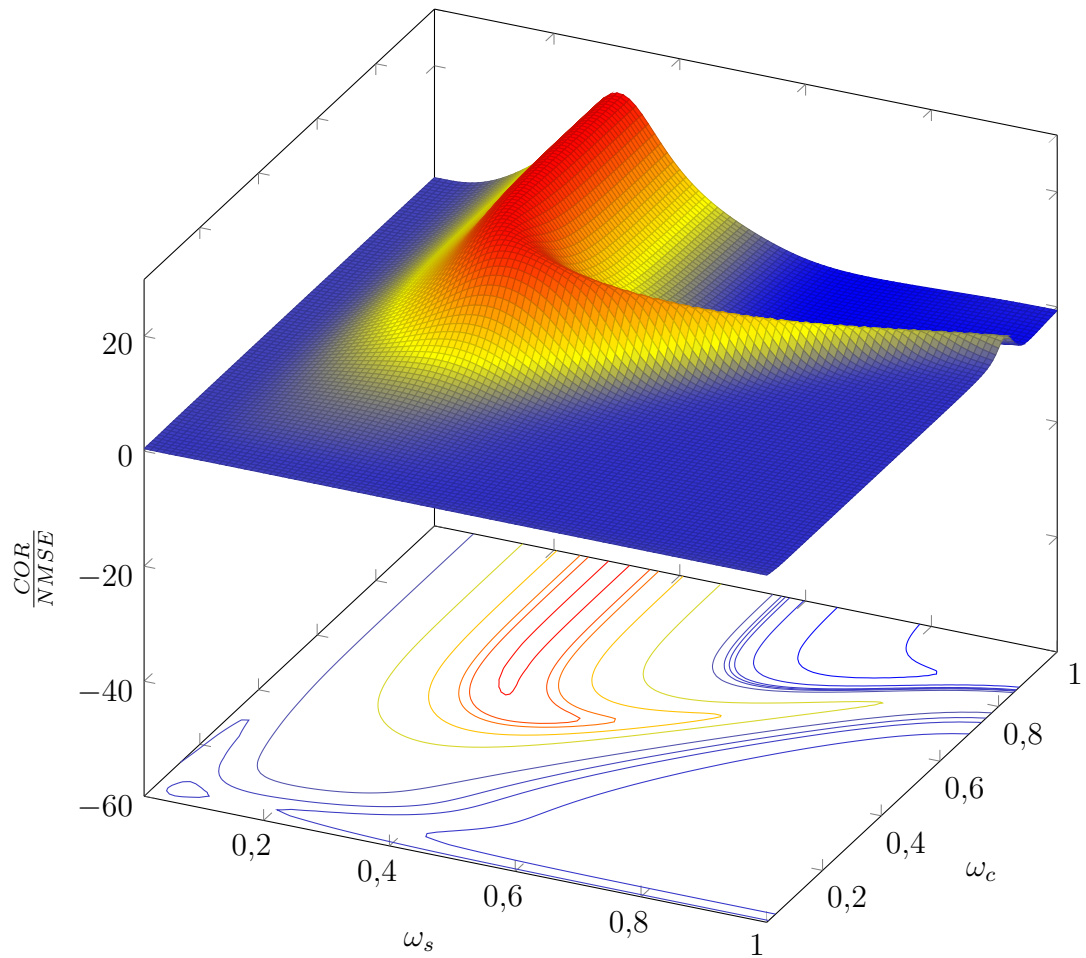


Figura 5.26 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 02.

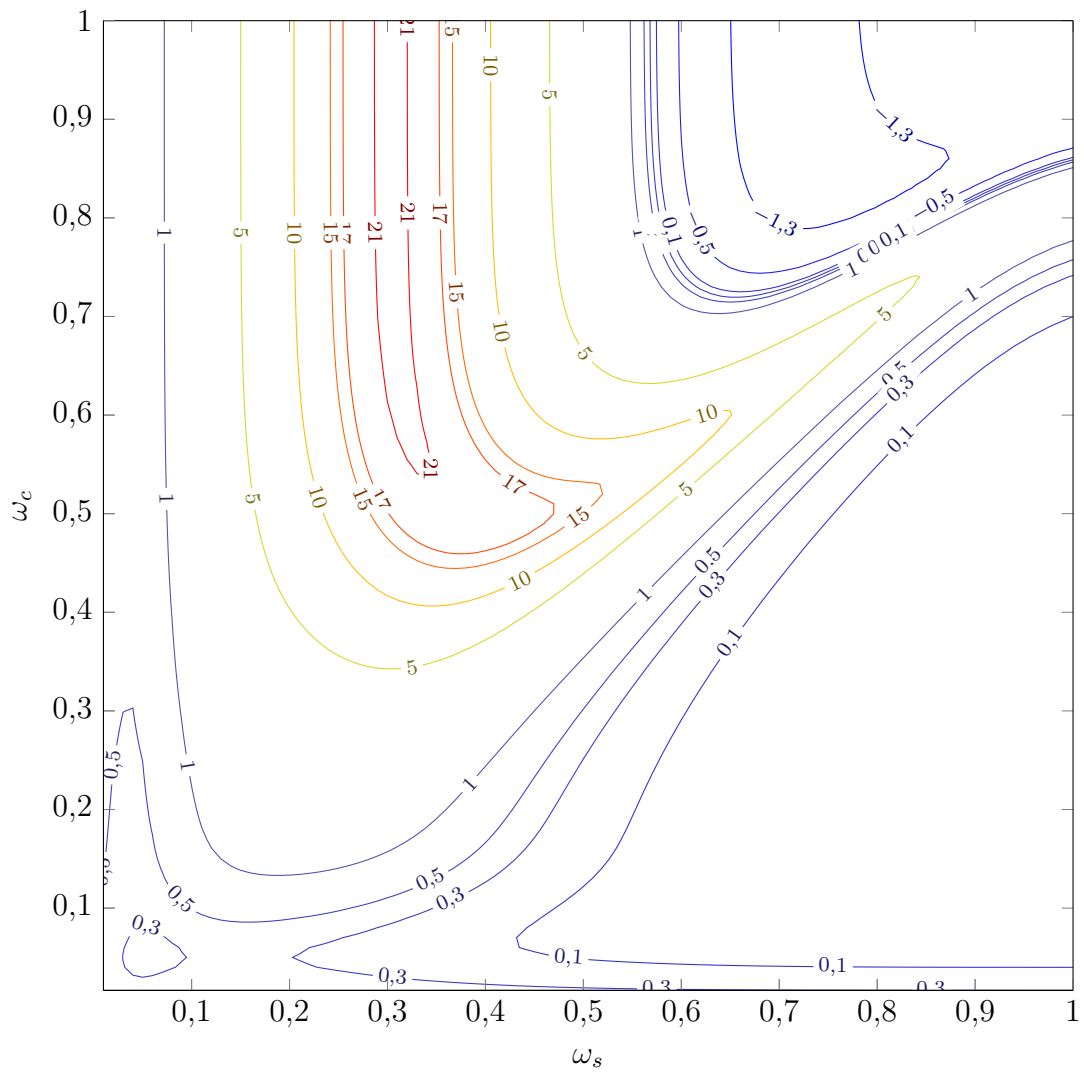


Figura 5.27 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 02.

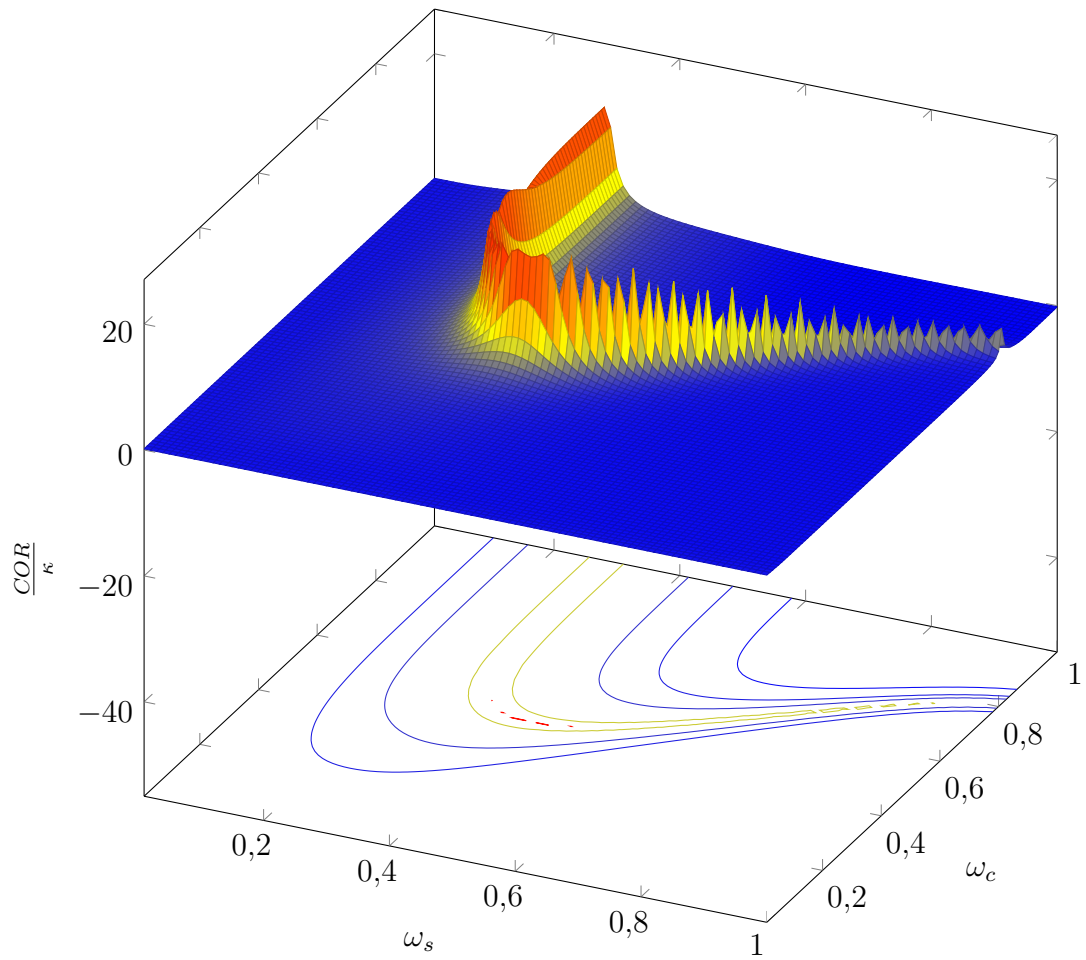


Figura 5.28 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 02.

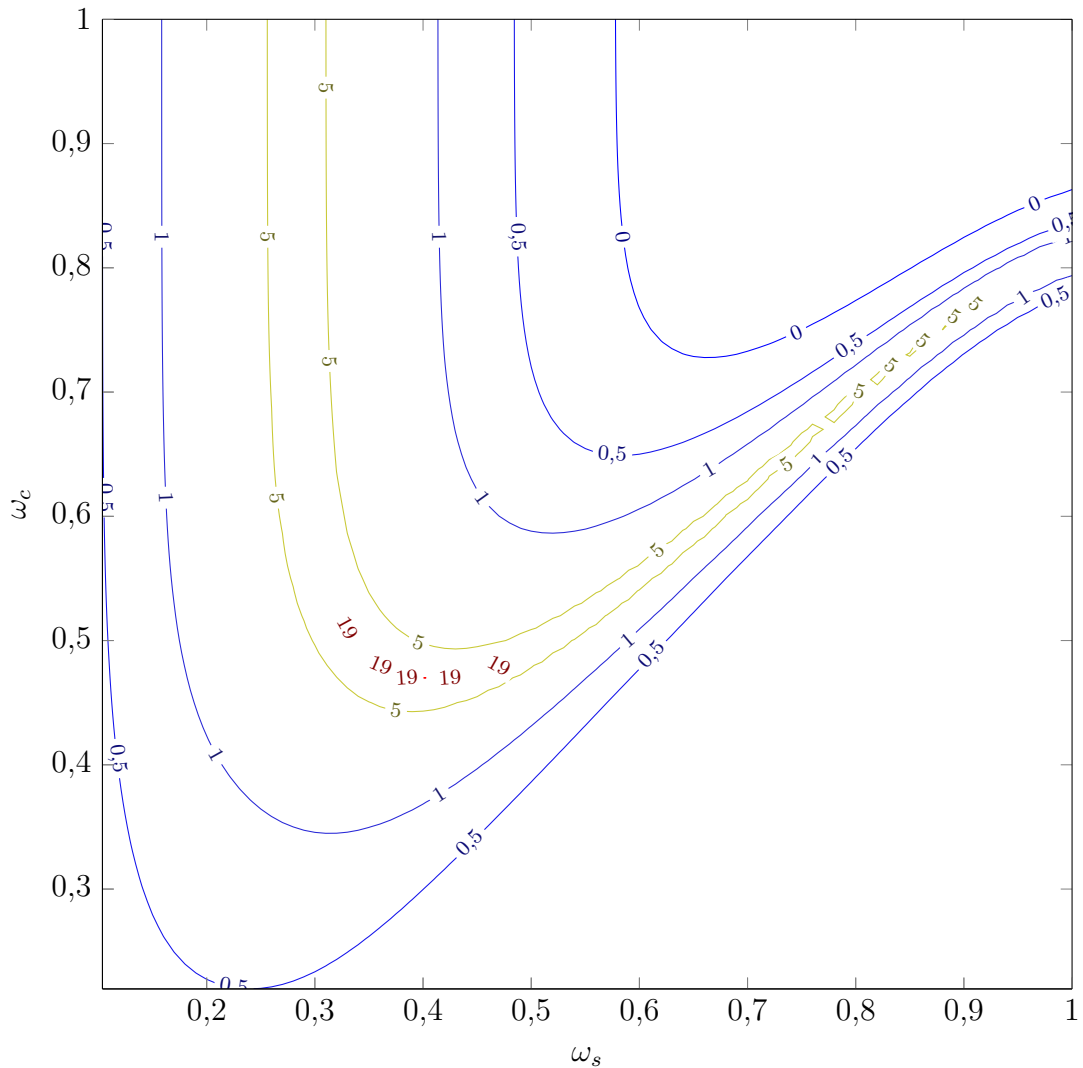


Figura 5.29 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 02.

Nota-se, novamente, nos gráficos de assimetria, Figuras 5.20 e 5.21, regiões onde a distribuição é mais assimétrica e outras menos, encontrando-se valores de assimetria variando do positivo ao negativo. O padrão da curtose exposta nas Figuras 5.22 e 5.23 novamente se assemelha ao padrão da assimetria, portanto, do mesmo modo, existem diferentes valores de curtose para parâmetros reflexivos distintos. A região onde se encontra os maiores valores de $\frac{COR}{NMSE}$ não coincide com a região onde se encontra os maiores valores de $\frac{COR}{\kappa}$, mas estão próximas.

Apresenta-se, ainda, os índices estatísticos e o gráfico de espalhamento para a Simulação 02 com um dos parâmetros reflexivos ótimos encontrados $\omega_c = 0,7$ e $\omega_s = 0,2$ após 3 reflexões ($n = 3$).

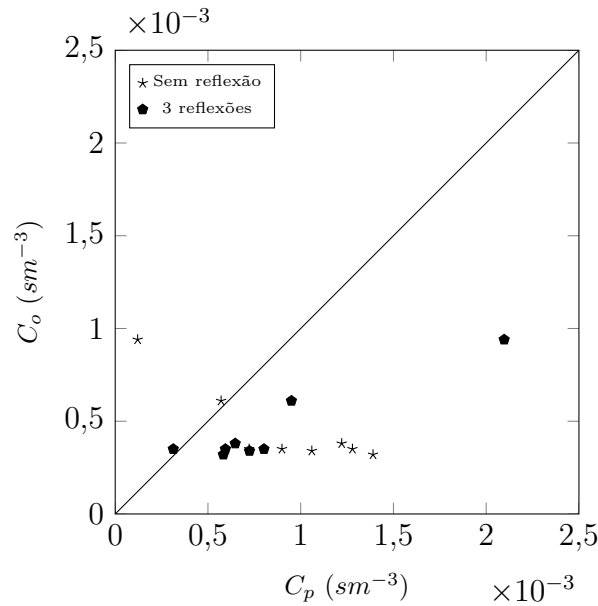


Figura 5.30 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,7$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 02.

Tabela 5.2 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,7$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 02.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	1,315	-0,759	-0,646	4,57
Com reflexão ($n = 3$)	0,089	0,825	-0,855	0,522

5.1.1.3 Simulação 03

No último caso estável calculou-se os mesmo índices anteriores. Nas Figuras 5.31 e 5.32 tem-se o gráfico e as isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), respectivamente; nas Figuras 5.33 e 5.34 o gráfico e as isolinhas do índice de correlação (COR); nas Figuras 5.35 e 5.36 o gráfico e as isolinhas da assimetria; nas Figuras 5.37 e 5.38 o gráfico e as isolinhas da curtose; nas Figuras 5.39 e 5.40 o gráfico e as isolinhas do índice κ ; nas Figuras 5.41 e 5.42 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$; e nas Figuras 5.43 e 5.44 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$. Mais uma vez, optou-se por apresentar somente as isolinhas com menor valor para os índices $NMSE$ e κ .

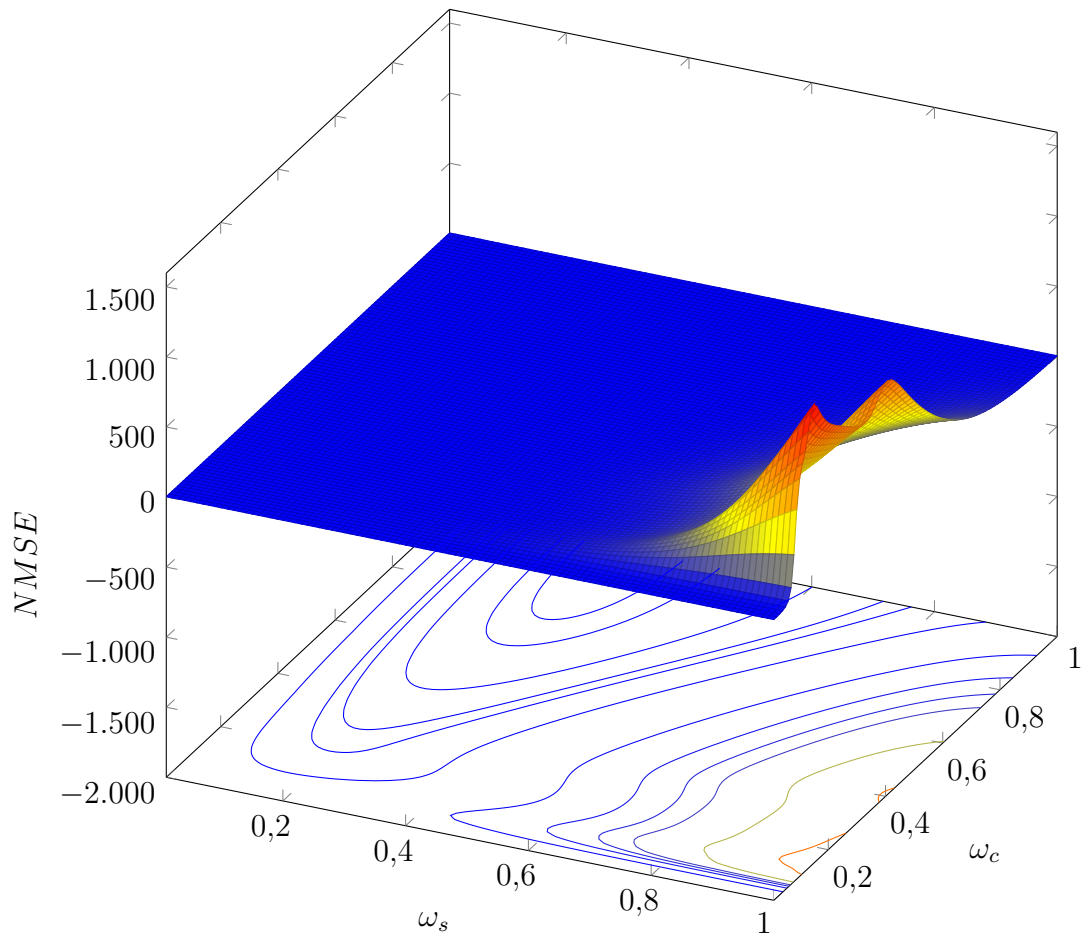


Figura 5.31 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 03.

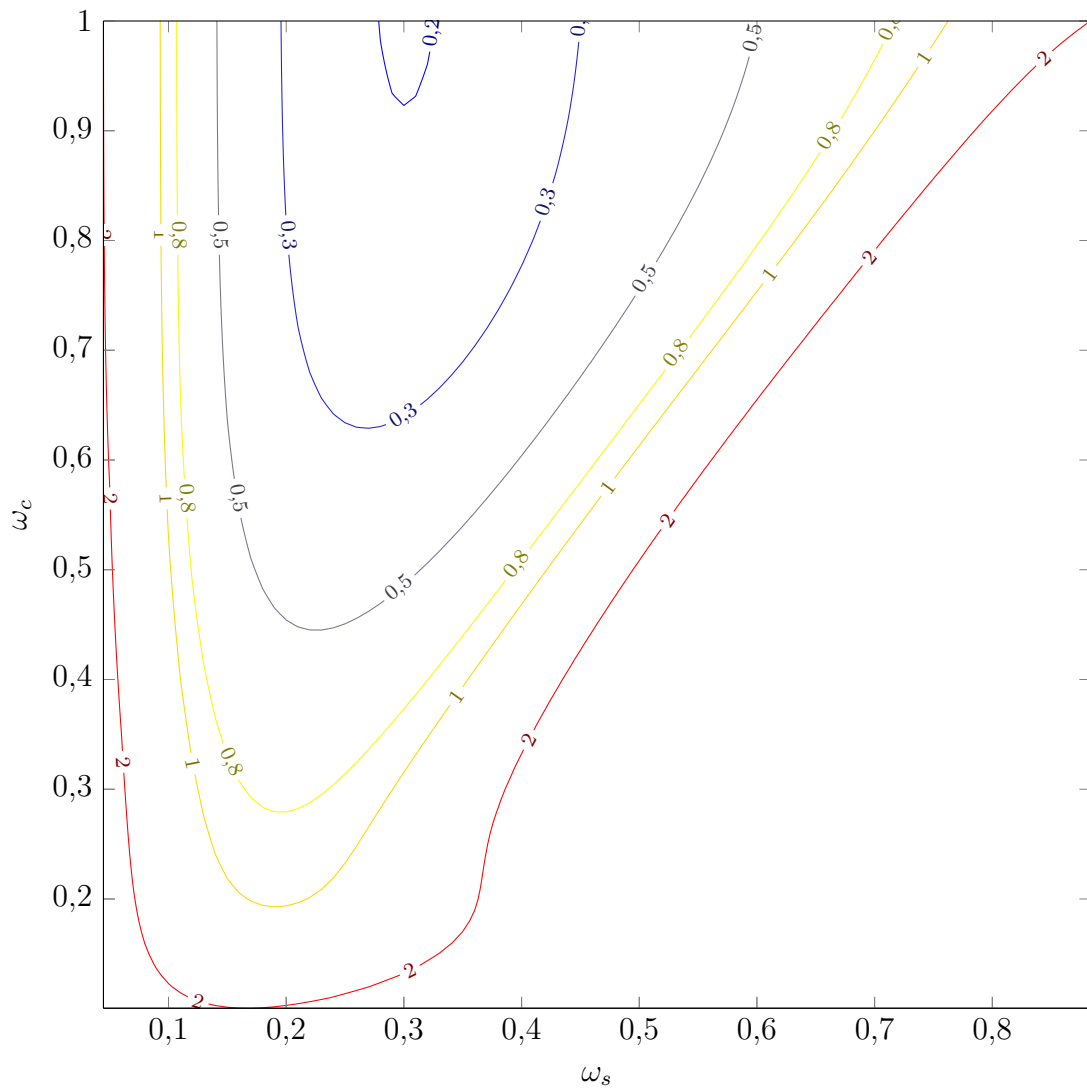


Figura 5.32 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 03.

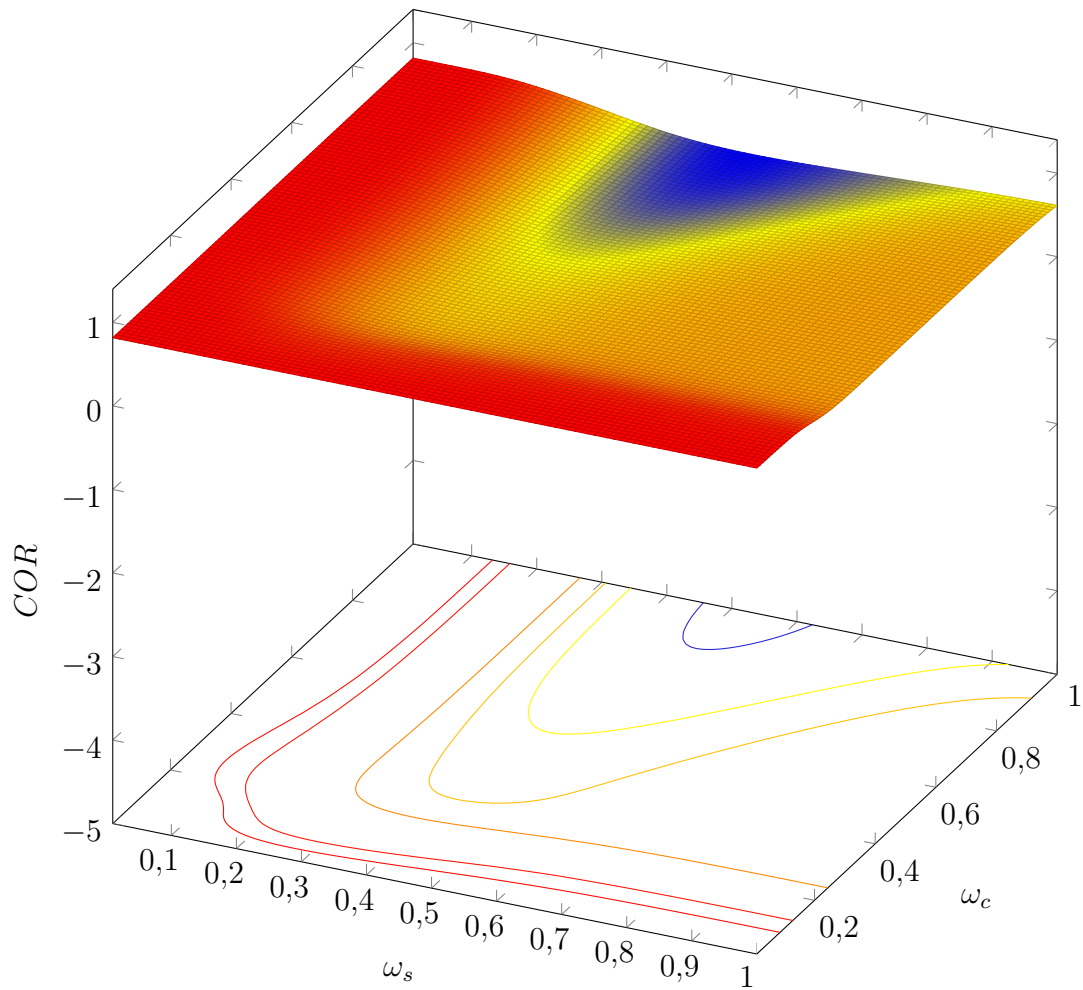


Figura 5.33 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 03.

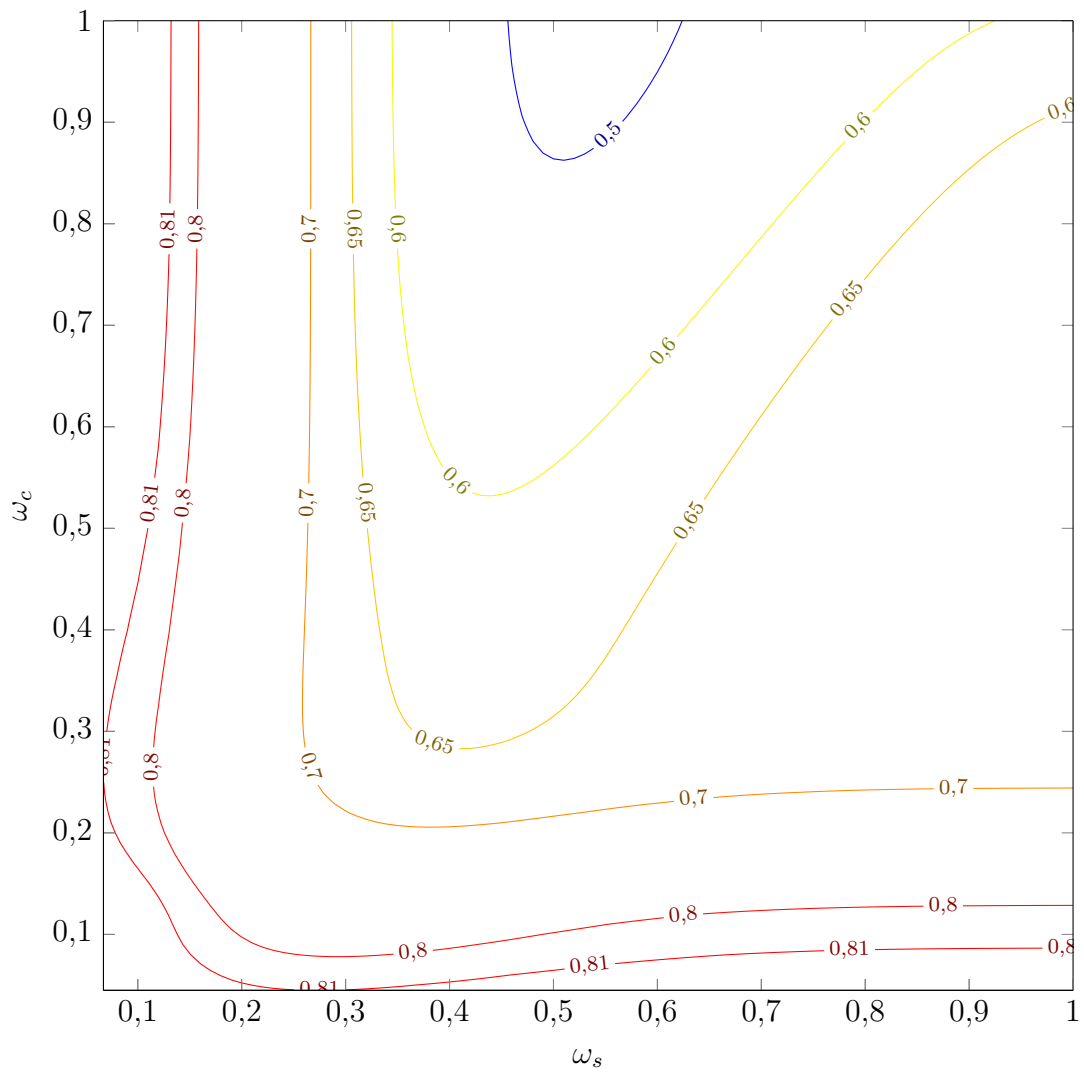


Figura 5.34 – Isolinhas do índice de correlação (*COR*) para a Simulação 03.

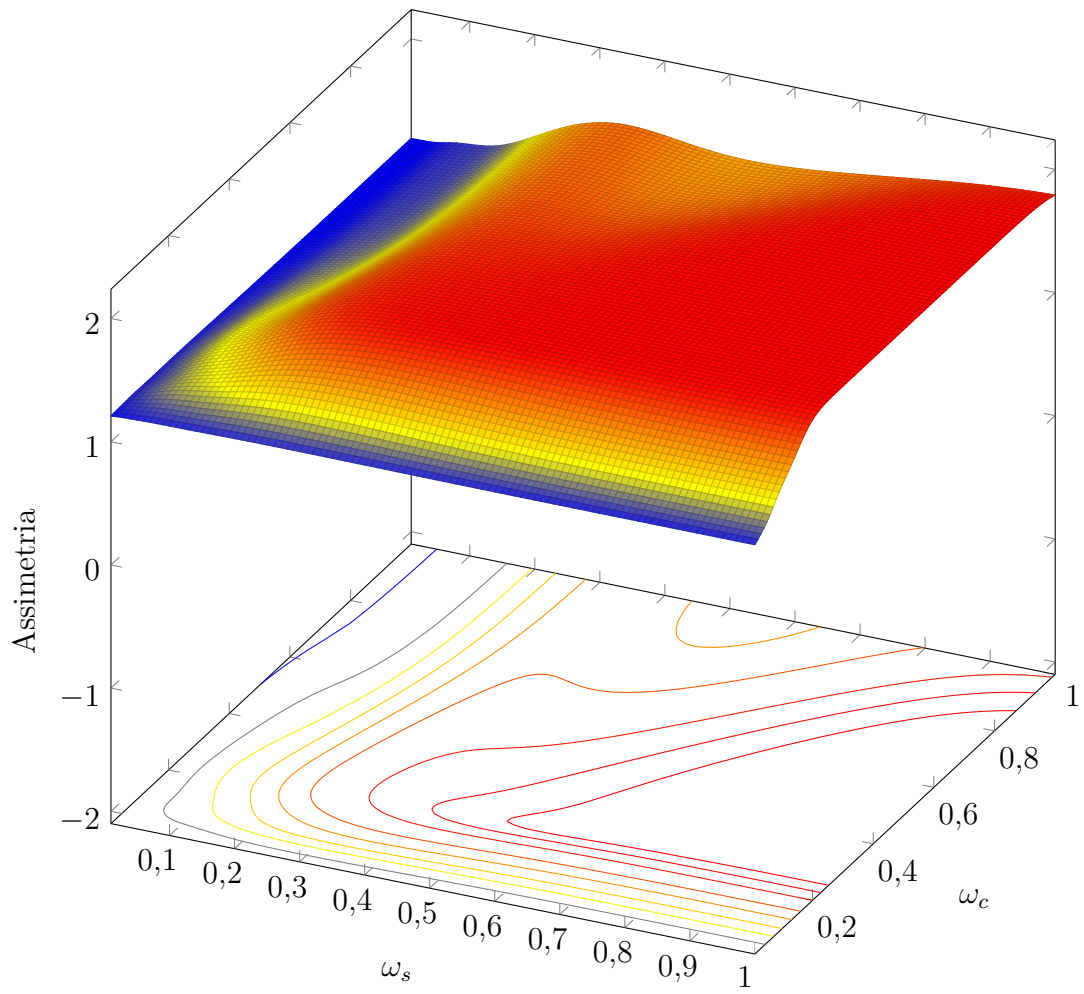


Figura 5.35 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 03.

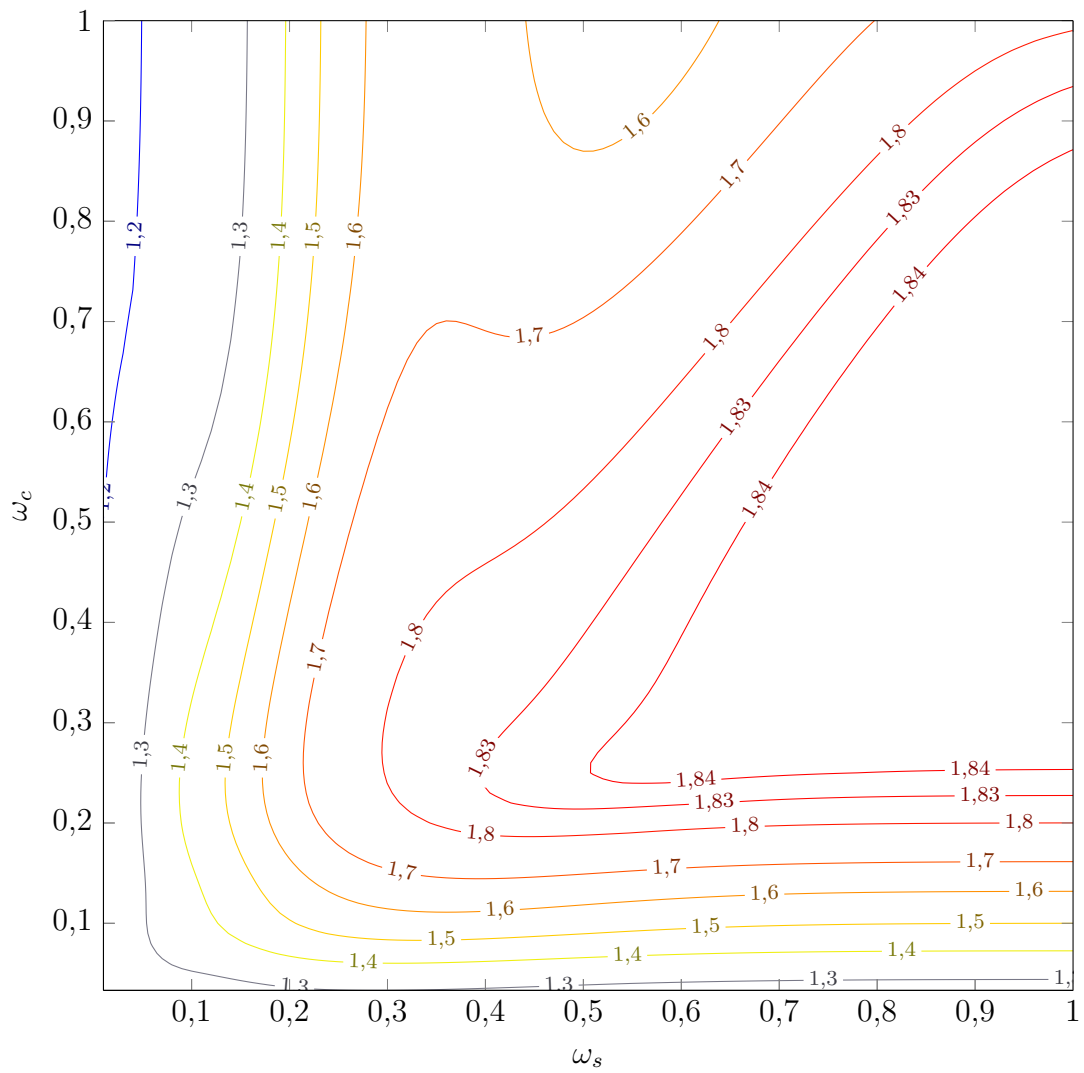


Figura 5.36 – Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 03.

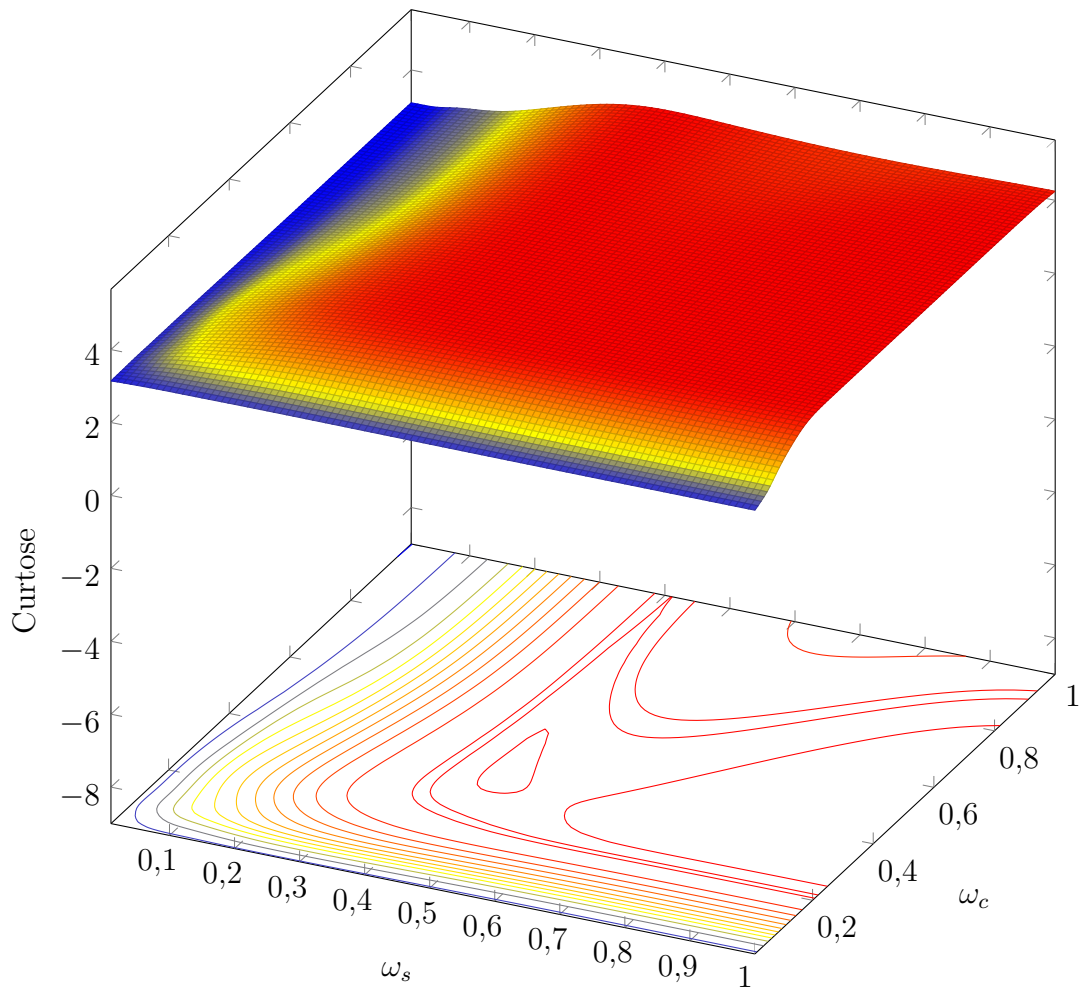


Figura 5.37 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 03.

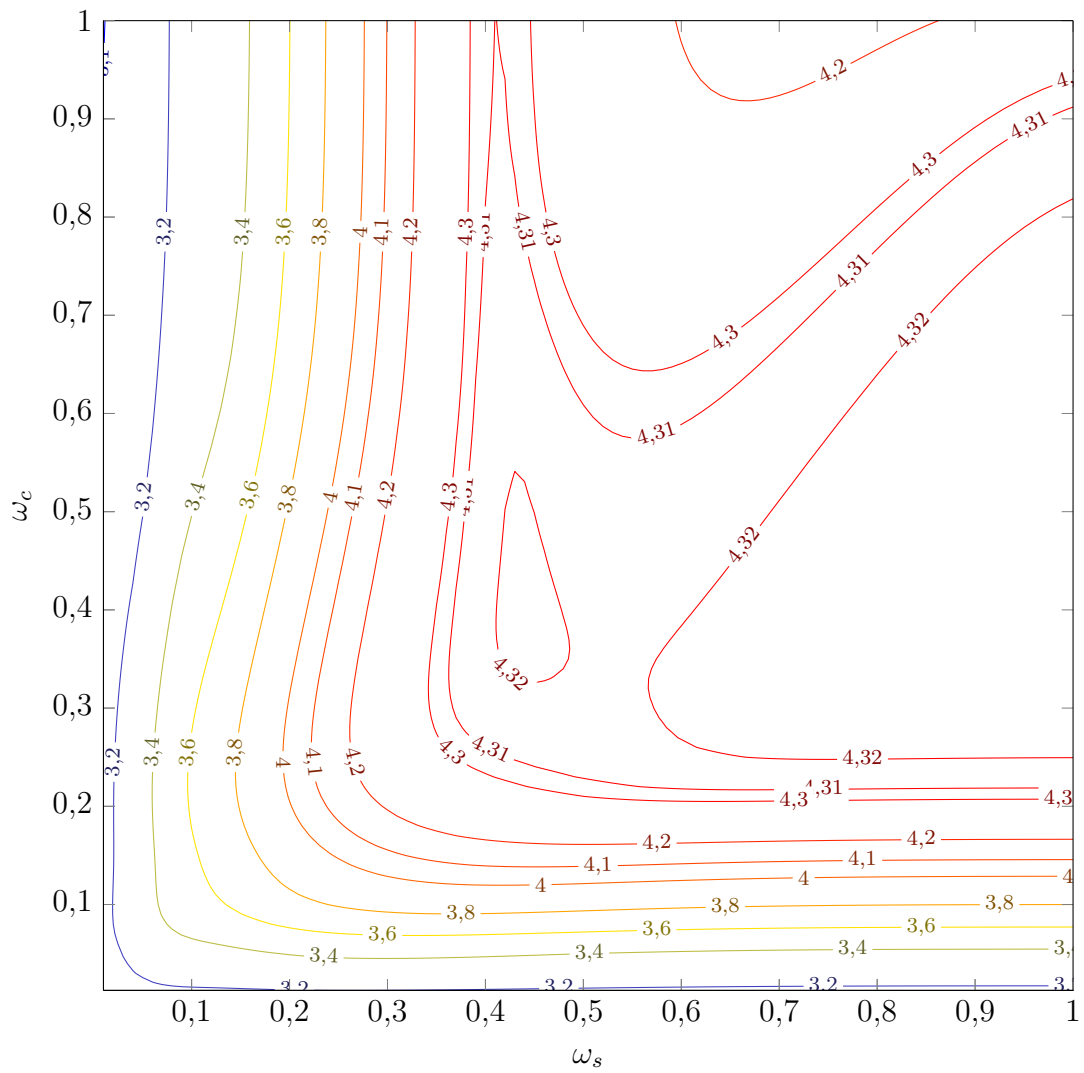


Figura 5.38 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 03.

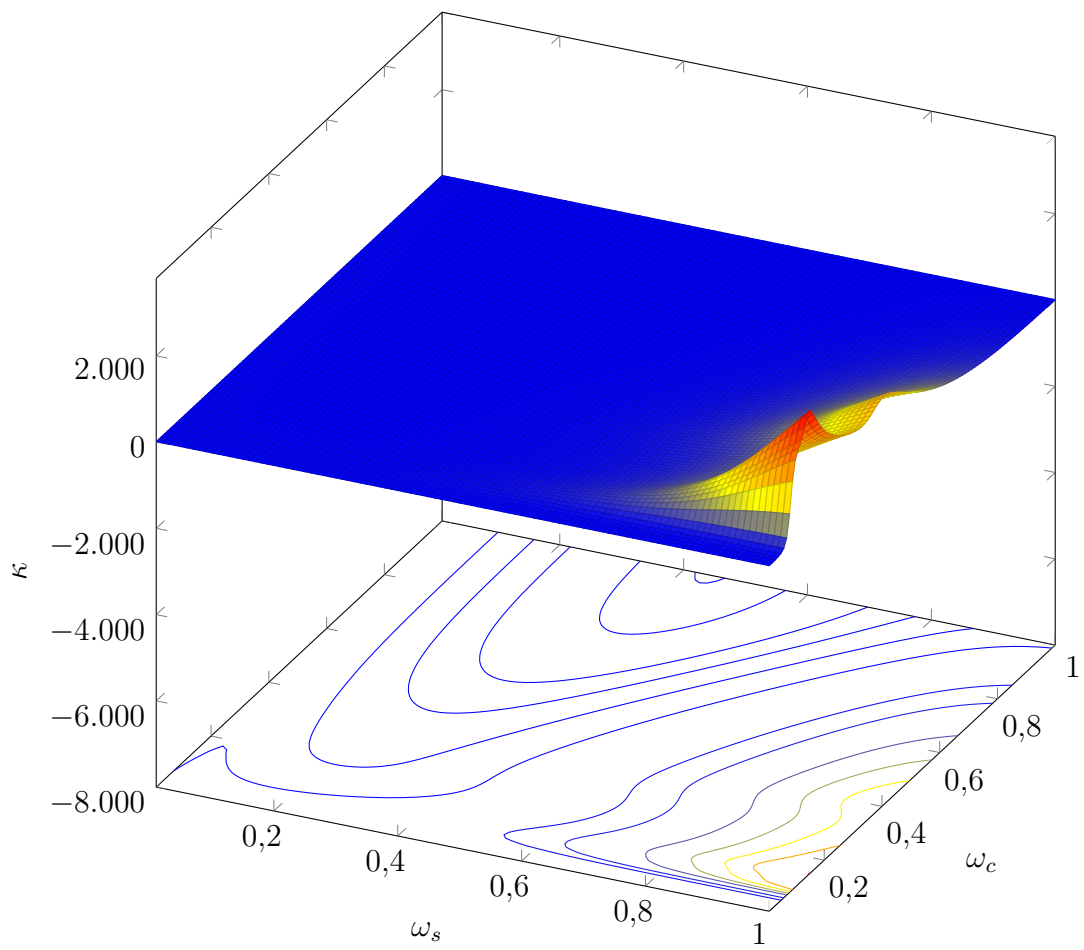


Figura 5.39 – Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 03.

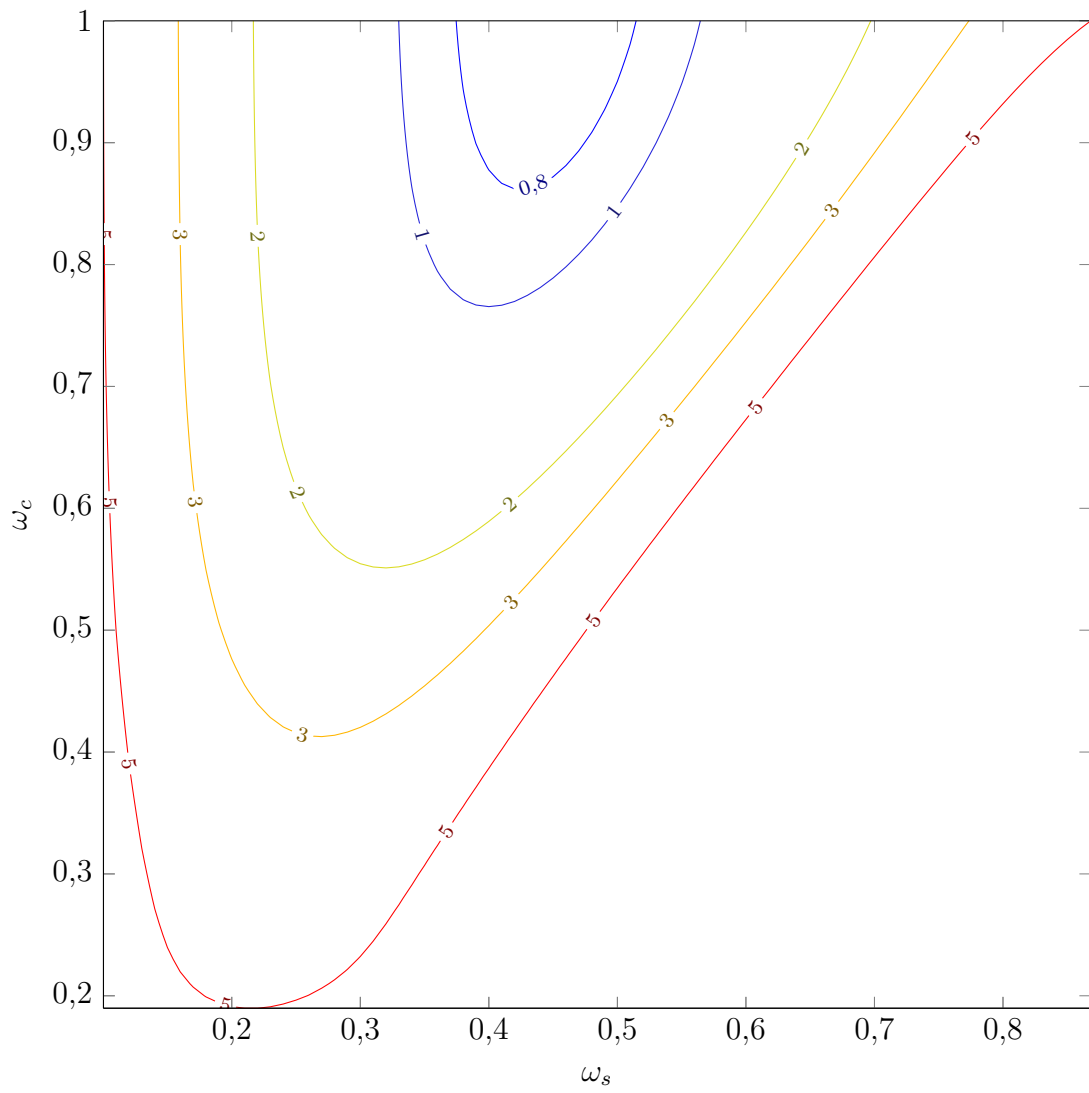


Figura 5.40 – Isolinhas do índice κ para a Simulação 03.

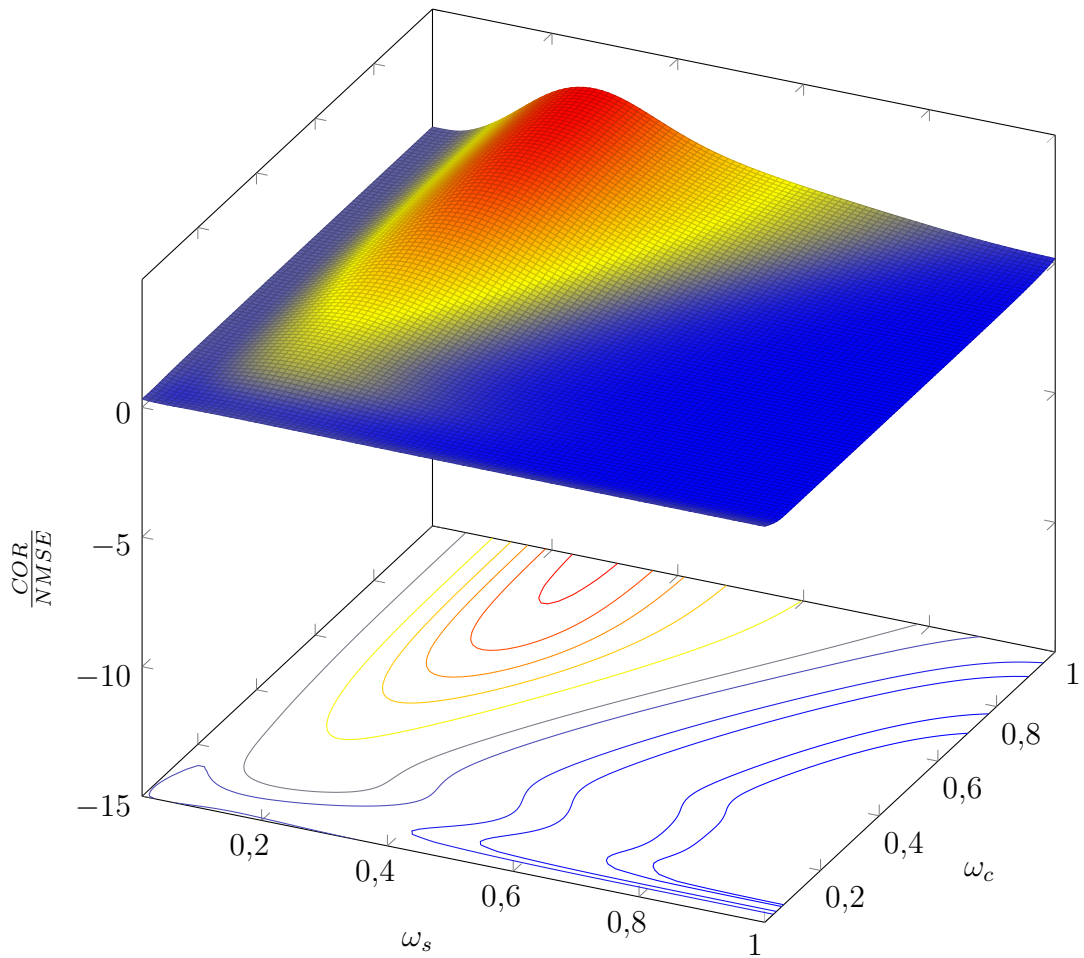


Figura 5.41 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 03.

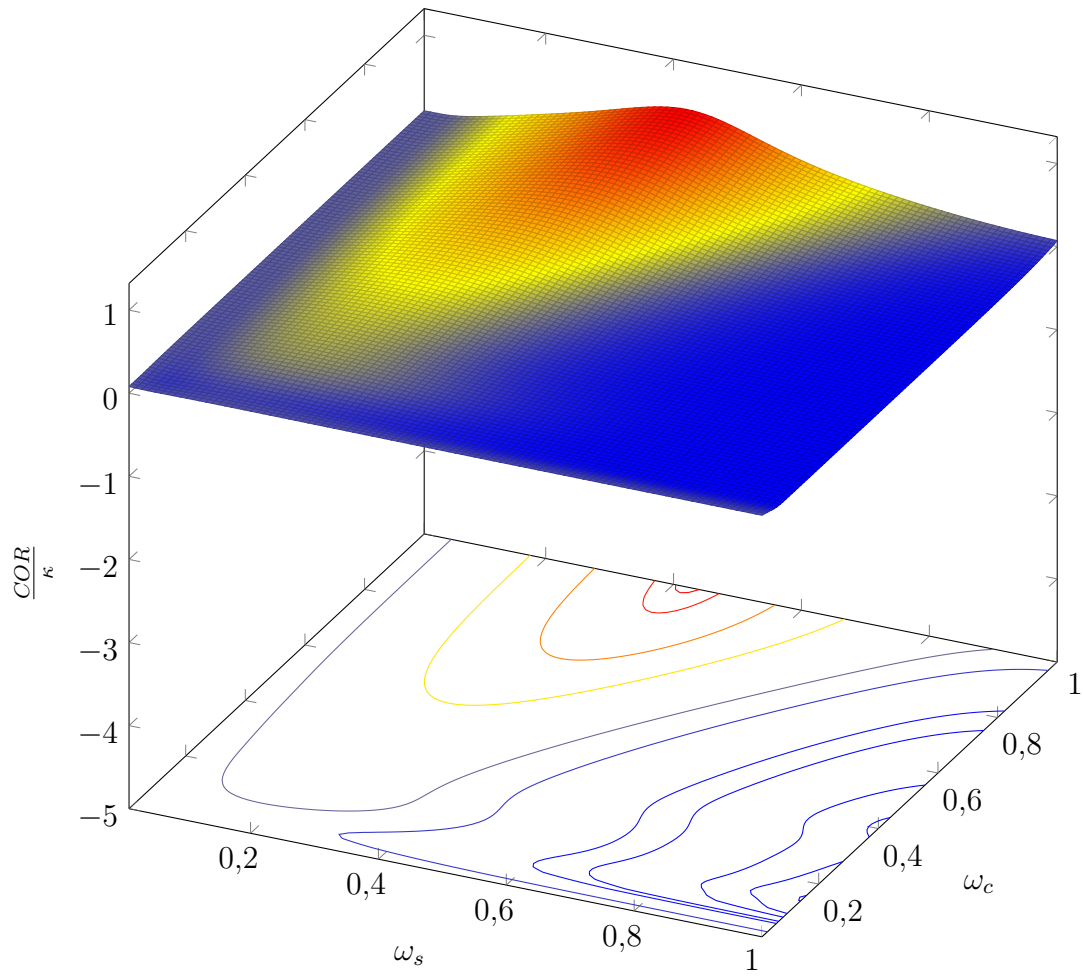


Figura 5.43 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 03.

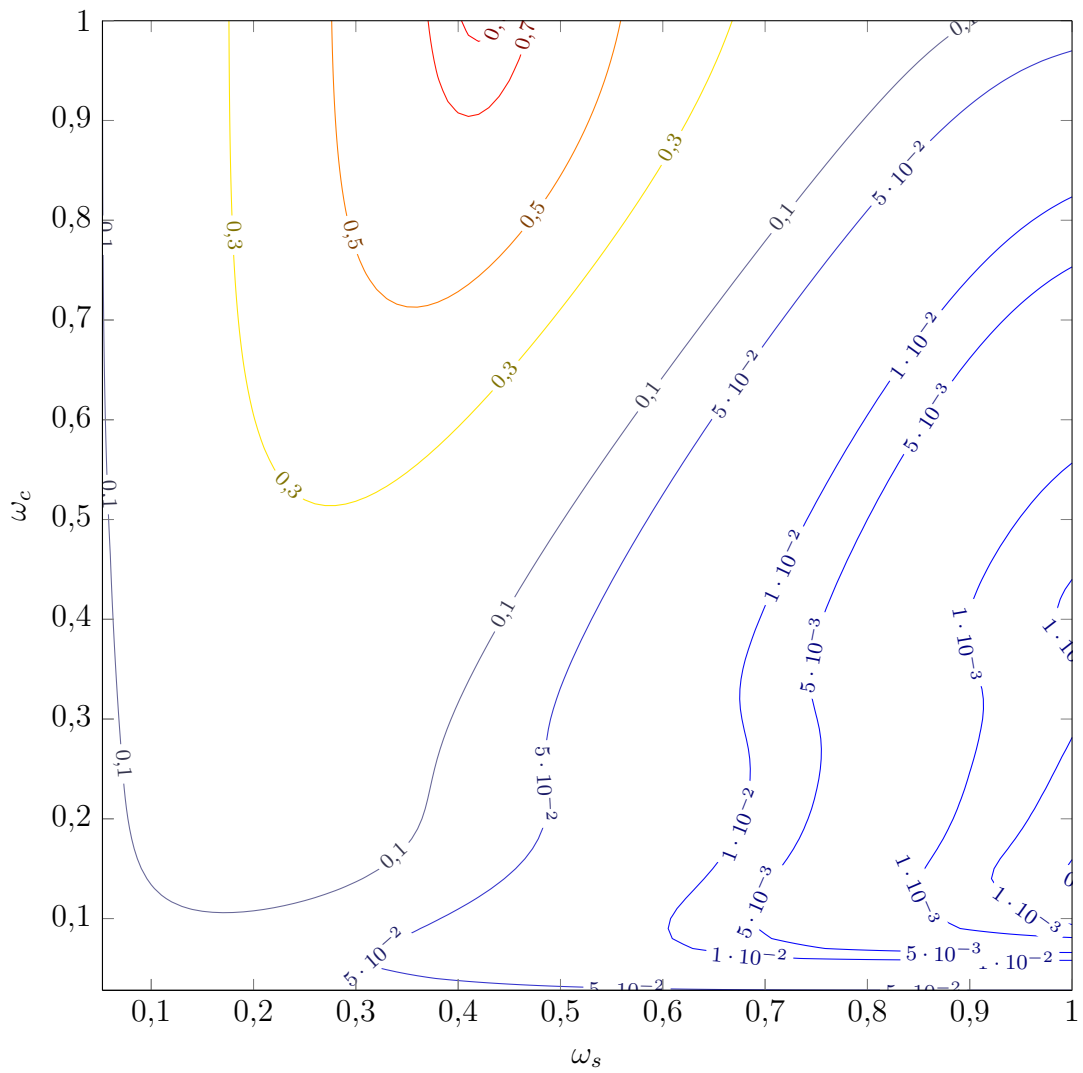


Figura 5.44 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 03.

Apresenta-se, ainda, os índices estatísticos e o gráfico de espalhamento para a Simulação 03 com os parâmetros reflexivos ótimos $\omega_c = 0,8$ e $\omega_s = 0,2$ após 3 reflexões ($n = 3$).

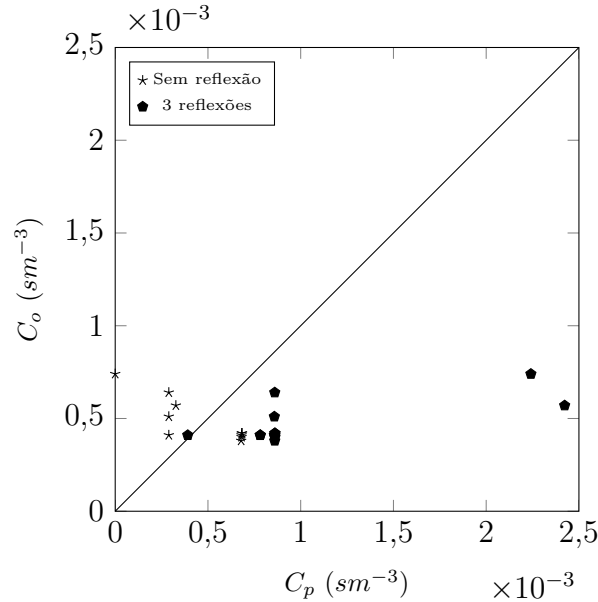


Figura 5.45 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,8$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 03.

Tabela 5.3 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,8$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 03.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	0,469	-0,744	-0,765	4,014
Com reflexão ($n = 3$)	0,302	0,771	-1,363	2,284

No último conjunto de gráficos expostos para o caso estável, Figuras 5.31 a 5.44 percebe-se que a assimetria é sempre positiva e seus valores estão contidos em um intervalo pequeno, assim como o índice de correlação. O padrão da curtose repetidamente recorda o padrão da assimetria.

Para as 3 simulações de dispersão sob condições estáveis apresentadas, encontrou-se valores ótimos para os parâmetros reflexivos em regiões muito próximas, sendo $0,5 < \omega_c < 1,0$, e $0,2 < \omega_s < 0,6$ para os 3 casos. O fato de coincidir a região ótima nos 3 casos

indica que em futuras simulações pode-se utilizar distribuições baseadas nestes valores, sem a necessidade de realizar todo o processo de otimização.

Observando os gráficos do erro quadrático médio normalizado, Figuras 5.1, 5.16 e 5.31, percebe-se o mesmo padrão nas proximidades de $\omega_s = 1,0$, simultaneamente à ω_c próximo de 0,1. Não se sabe exatamente porque isto ocorre, uma possível explicação é que $\omega_s = 1,0$ não é capaz de absorver as contribuições necessárias para ajustar as reflexões no solo, confirmando os valores ótimos encontrados para ω_s .

Cabe mencionar que os menores valores para o índice κ coincidem ou estão próximos às regiões consideradas ótimas pela relação $\frac{COR}{NMSE}$. O fenômeno constatado no erro quadrático médio normalizado nas proximidades de $\omega_s = 1,0$ ocorre também na mesma região para o índice κ , como exposto nas Figuras 5.11, 5.26 e 5.41.

5.1.2 Condições Convectivas

Nesta subseção são apresentados os resultados da otimização realizada para as Simulações 04 a 06, com o intuito de determinar quais os valores de ω_c e ω_s que melhor se ajustam às reflexões.

5.1.2.1 Simulação 04

A seguir serão apresentados os resultados da otimização para a Simulação 04, os mesmos índices apresentados na subseção anterior serão aqui expostos. Nas Figuras 5.46 e 5.47 tem-se o gráfico e as isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), respectivamente; nas Figuras 5.48 e 5.49 o gráfico e as isolinhas do índice de correlação (COR); nas Figuras 5.50 e 5.51 o gráfico e as isolinhas da assimetria; nas Figuras 5.52 e 5.53 o gráfico e as isolinhas da curtose; nas Figuras 5.54 e 5.55 o gráfico e as isolinhas do índice κ ; nas Figuras 5.56 e 5.57 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$; e nas Figuras 5.58 e 5.59 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$.

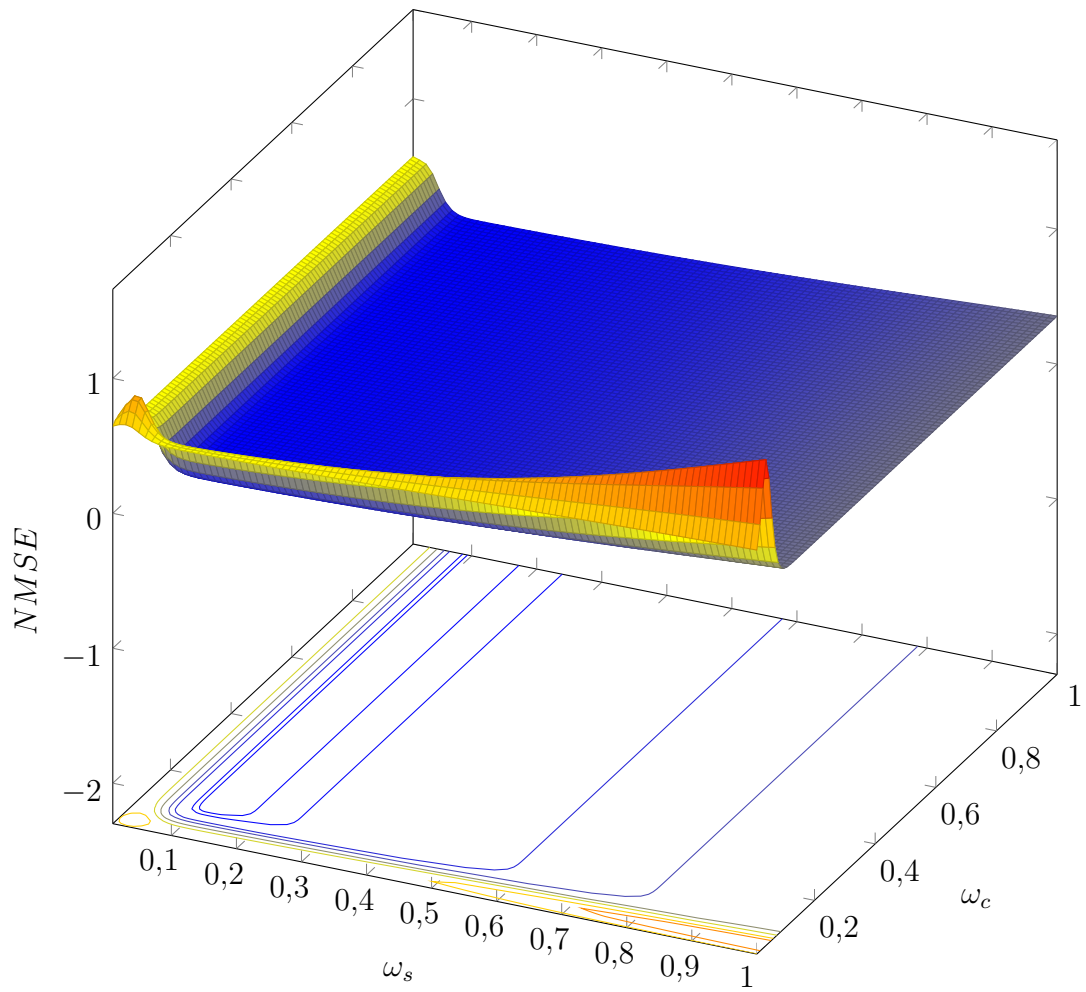


Figura 5.46 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 04.

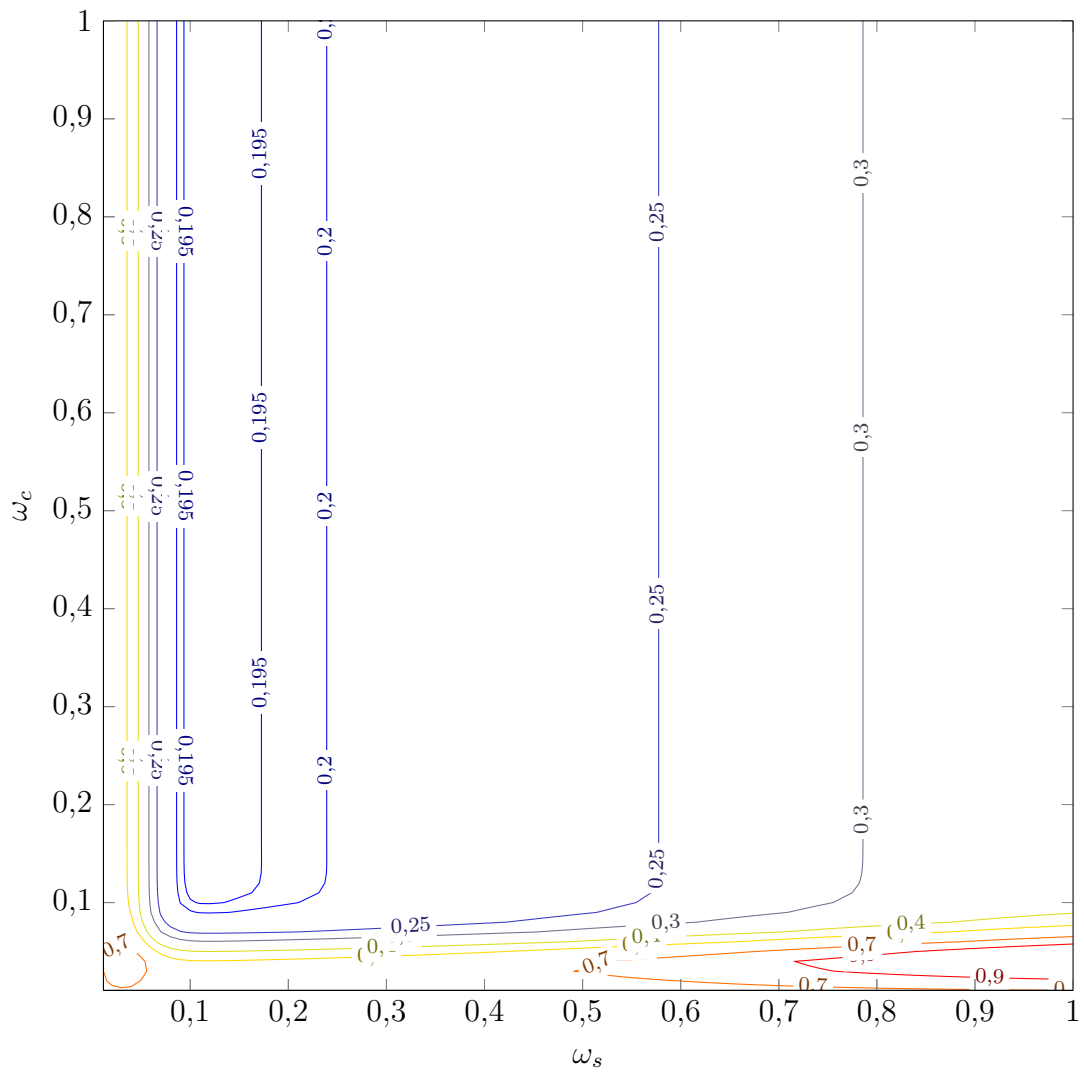


Figura 5.47 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado (*NMSE*) para a Simulação 04.

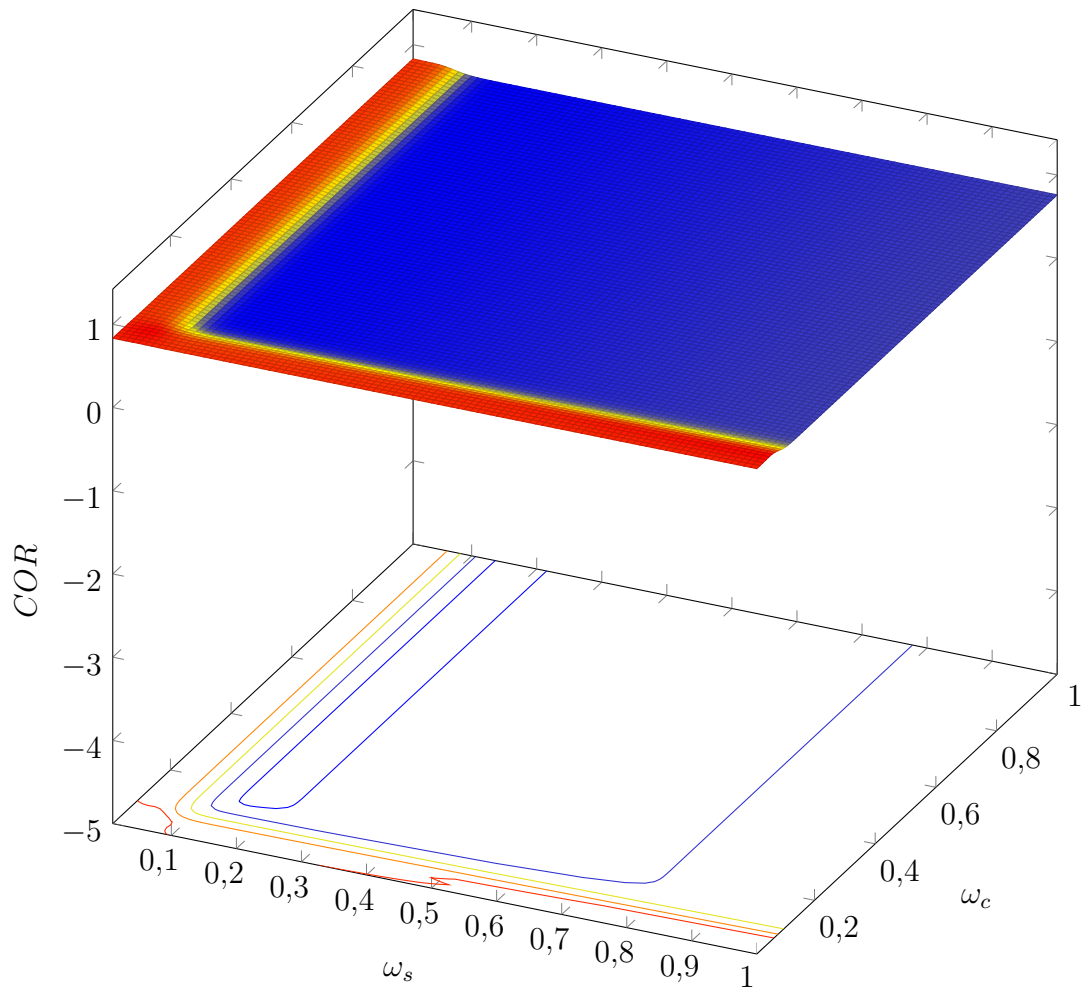


Figura 5.48 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 04.

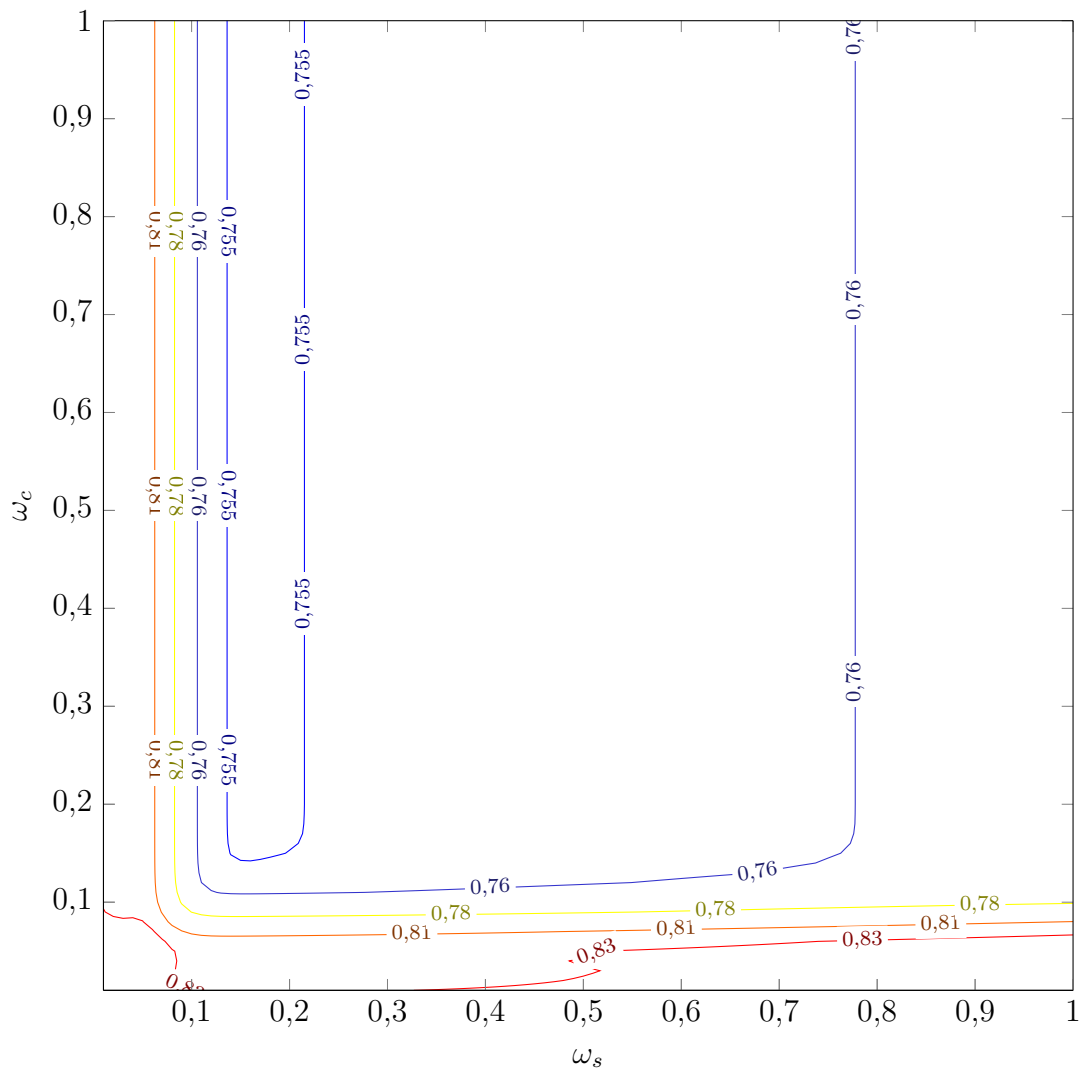


Figura 5.49 – Isolinhas do índice de correlação para (*COR*) a Simulação 04.

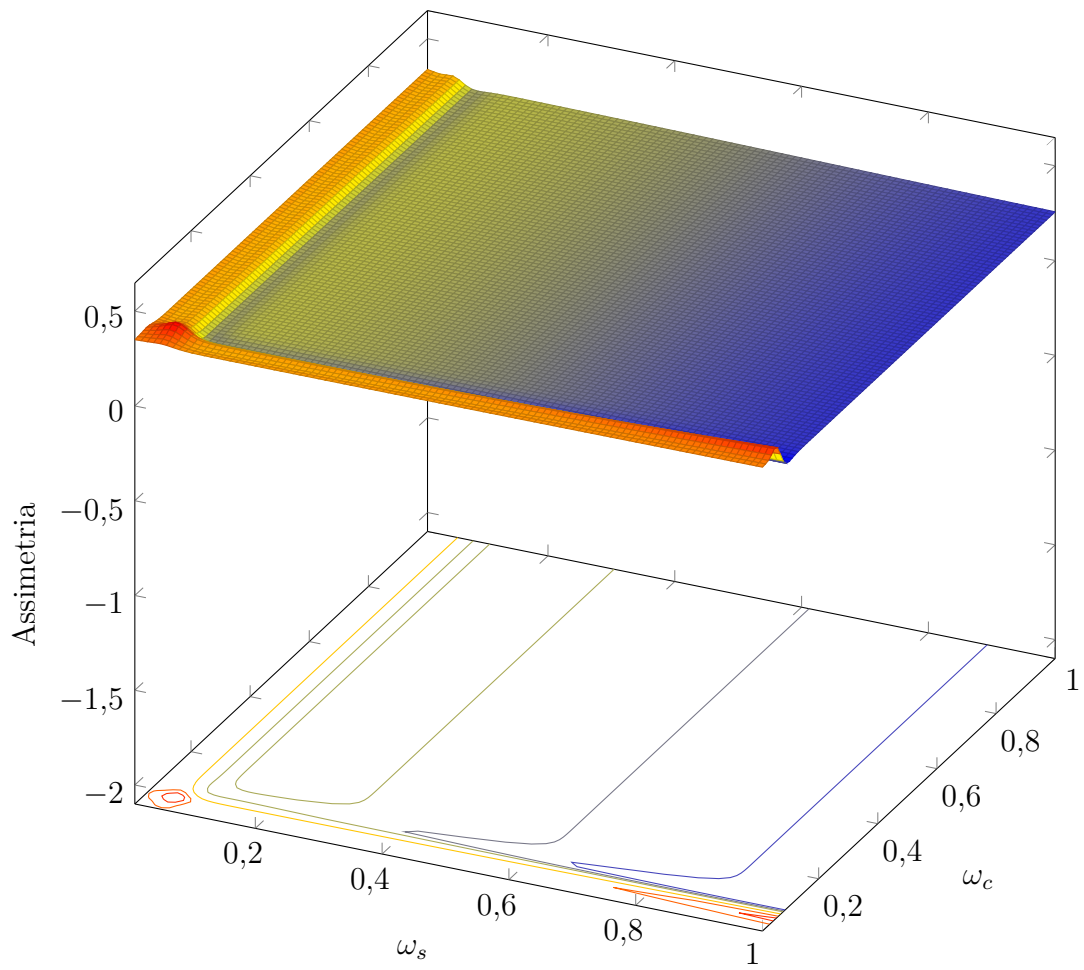


Figura 5.50 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 04.

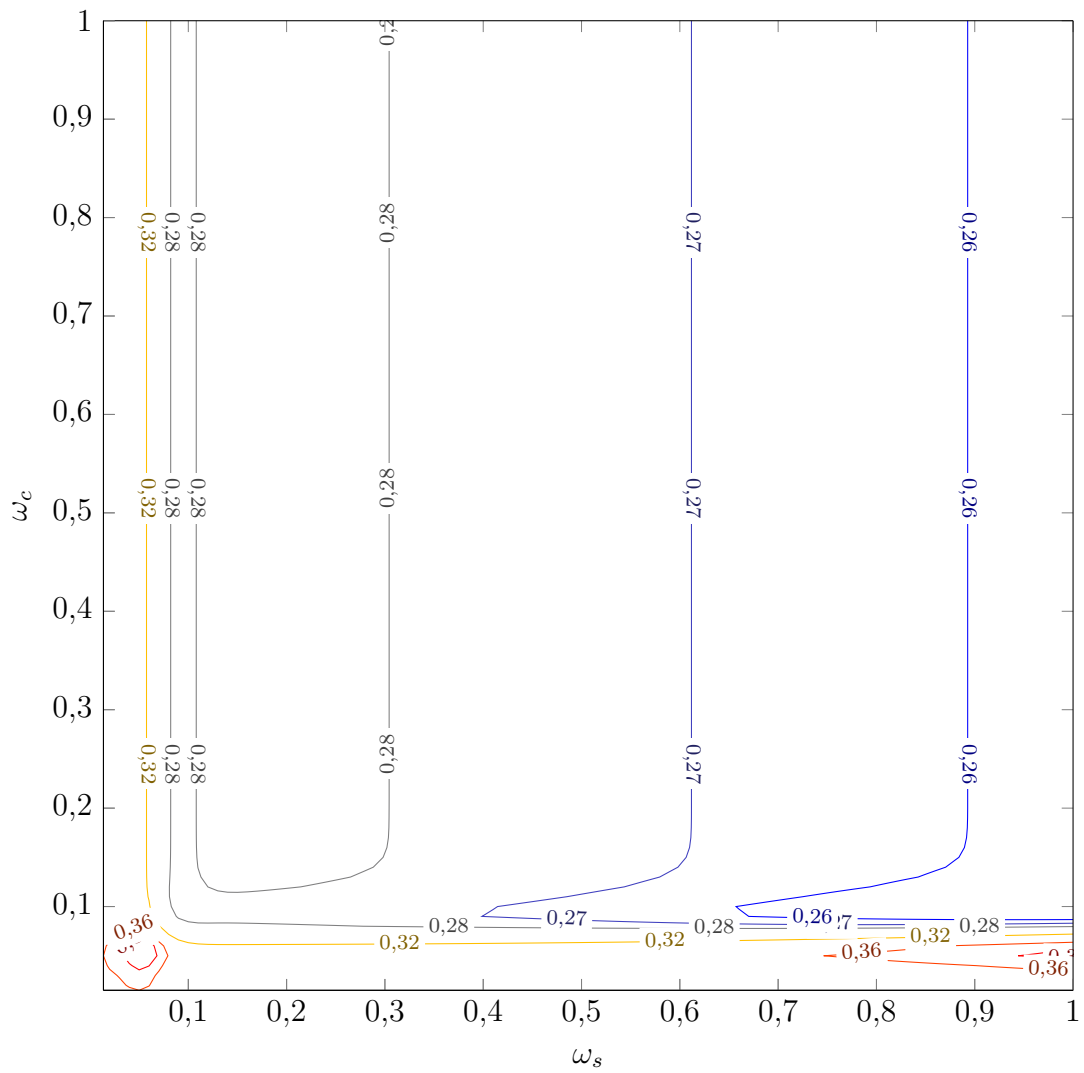


Figura 5.51 – Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 04.

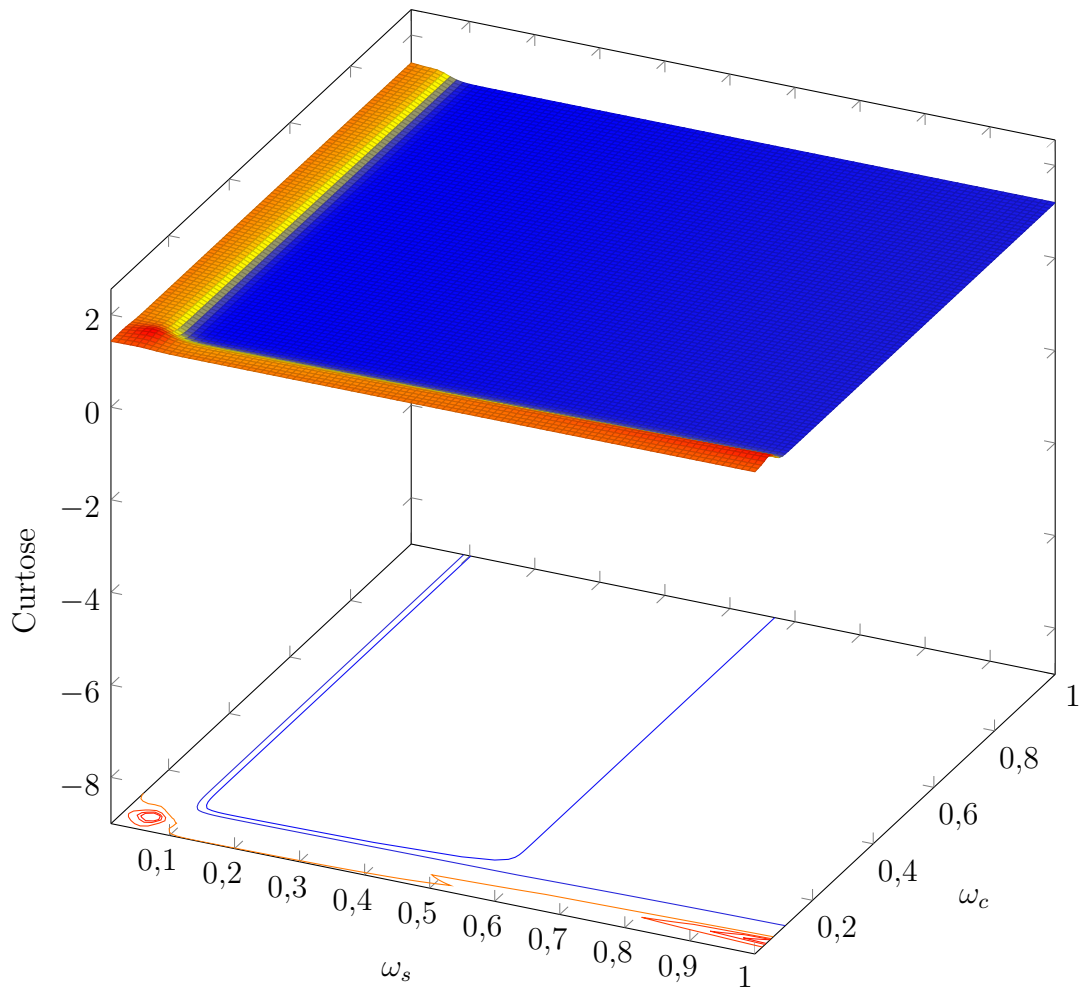


Figura 5.52 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação

04.

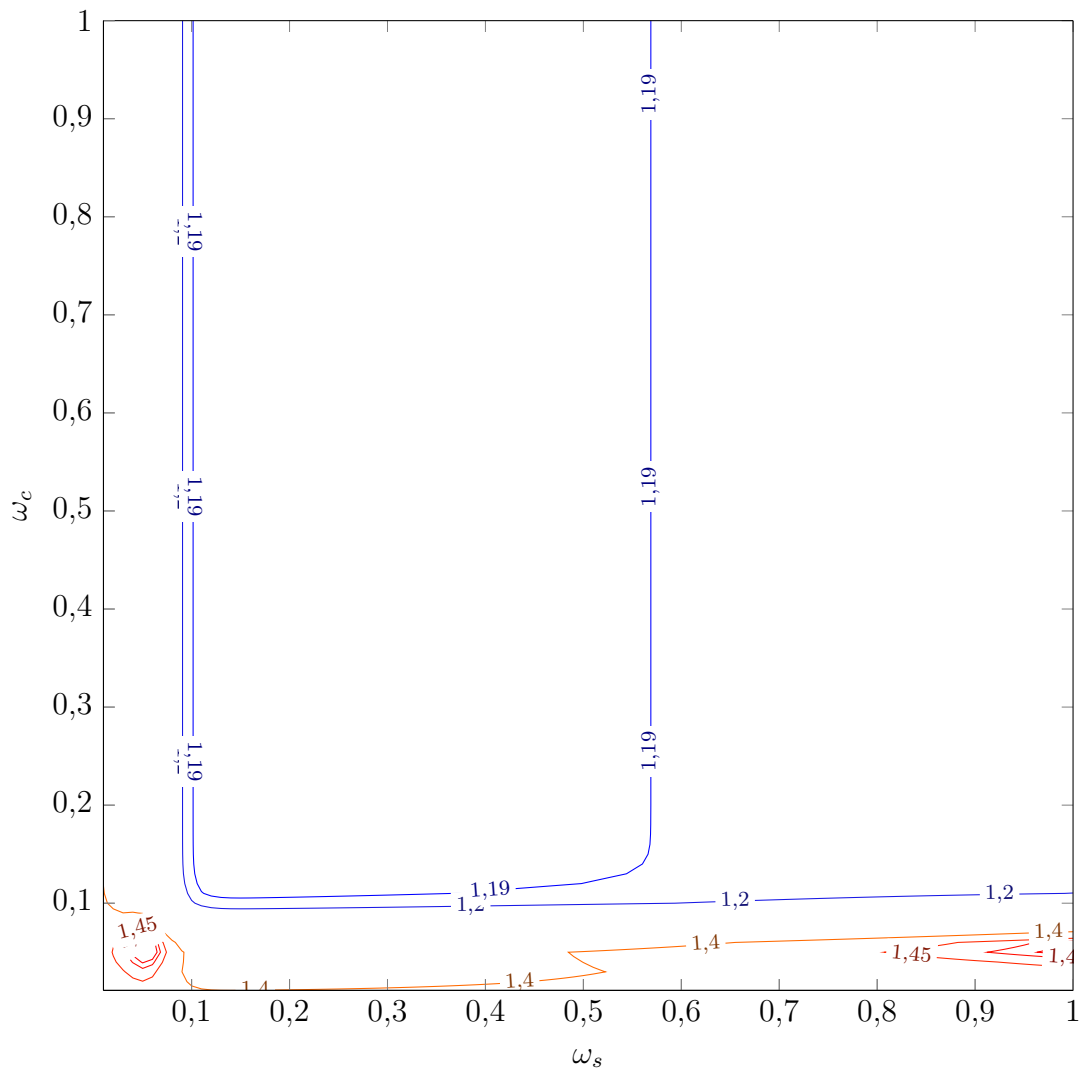


Figura 5.53 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 04.

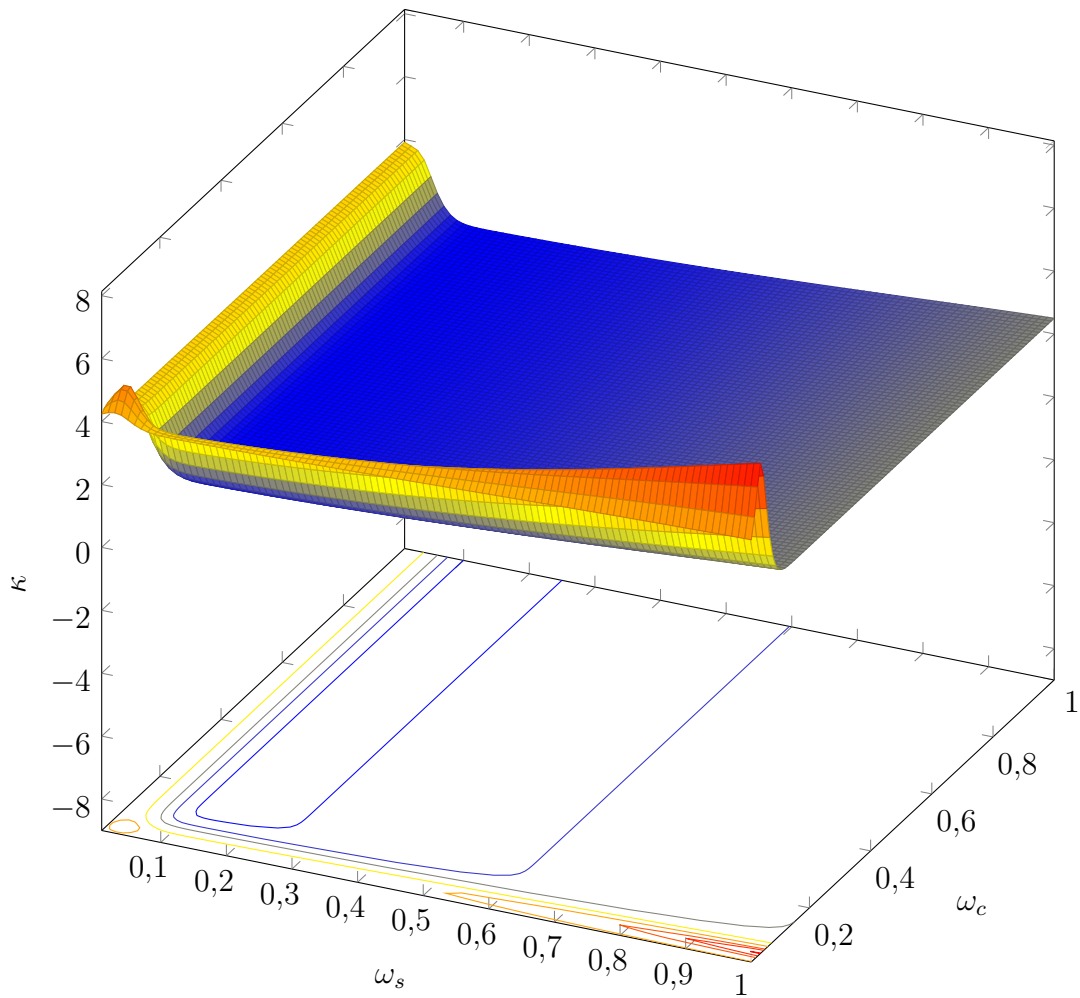


Figura 5.54 – Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 04.

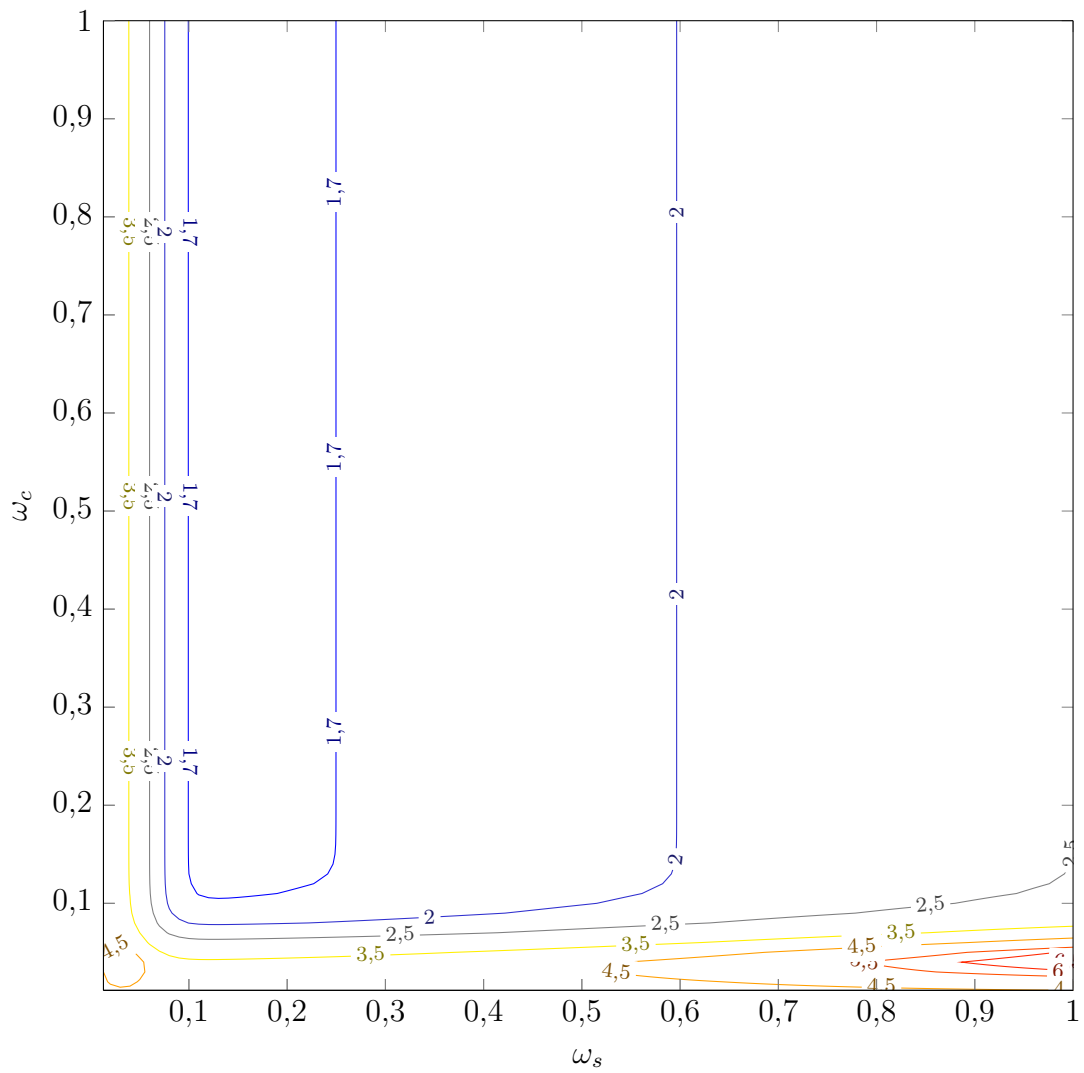


Figura 5.55 – Isolinhas do índice κ para a Simulação 04.

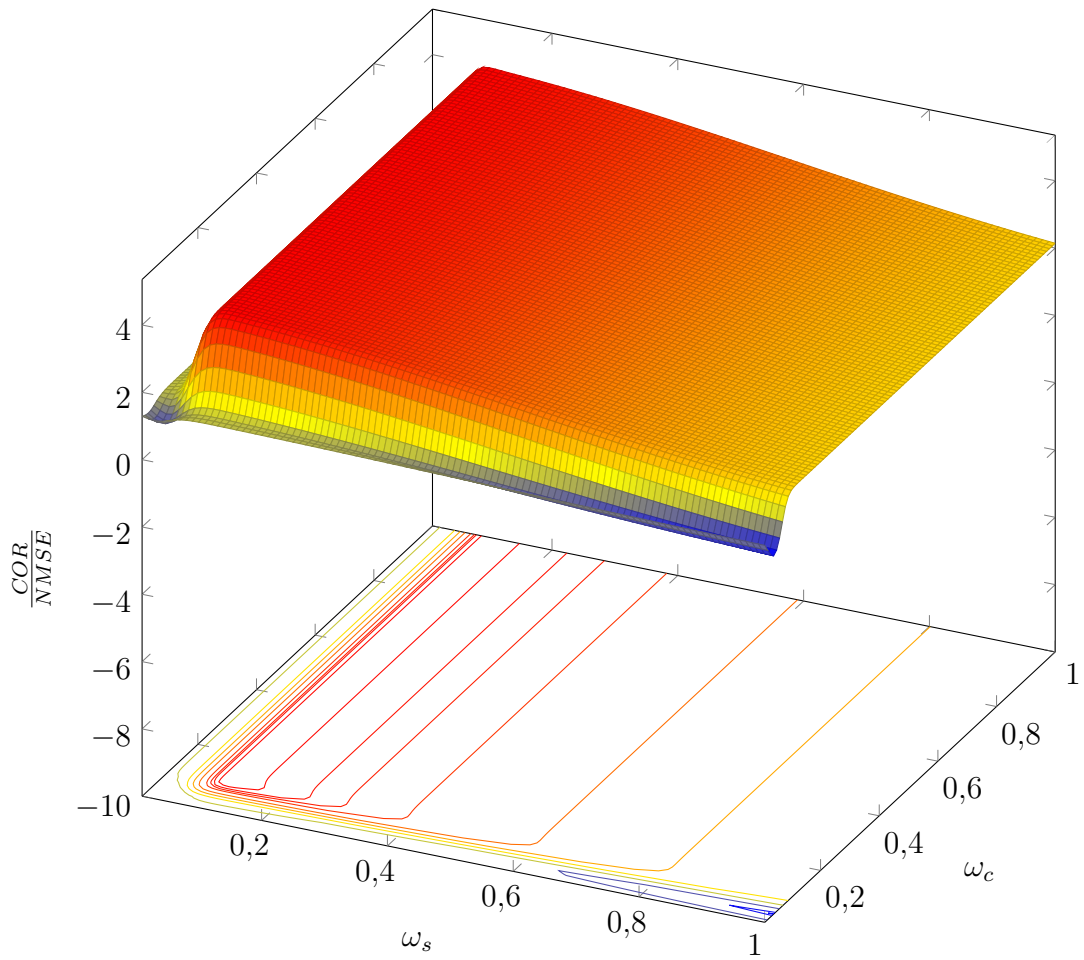


Figura 5.56 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 04.

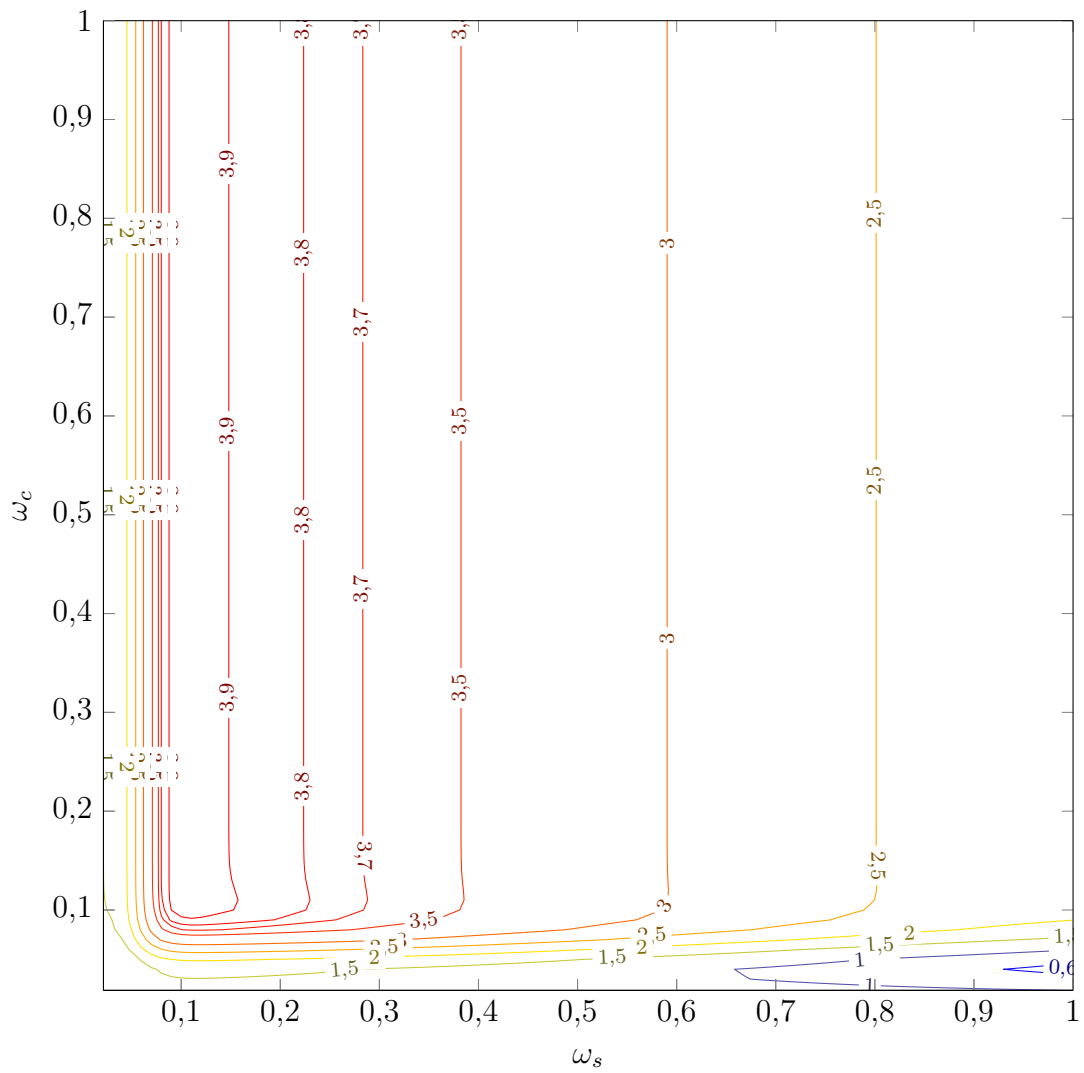


Figura 5.57 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 04.

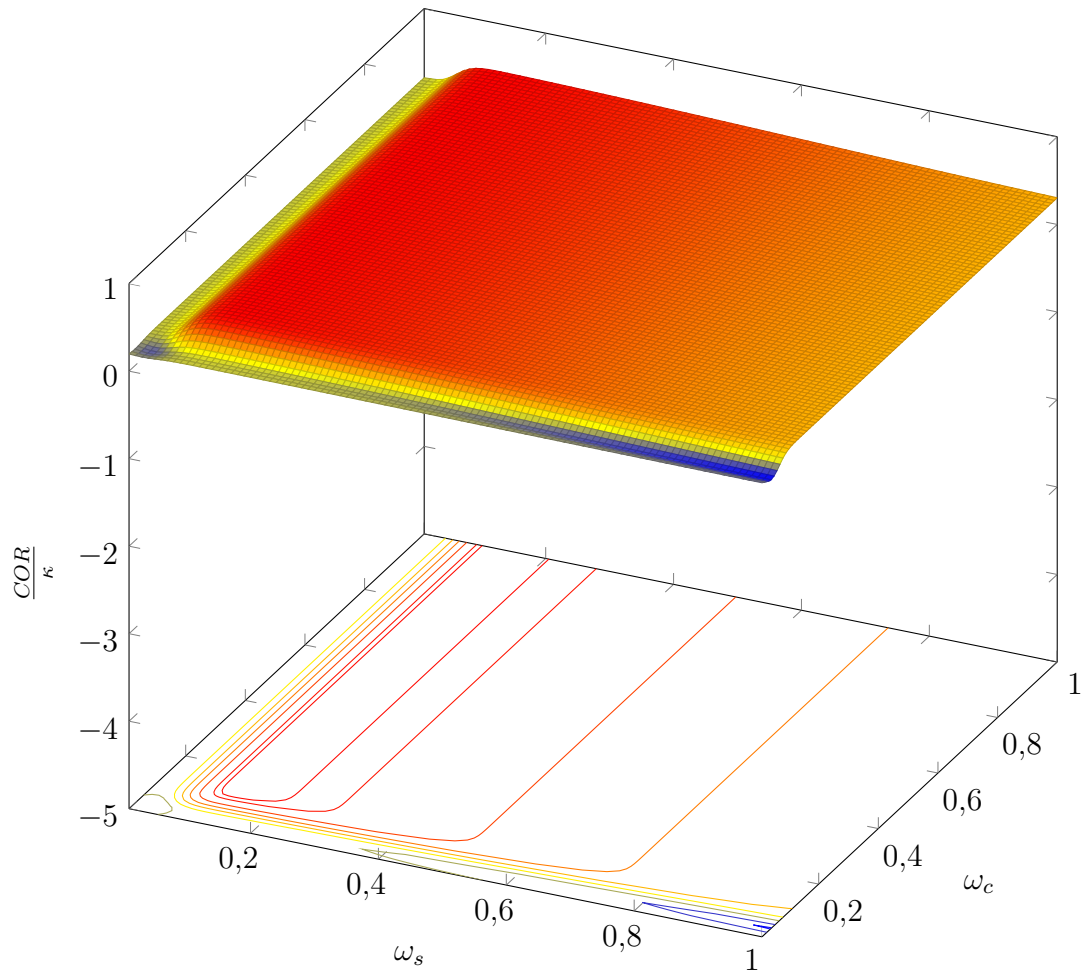


Figura 5.58 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 04.

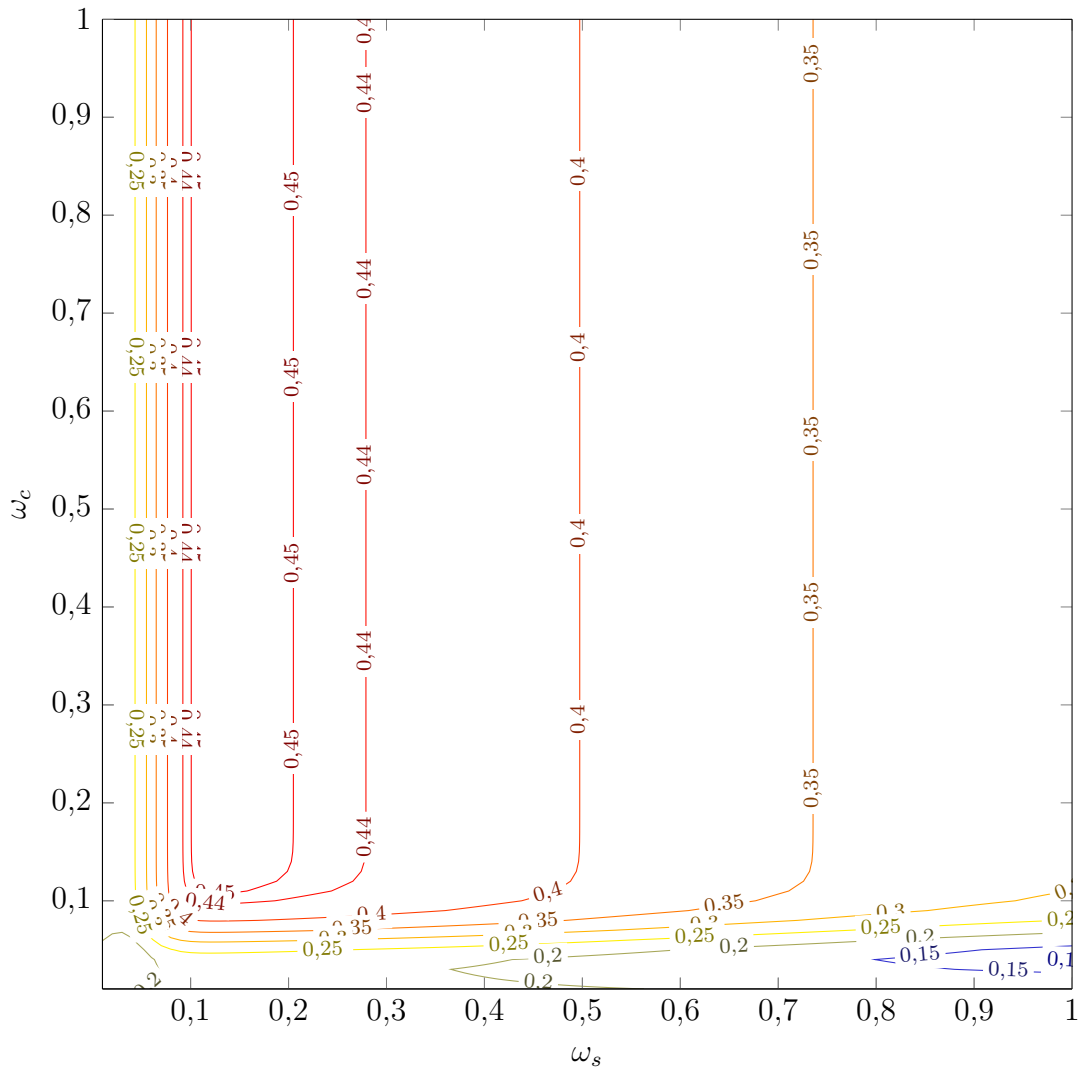


Figura 5.59 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 04.

Nesta primeira simulação sob condições convectivas, observa-se que a assimetria e a curtose, Figuras 5.50 a 5.53, tem os mesmos padrões e variam pouco, sendo a assimetria positiva para quaisquer valores de ω_c e ω_s . Outra semelhança verificada é que o intervalo ótimo de $\frac{COR}{NMSE}$ é o mesmo onde o índice κ tem os menores valores.

De acordo com a otimização, apresenta-se os índices estatísticos e o gráfico de espalhamento para um dos valores ótimos $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,1$ para a Simulação 04 após 1 reflexão ($n = 1$).

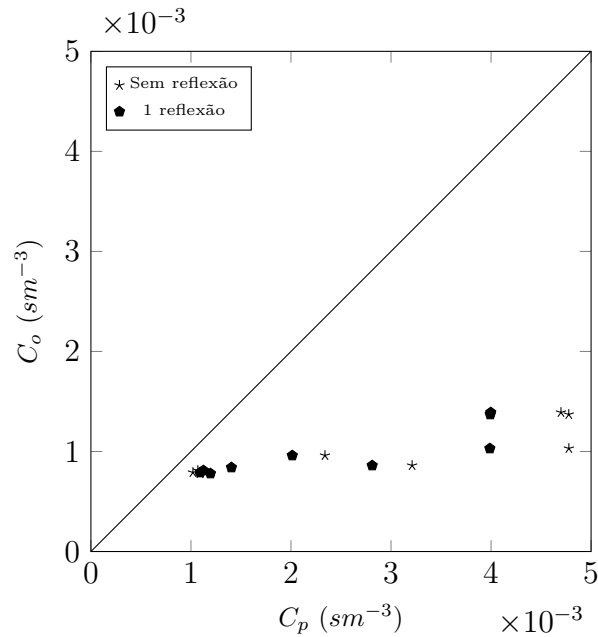


Figura 5.60 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,1$ para a Simulação 04.

Tabela 5.4 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,1$ para a Simulação 04.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	1,863	0,762	-1,501	5,979
Com reflexão ($n = 1$)	0,193	0,763	-1,38	1,696

5.1.2.2 Simulação 05

A seguir serão apresentados os resultados da otimização para a Simulação 05, os mesmos índices apresentados na subseção anterior serão aqui expostos. Nas Figuras 5.61 e 5.62 tem-se o gráfico e as isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), respectivamente; nas Figuras 5.63 e 5.64 o gráfico e as isolinhas do índice de correlação (COR); nas Figuras 5.65 e 5.66 o gráfico e as isolinhas da assimetria; nas Figuras 5.67 e 5.68 o gráfico e as isolinhas da curtose; nas Figuras 5.69 e 5.70 o gráfico e as isolinhas do índice κ ; nas Figuras 5.71 e 5.72 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$; e nas Figuras 5.73 e 5.74 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$.

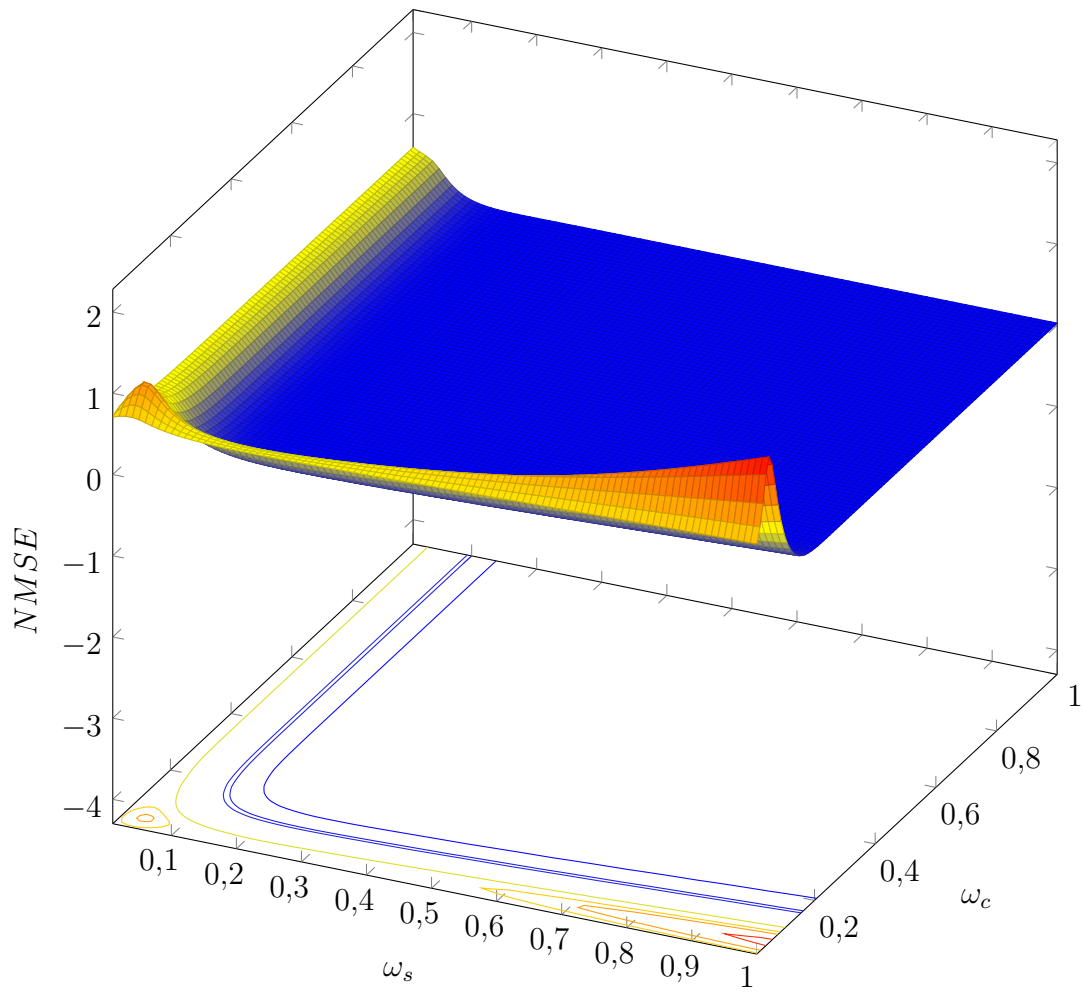


Figura 5.61 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 05.

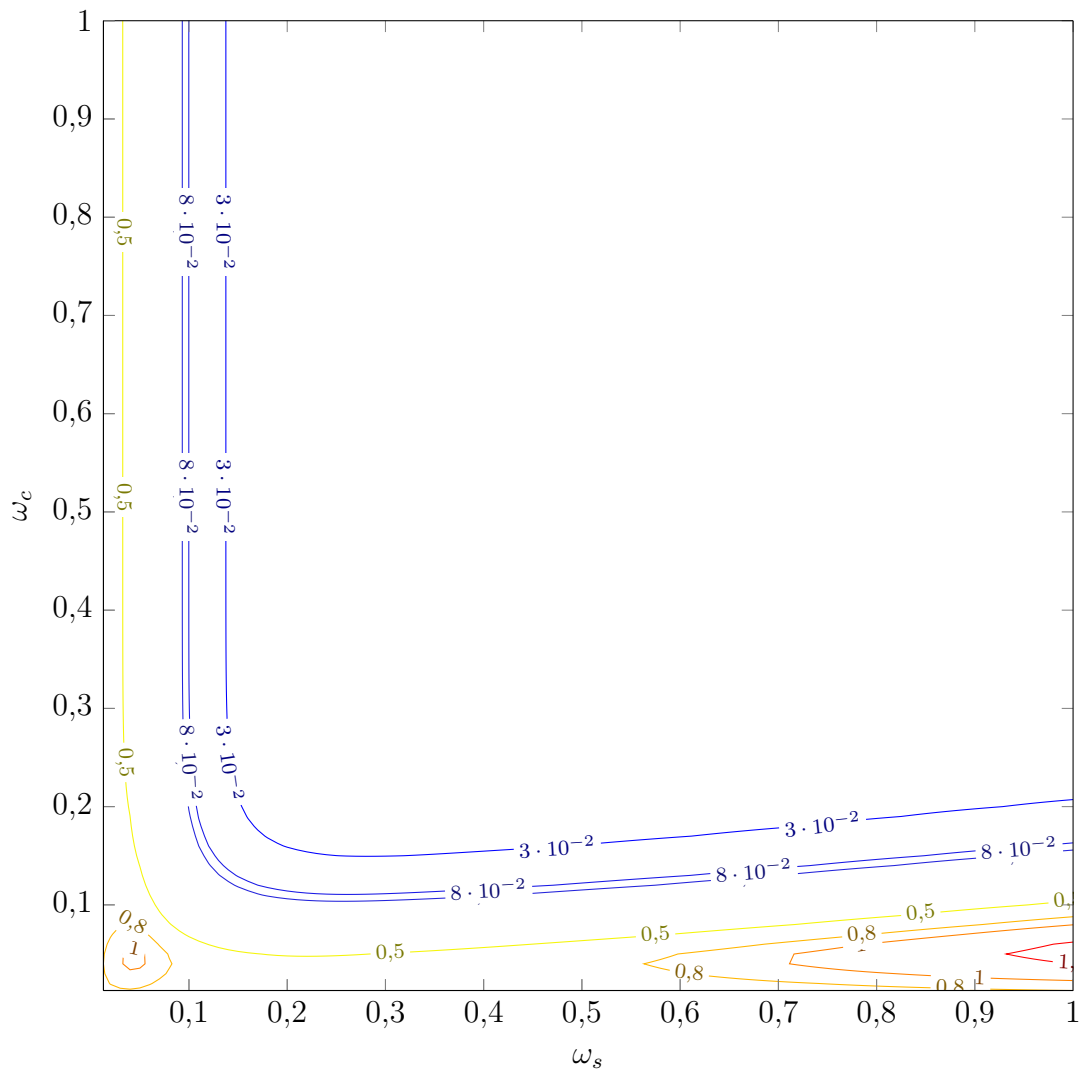


Figura 5.62 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 05.

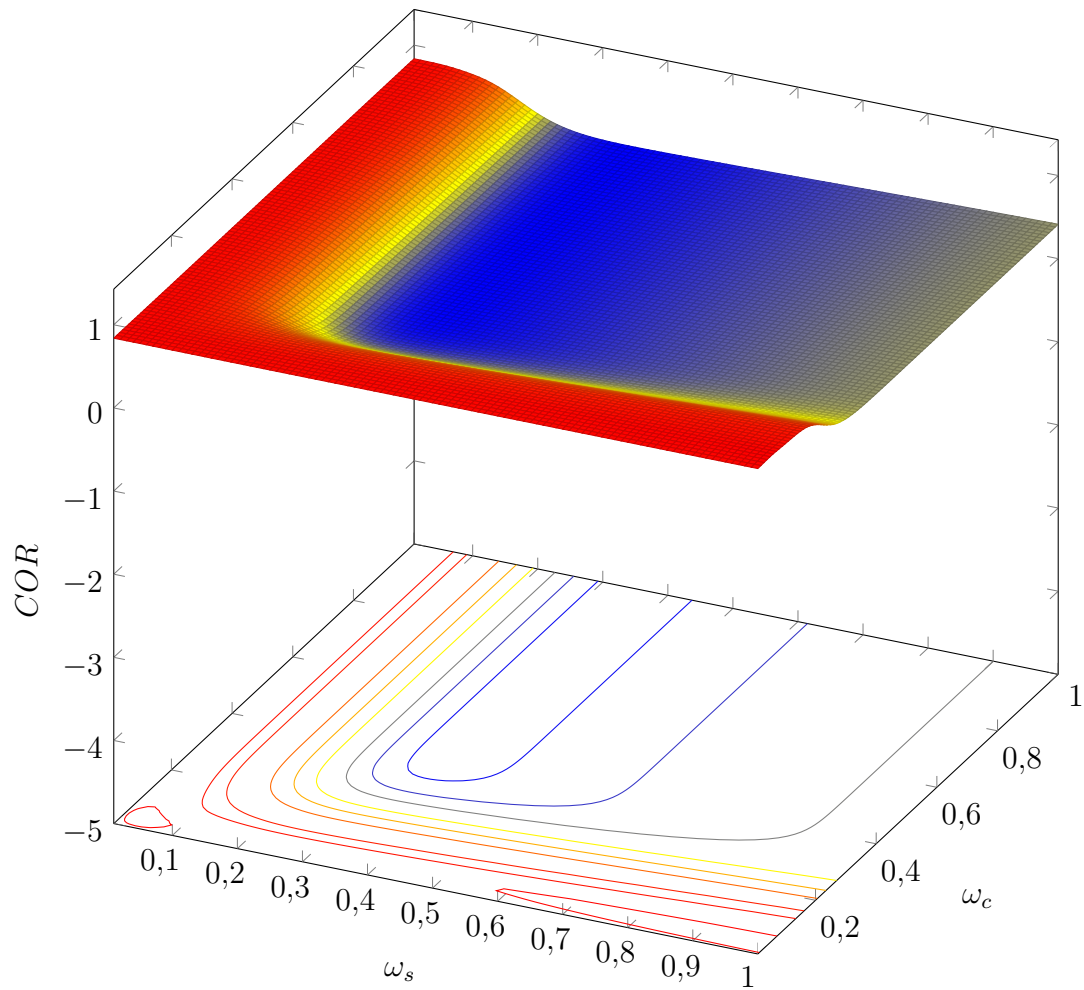


Figura 5.63 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 05.

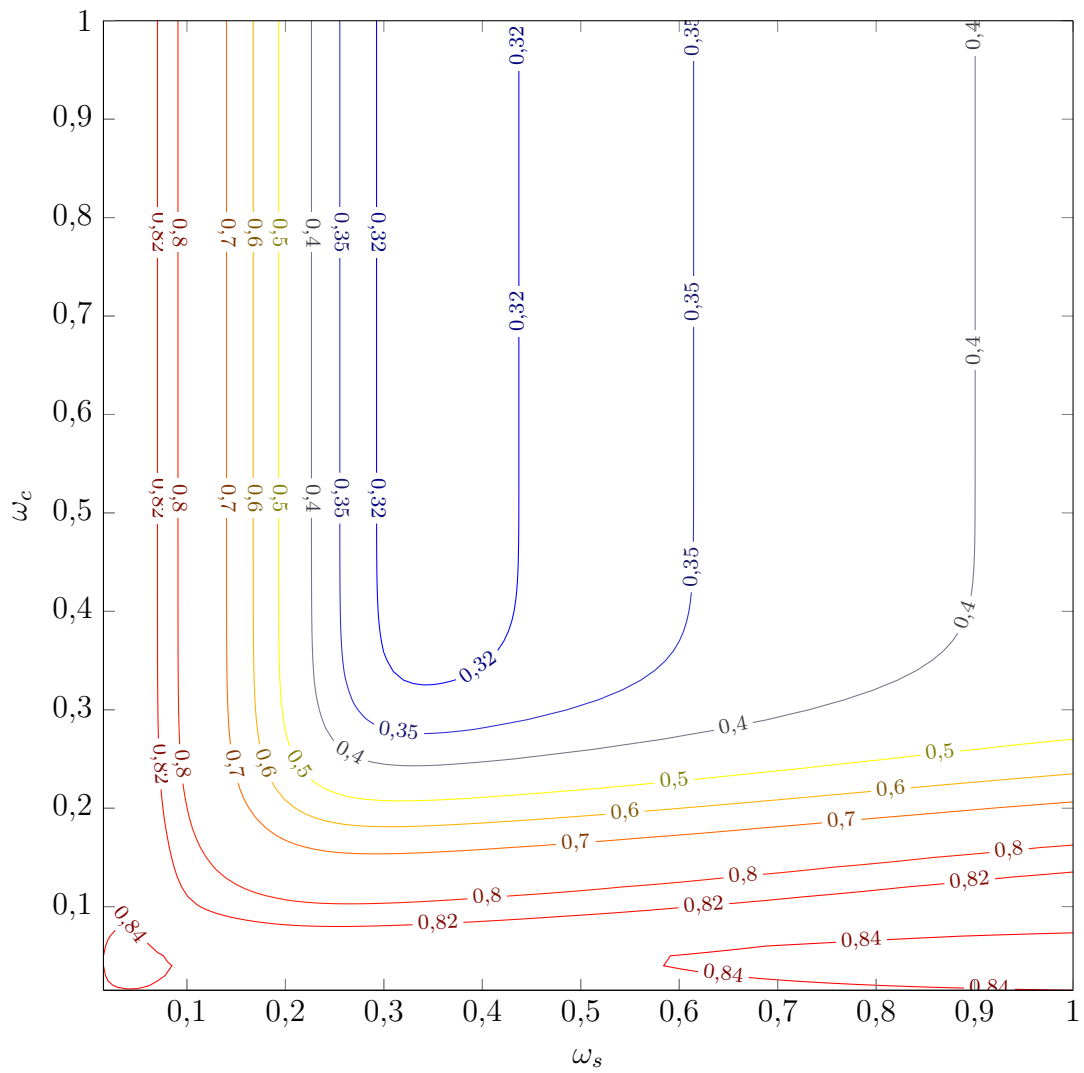


Figura 5.64 – Isolinhas do índice de correlação (*COR*) para a Simulação 05.

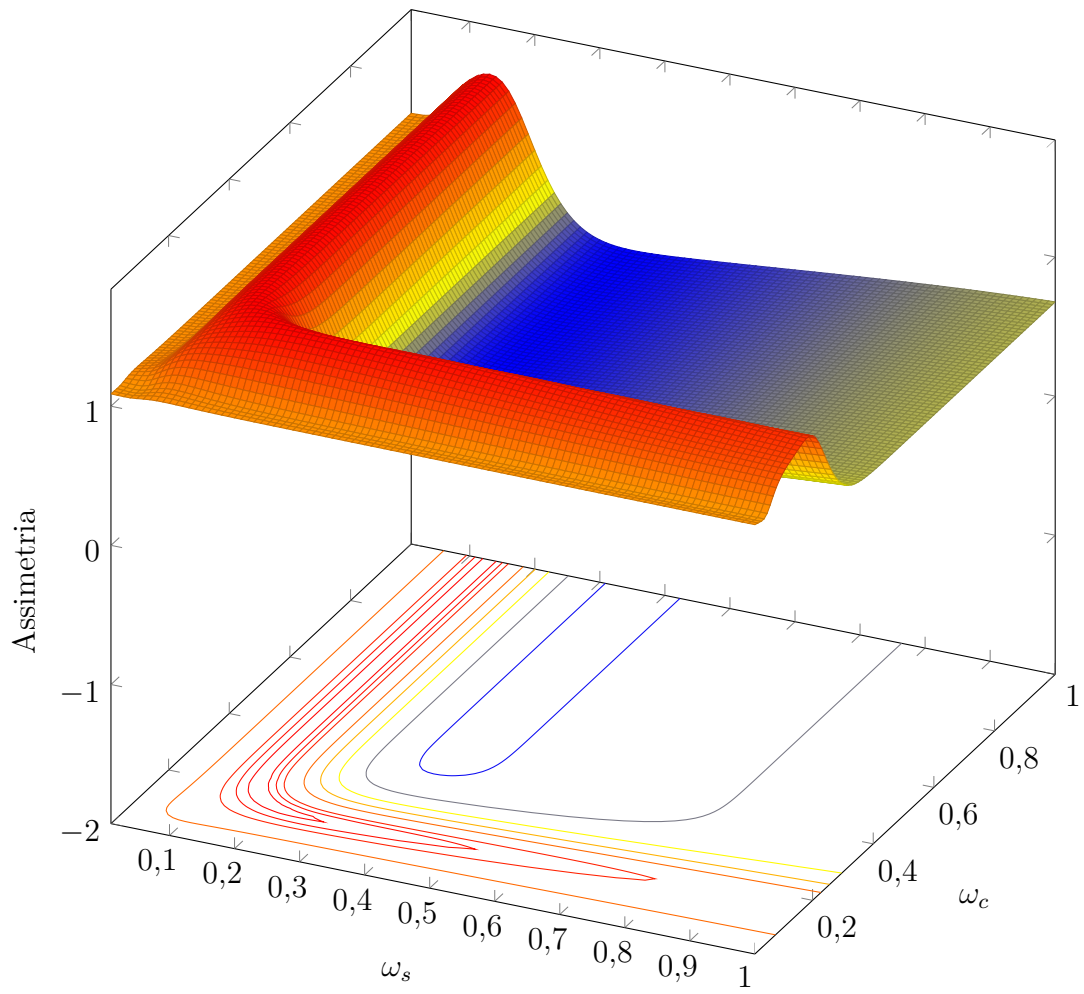


Figura 5.65 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 05.

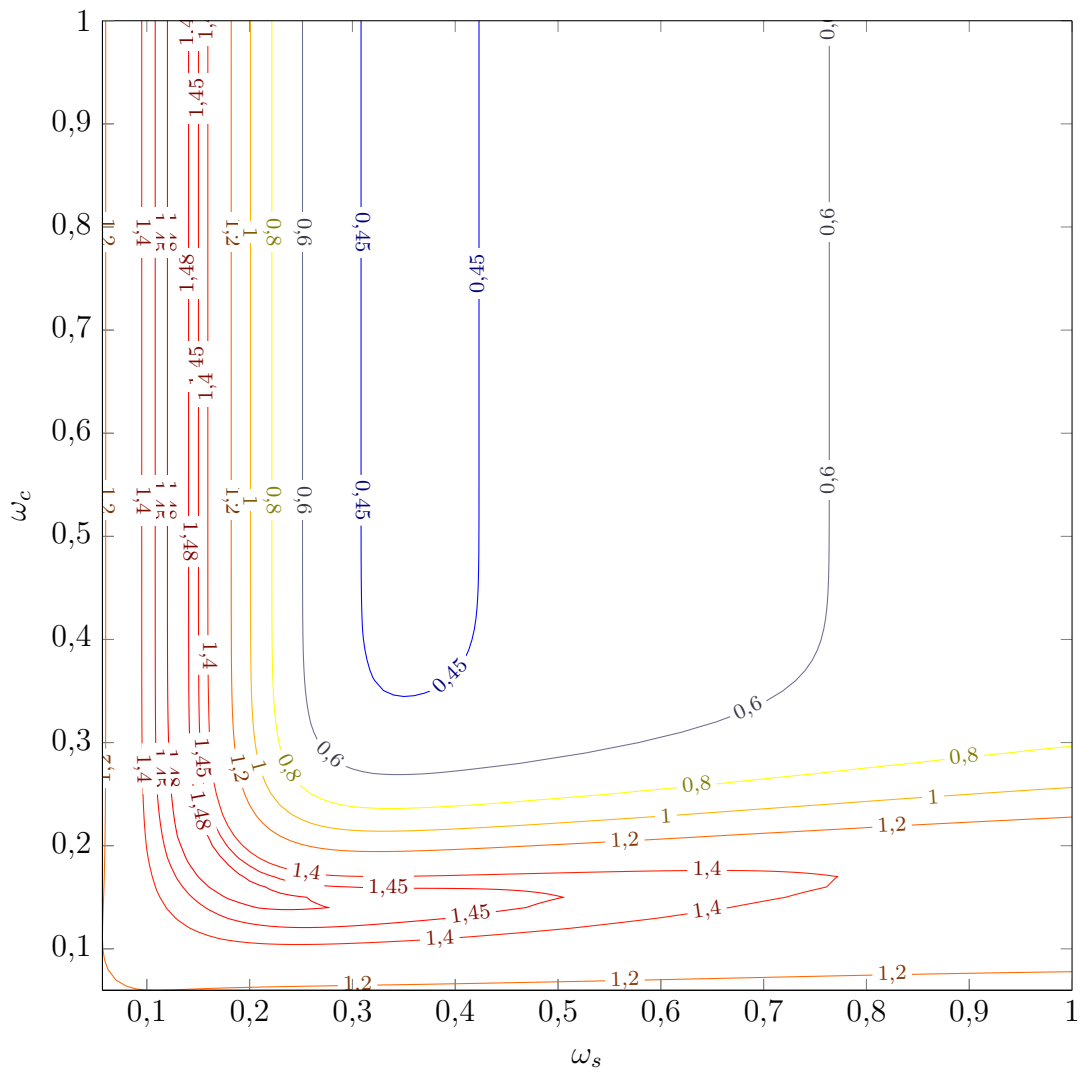


Figura 5.66 – Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 05.

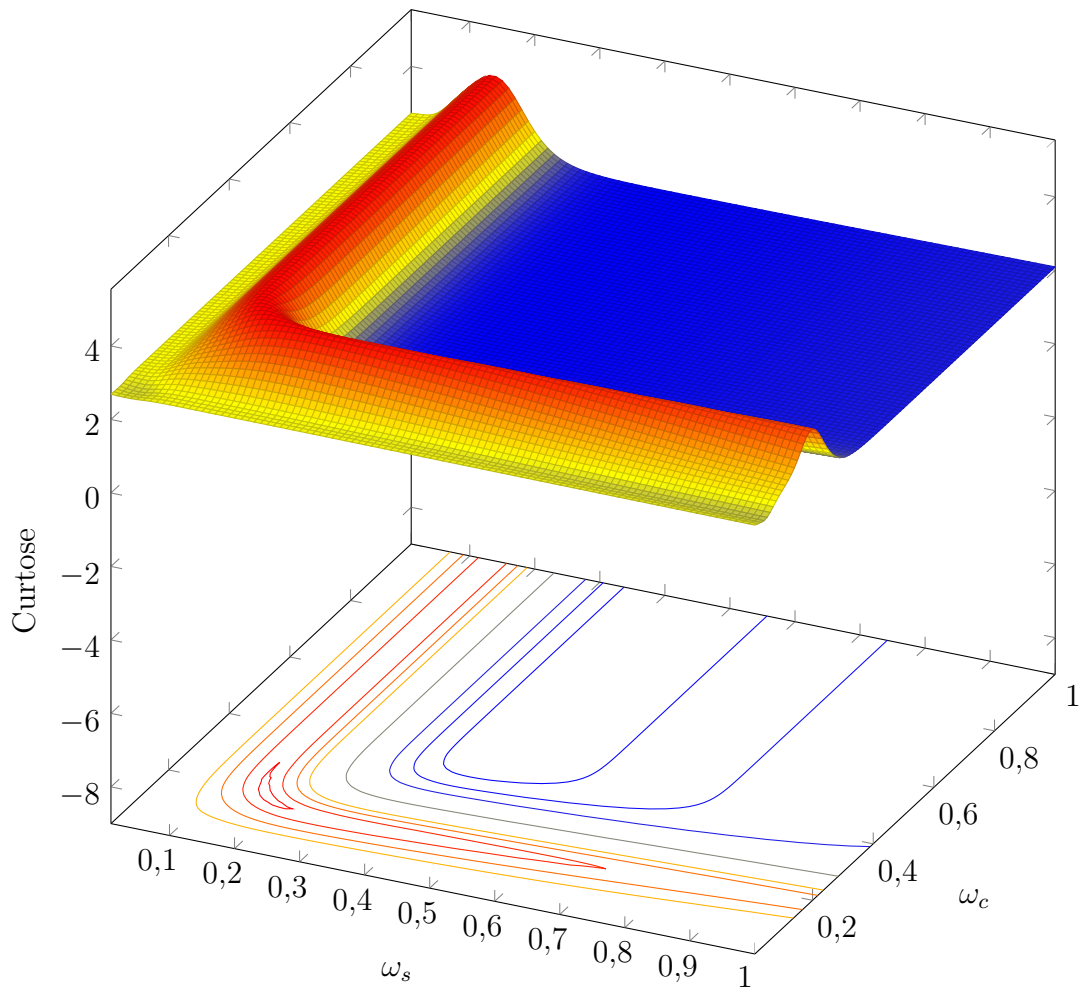


Figura 5.67 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 05.

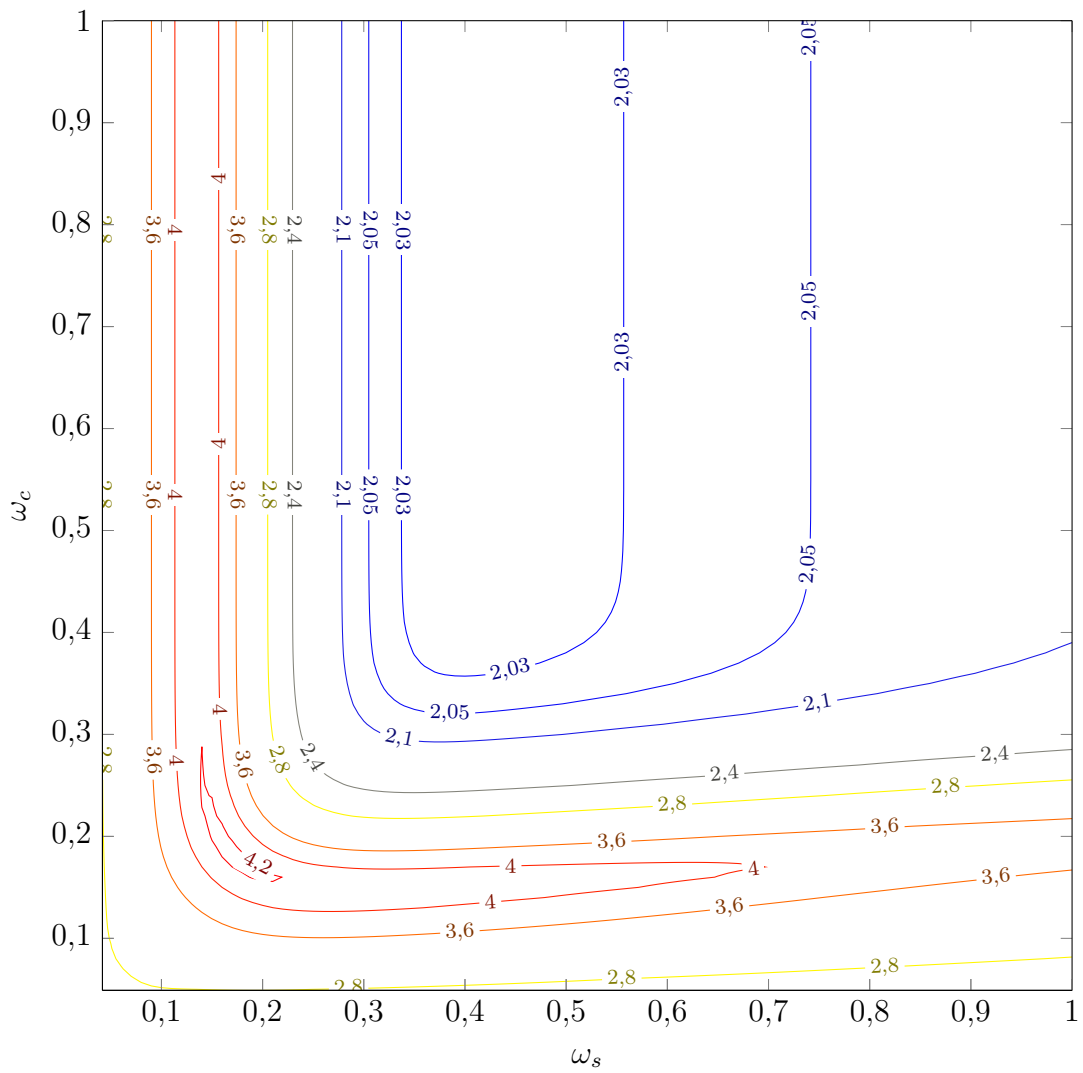


Figura 5.68 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 05.

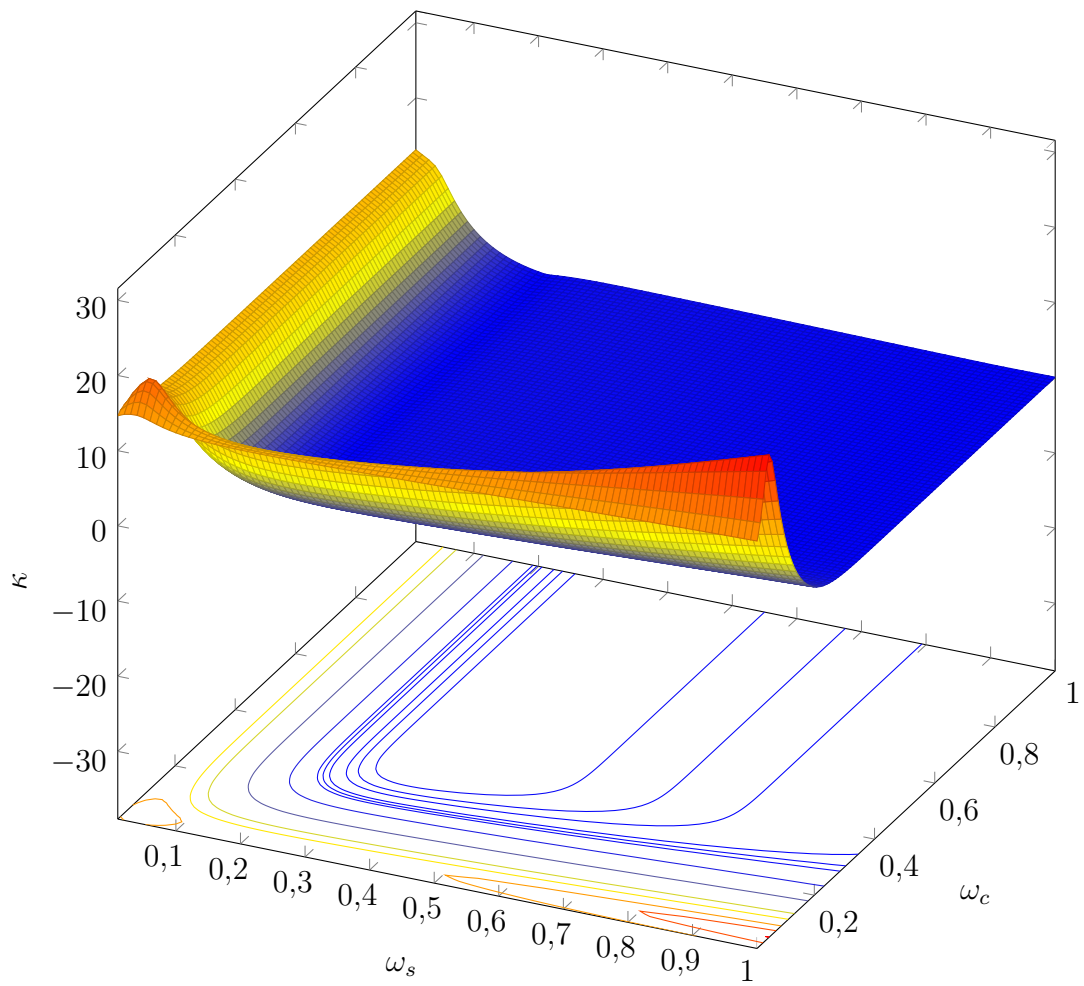


Figura 5.69 – Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 05.

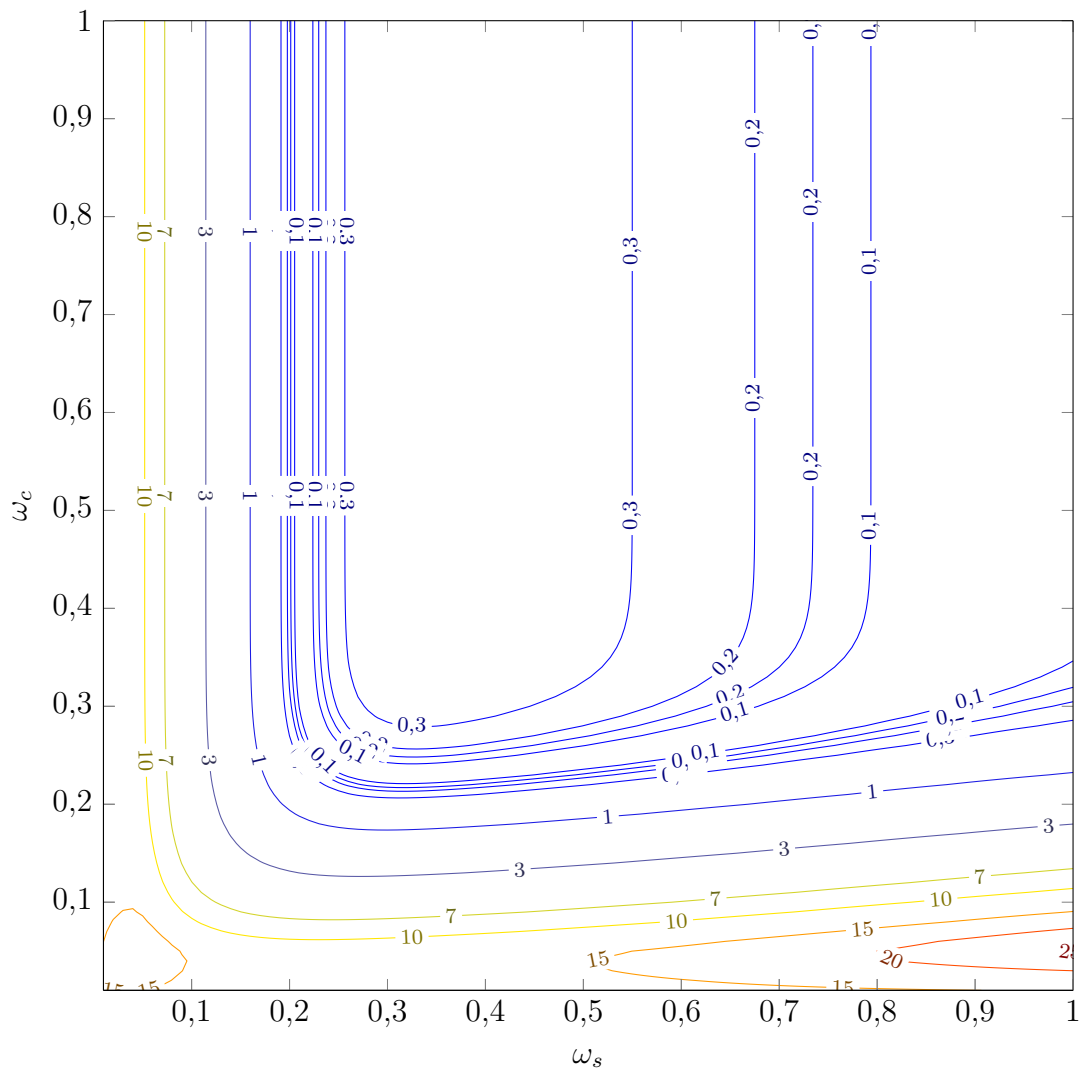


Figura 5.70 – Isolinhas do índice κ para a Simulação 05.

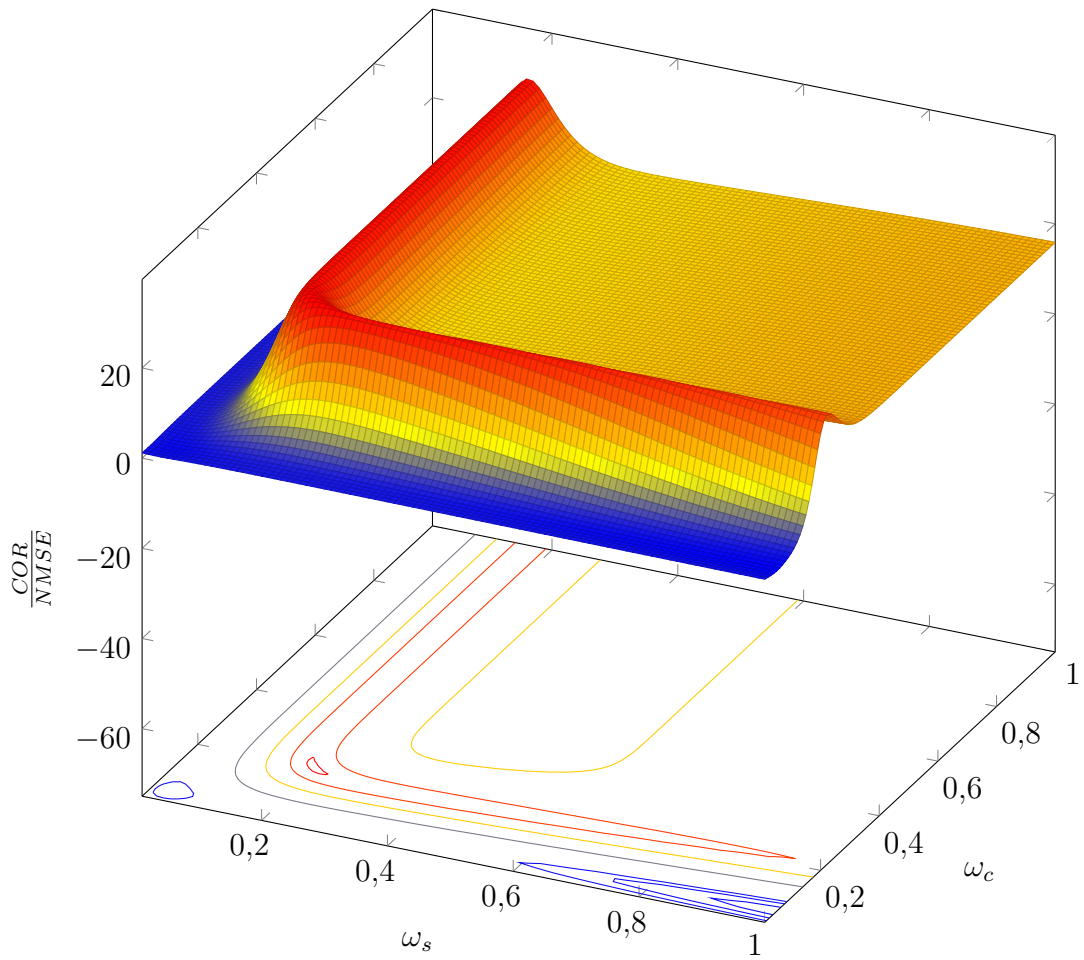


Figura 5.71 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 05.

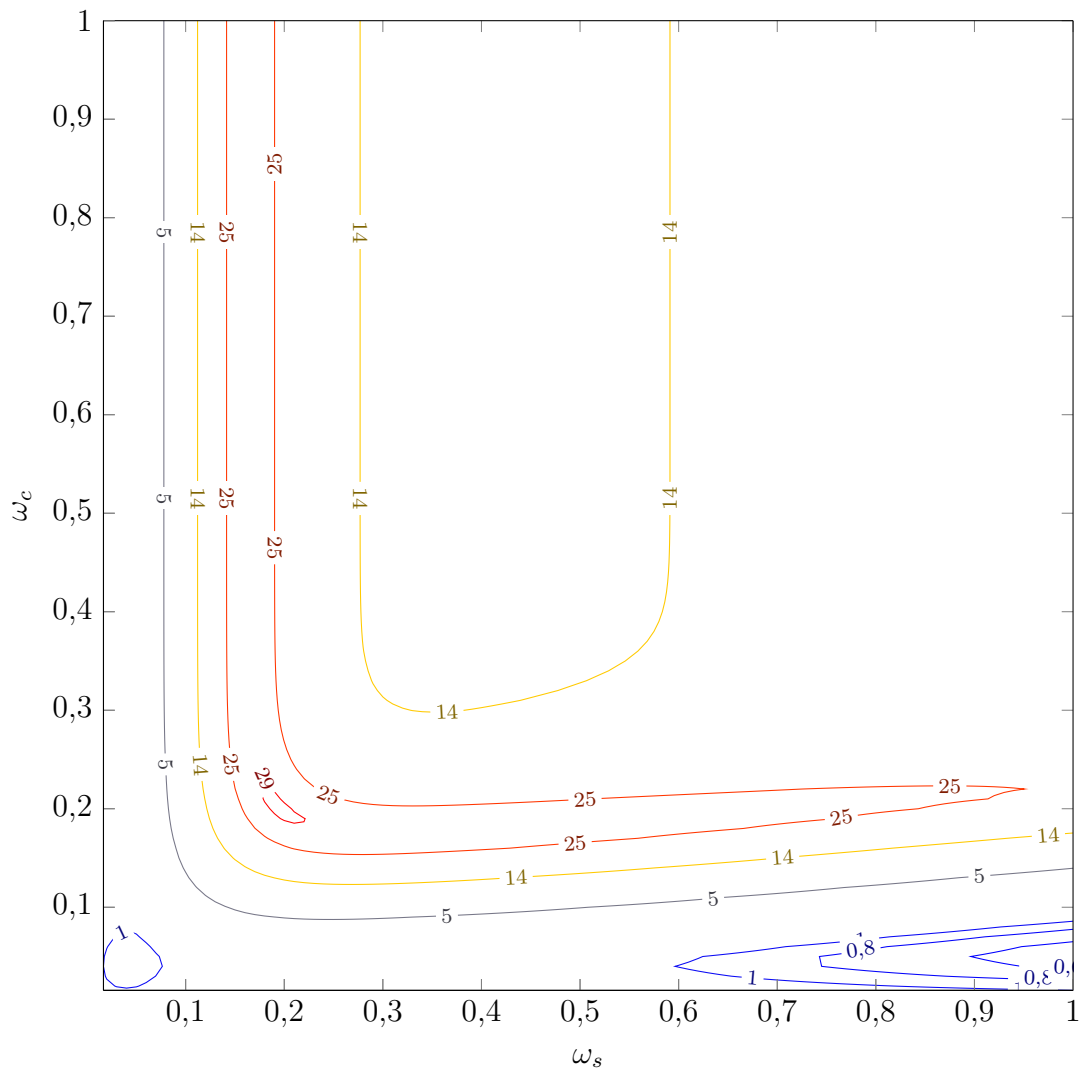


Figura 5.72 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 05.

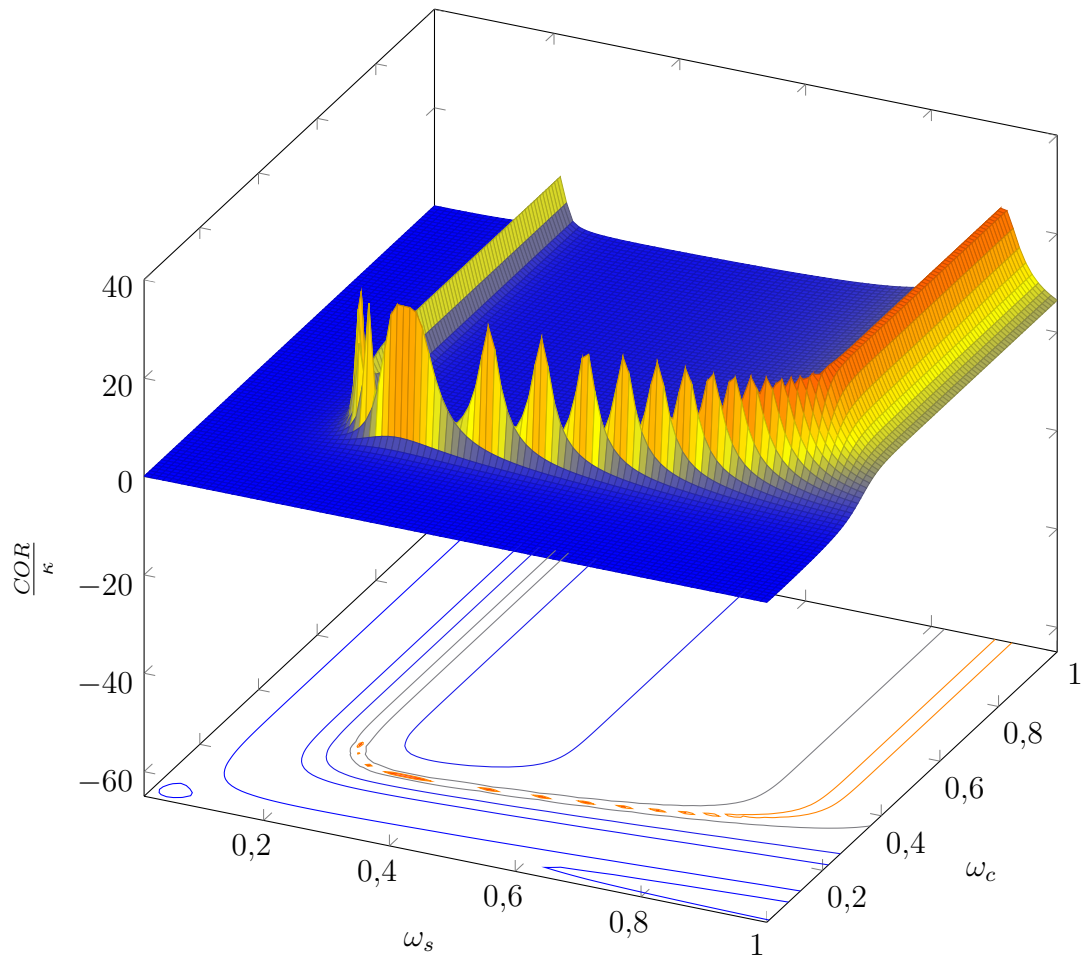


Figura 5.73 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 05.

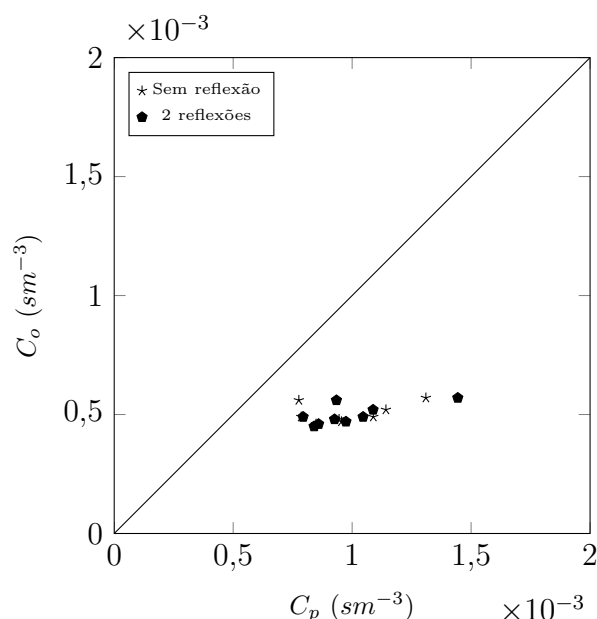


Figura 5.75 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 05.

Tabela 5.5 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$ para a Simulação 05.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	0,504	0,408	-1,24	0,957
Com reflexão ($n = 2$)	0,0212	0,619	-0,809	0,894

5.1.2.3 Simulação 06

A seguir serão apresentados os resultados da otimização para a Simulação 06, os mesmos índices apresentados na subseção anterior serão aqui expostos. Nas Figuras 5.76 e 5.77 tem-se o gráfico e as isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), respectivamente; nas Figuras 5.78 e 5.79 o gráfico e as isolinhas do índice de correlação (COR); nas Figuras 5.80 e 5.81 o gráfico e as isolinhas da assimetria; nas Figuras 5.82 e 5.83 o gráfico e as isolinhas da curtose; nas Figuras 5.84 e 5.85 o gráfico e as isolinhas do índice κ ; nas Figuras 5.86 e 5.87 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$; e nas Figuras 5.88 e 5.89 o gráfico e as isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$.

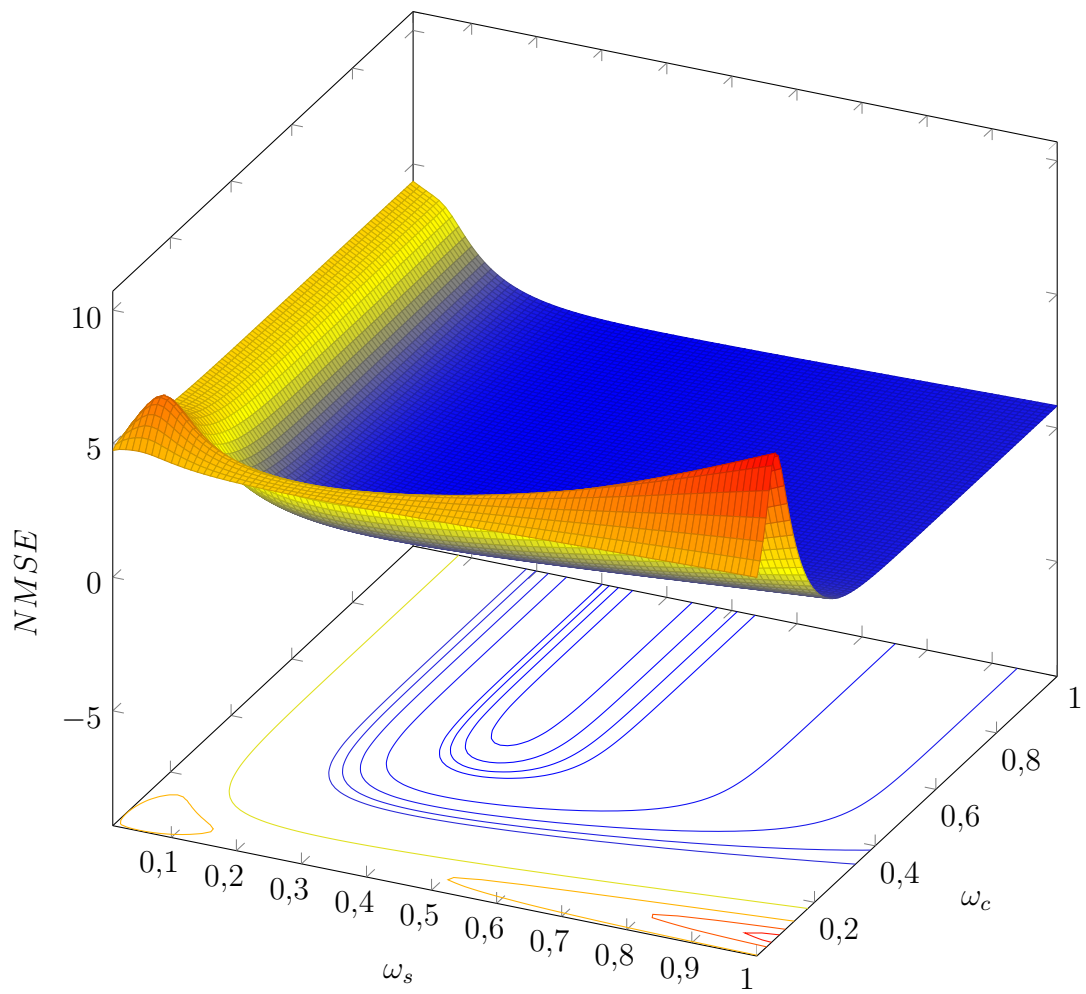


Figura 5.76 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para a Simulação 06.

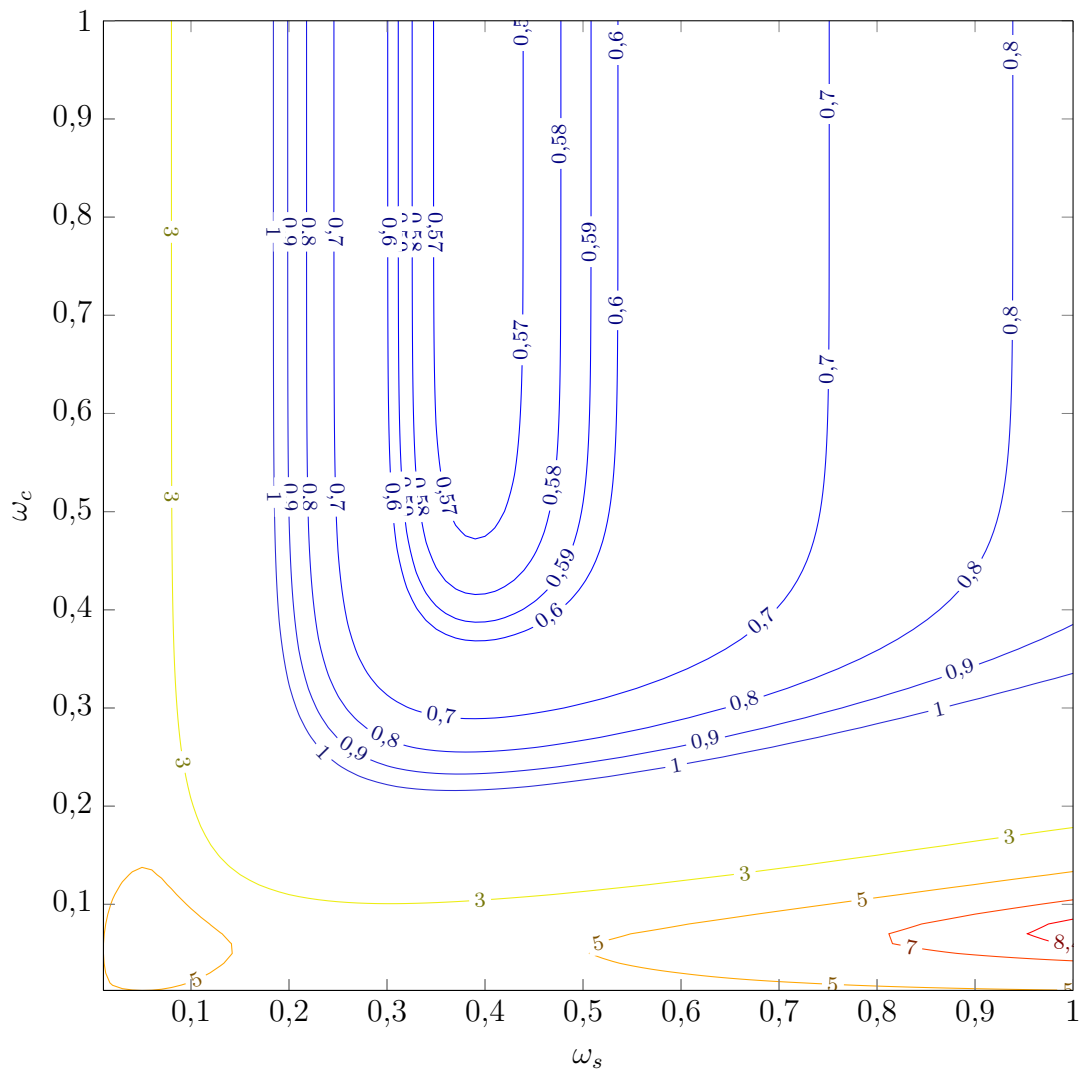


Figura 5.77 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado (*NMSE*) para a Simulação 06.

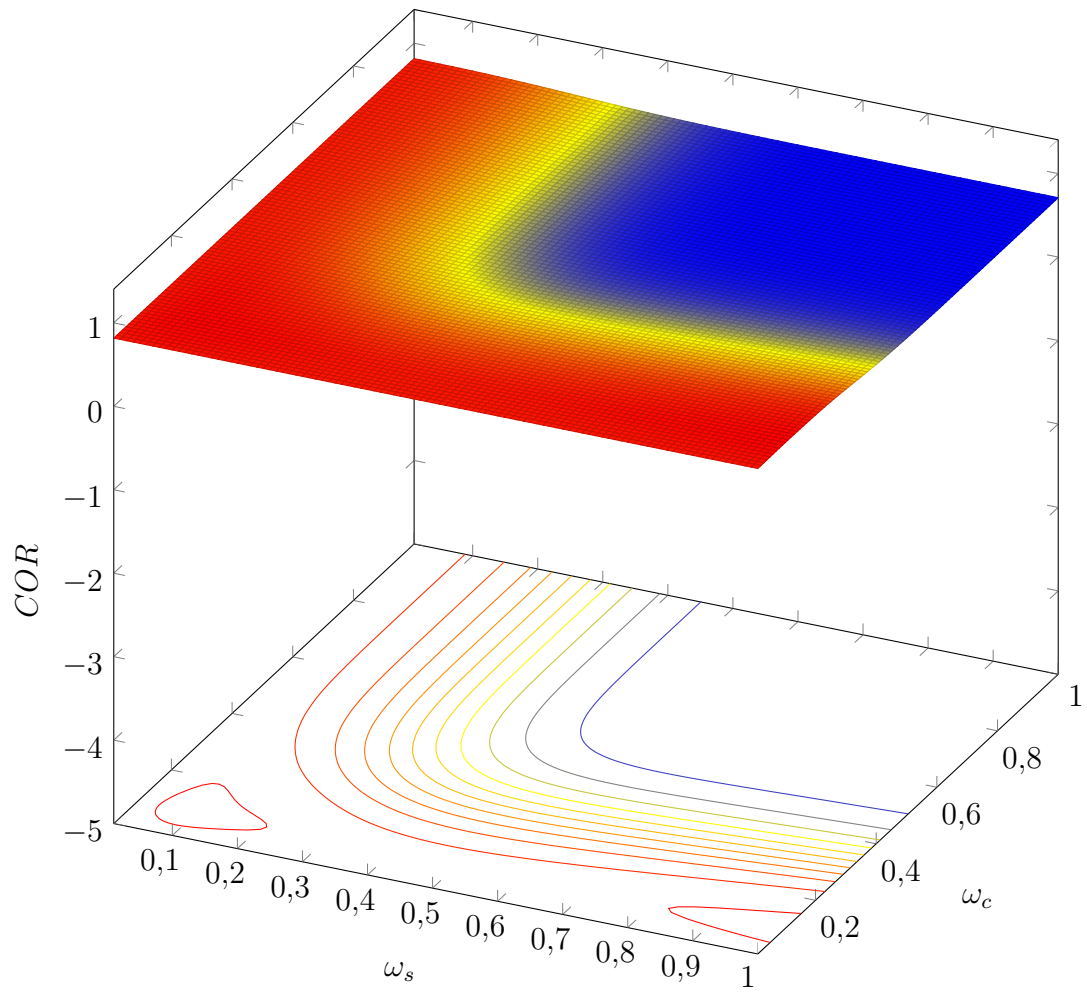


Figura 5.78 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para a Simulação 06.

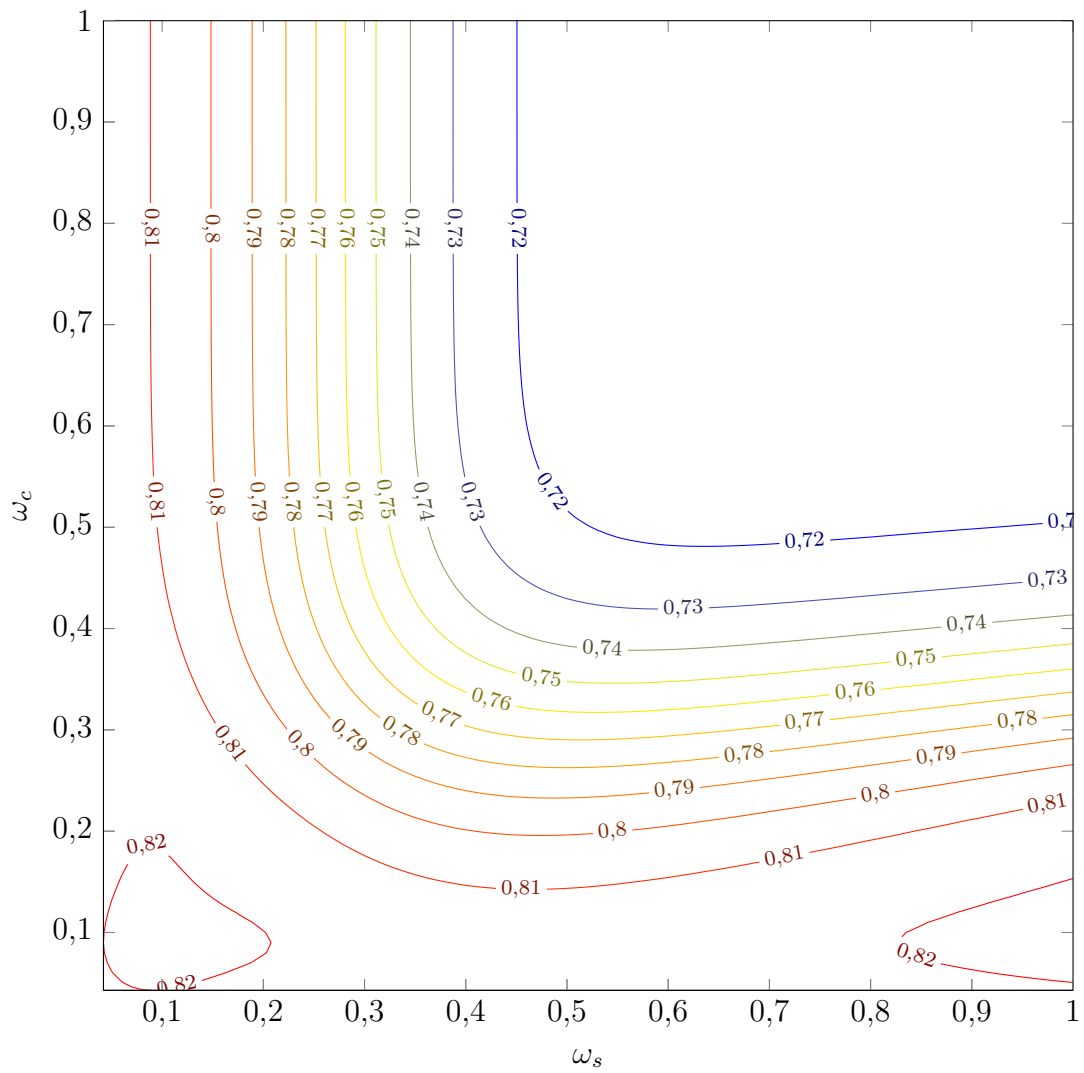


Figura 5.79 – Isolinhas do índice de correlação (*COR*) para a Simulação 06.

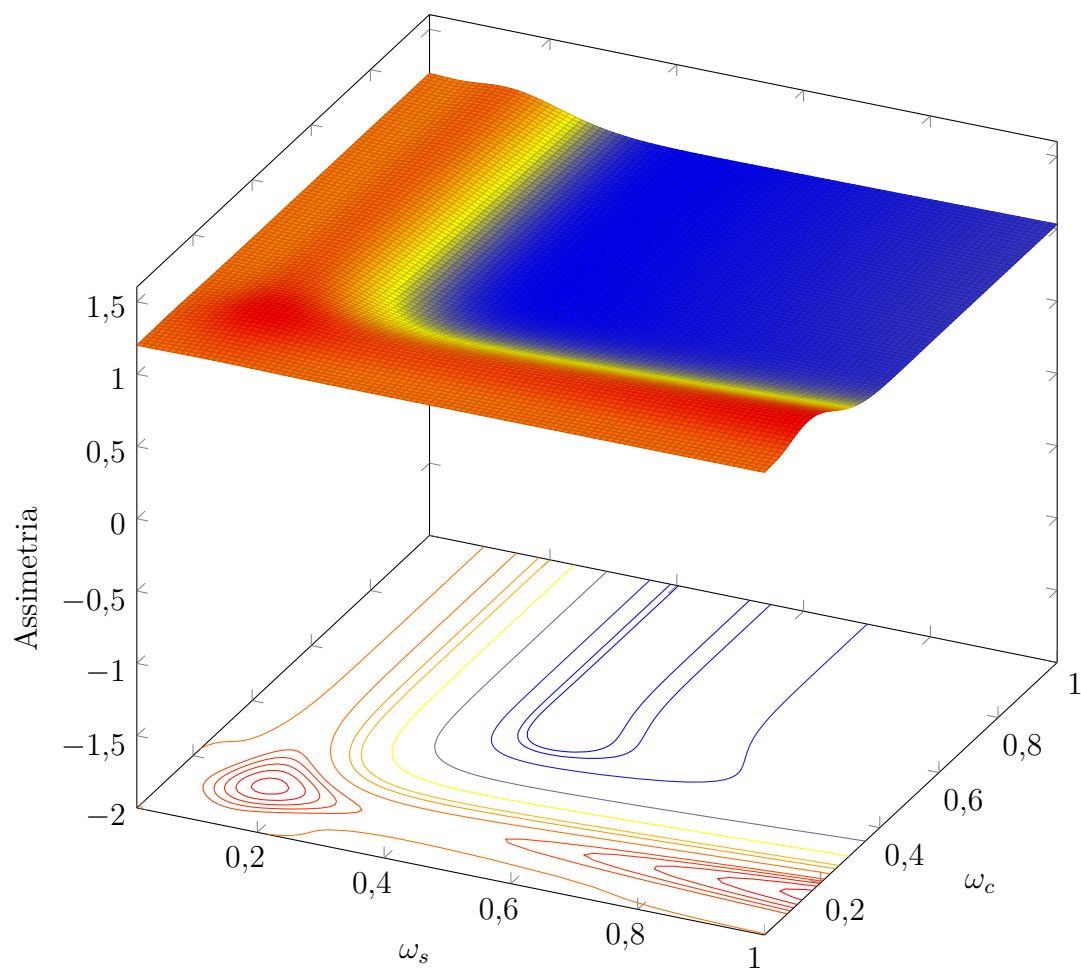


Figura 5.80 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 06.

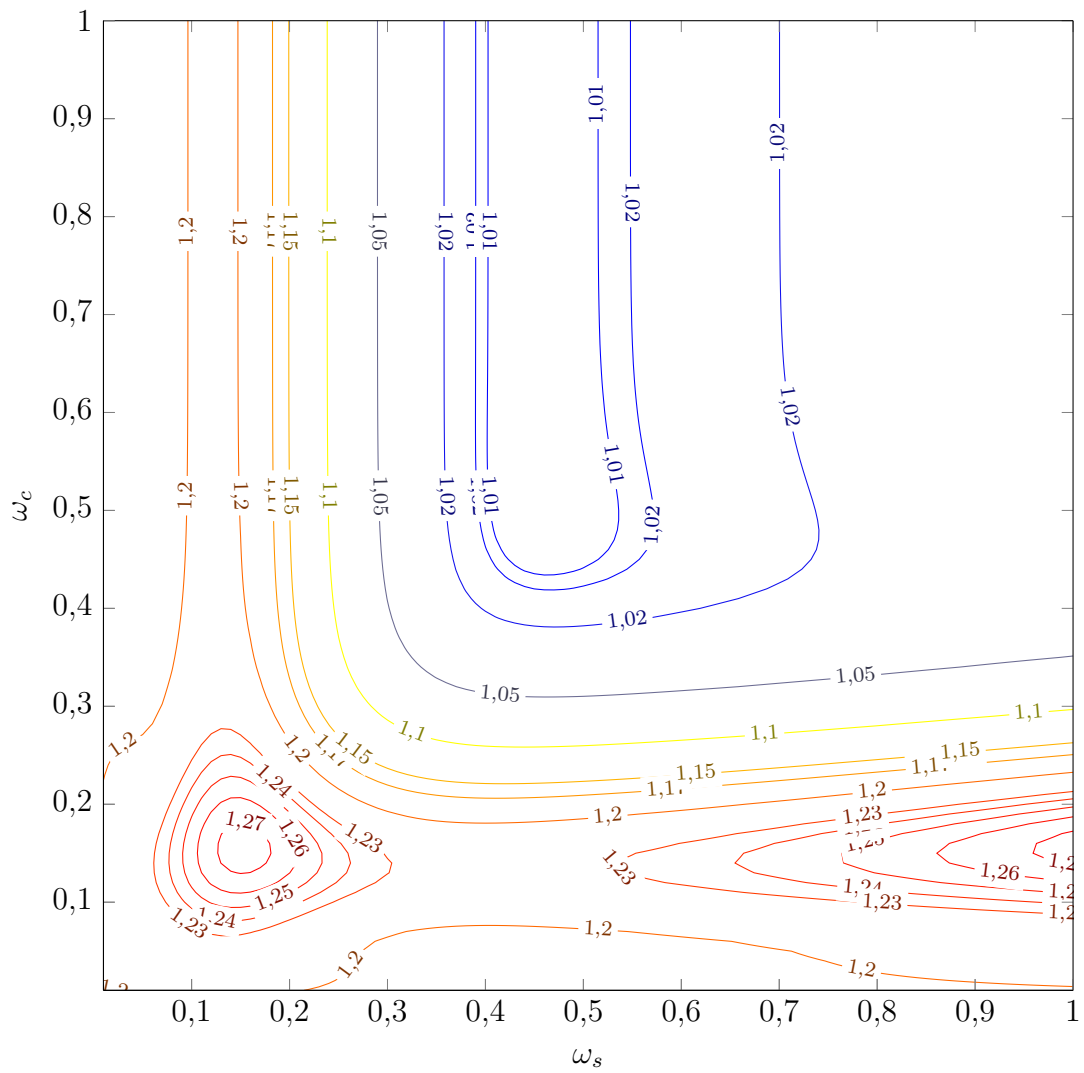


Figura 5.81 – Isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para a Simulação 06.

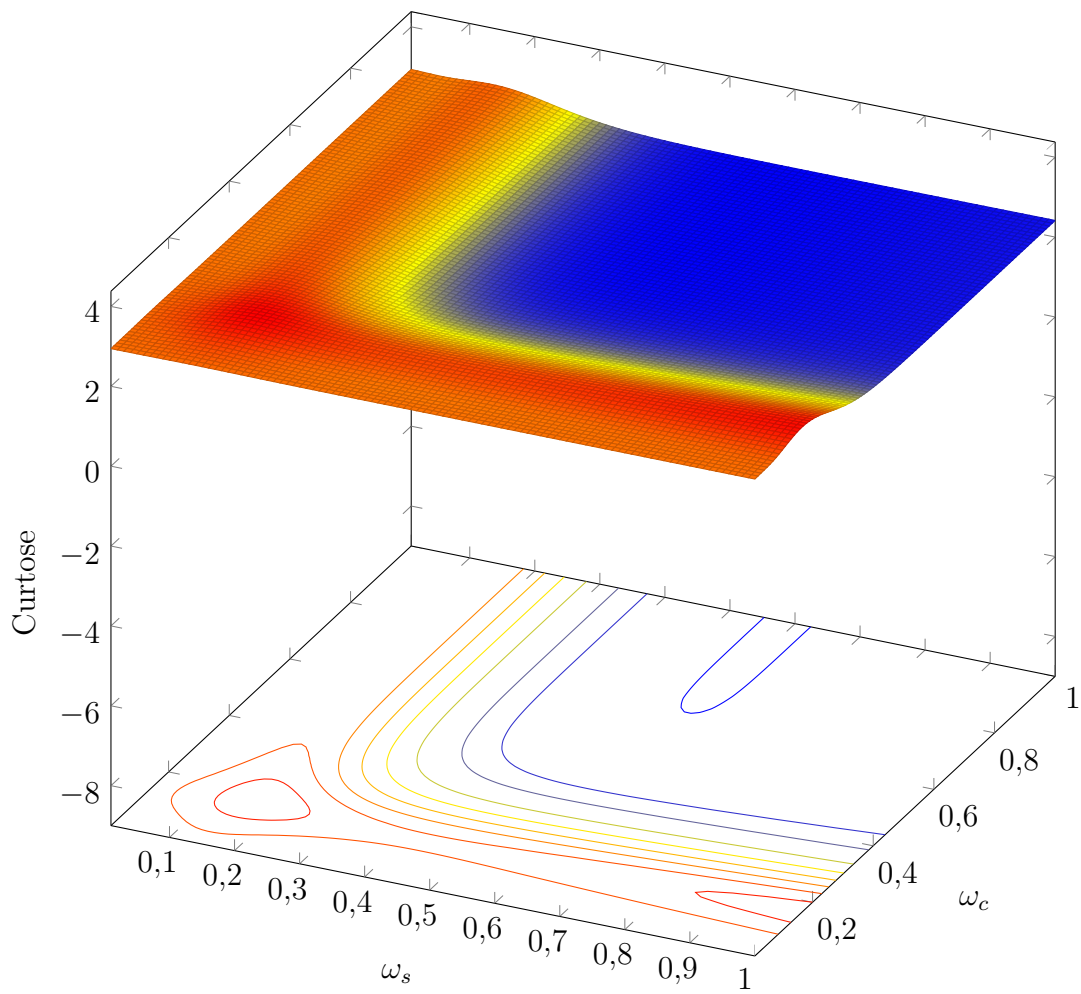


Figura 5.82 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 06.

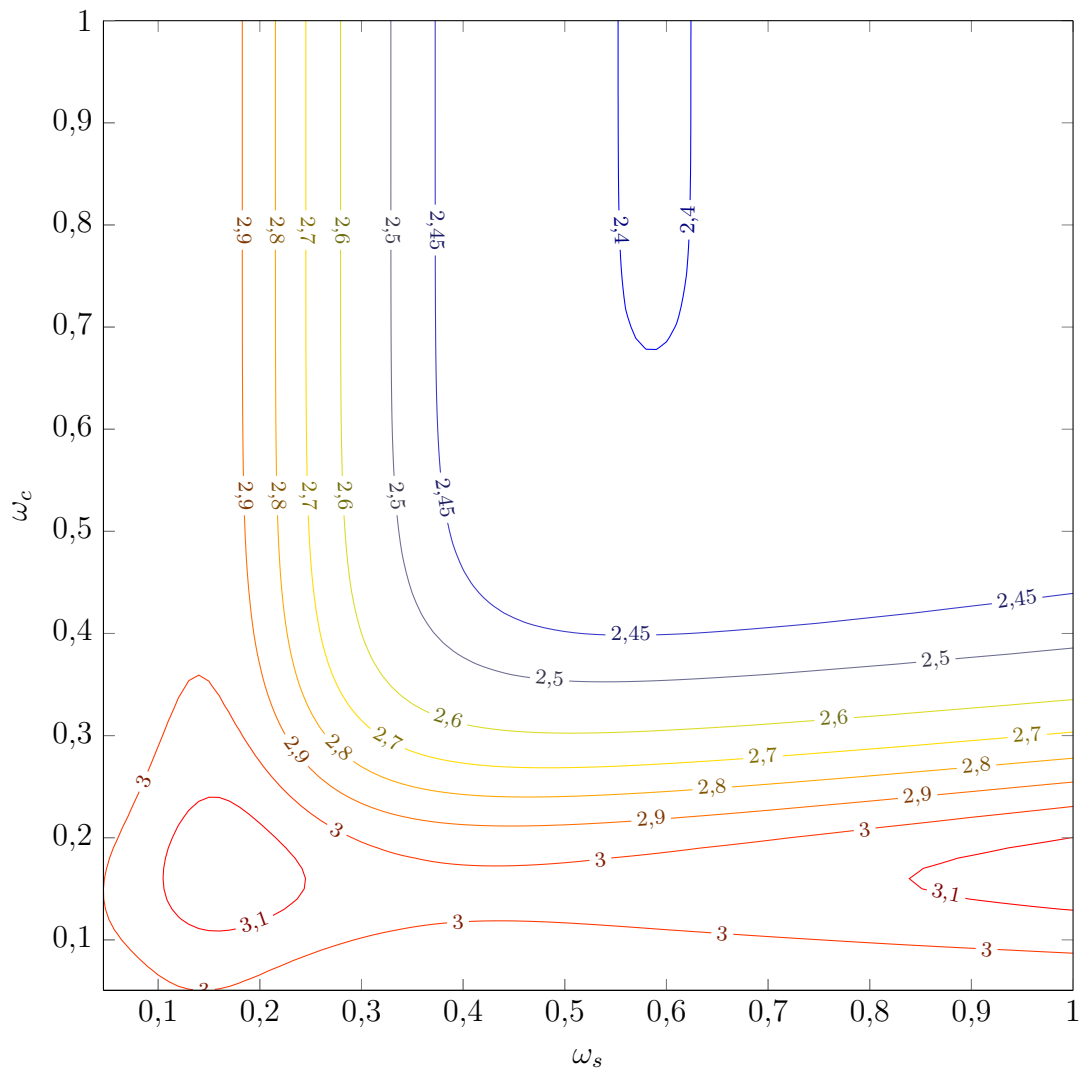


Figura 5.83 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para a Simulação 06.

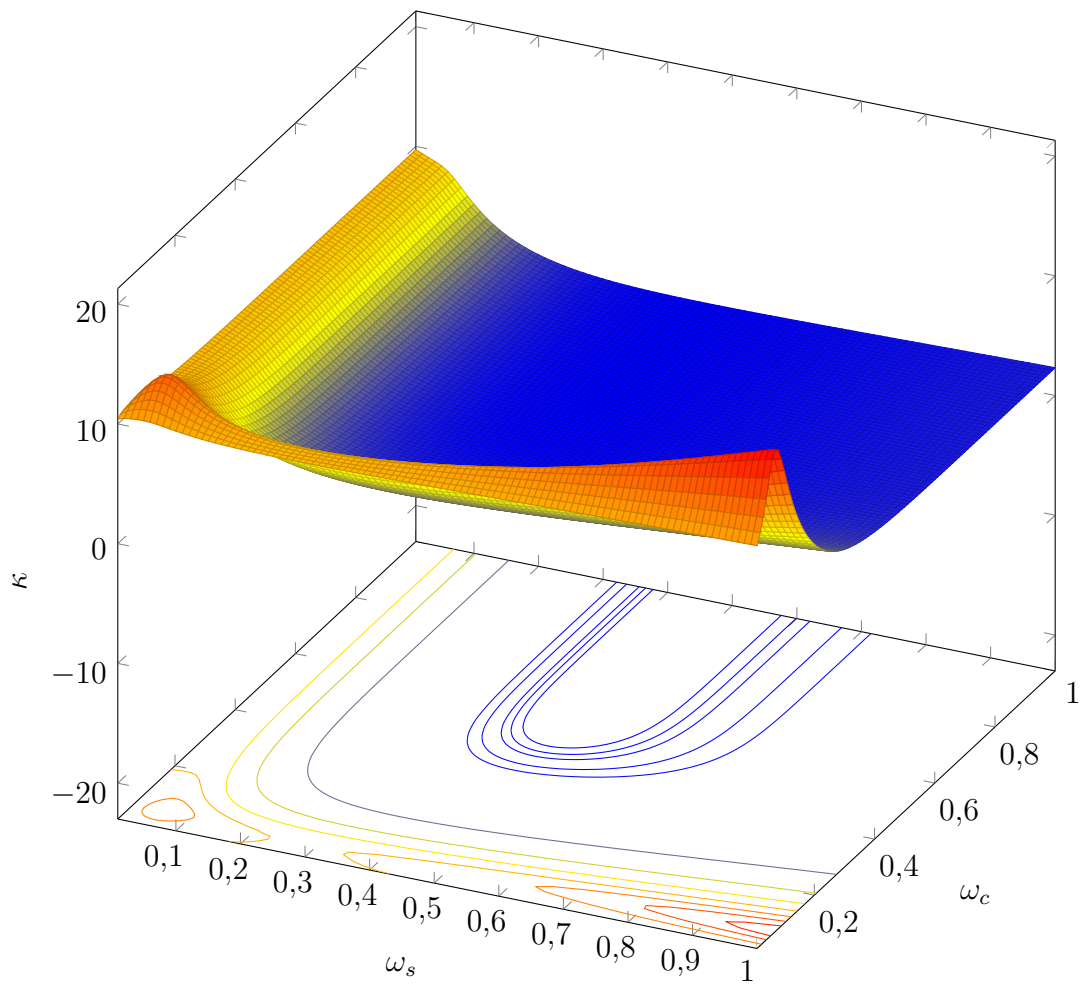


Figura 5.84 – Gráfico e isolinhas do índice κ para a Simulação 06.

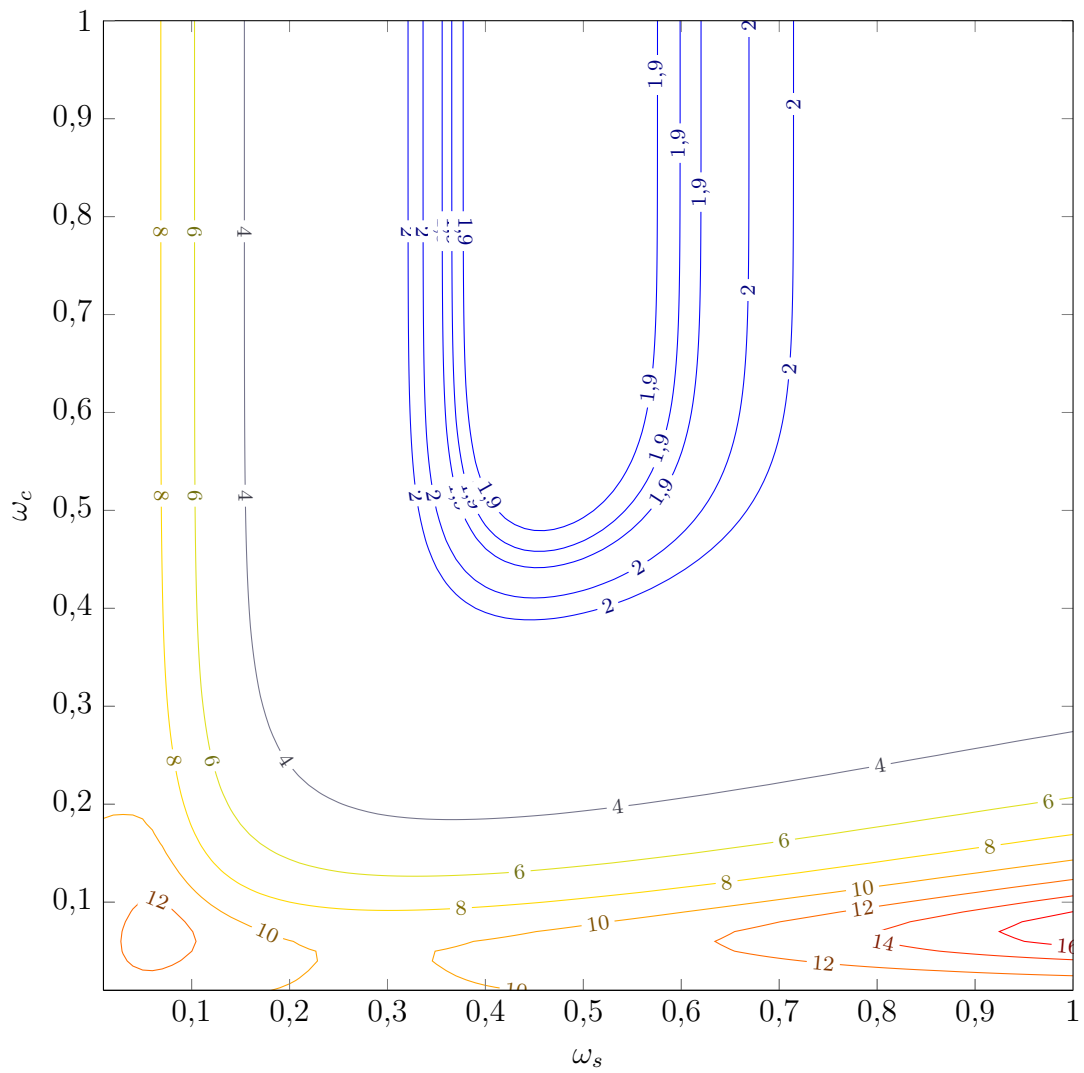


Figura 5.85 – Isolinas do índice κ para a Simulação 06.

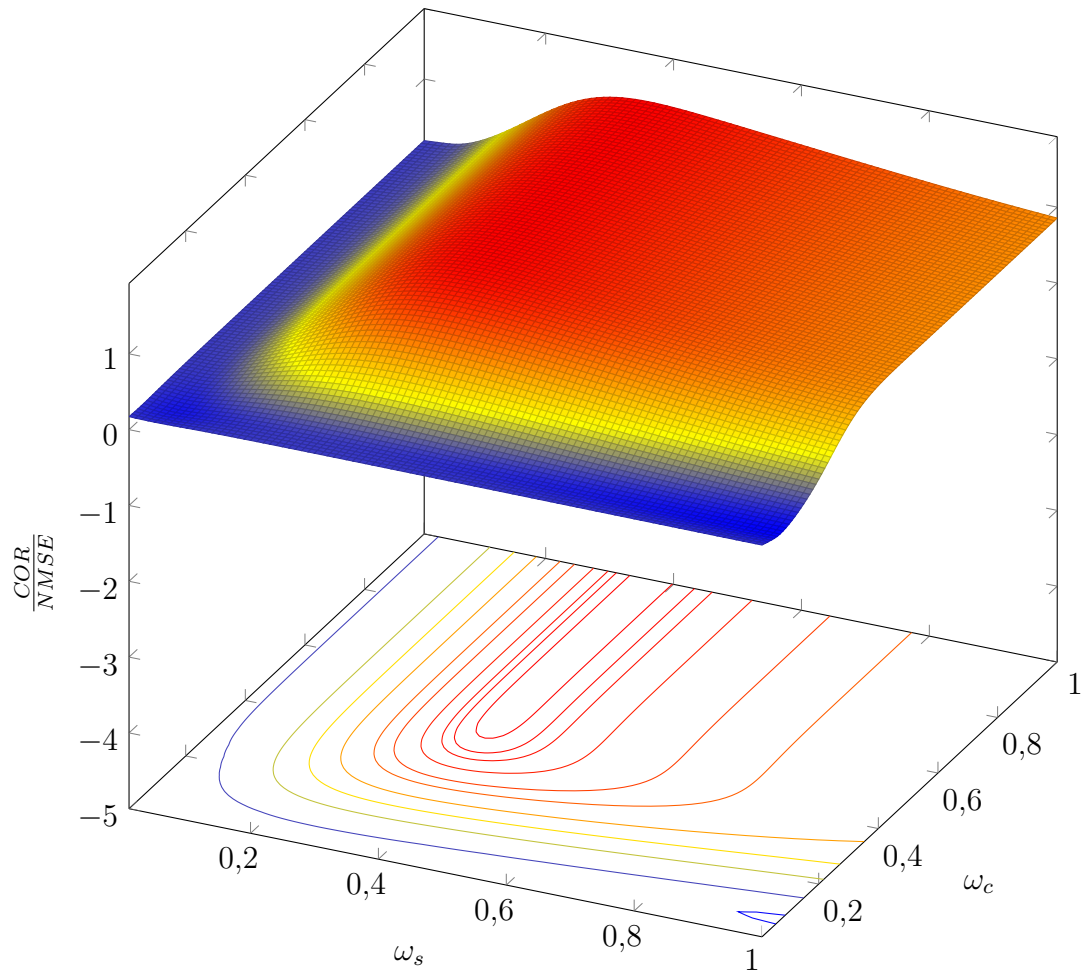


Figura 5.86 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{NMSE}$ para a Simulação 06.

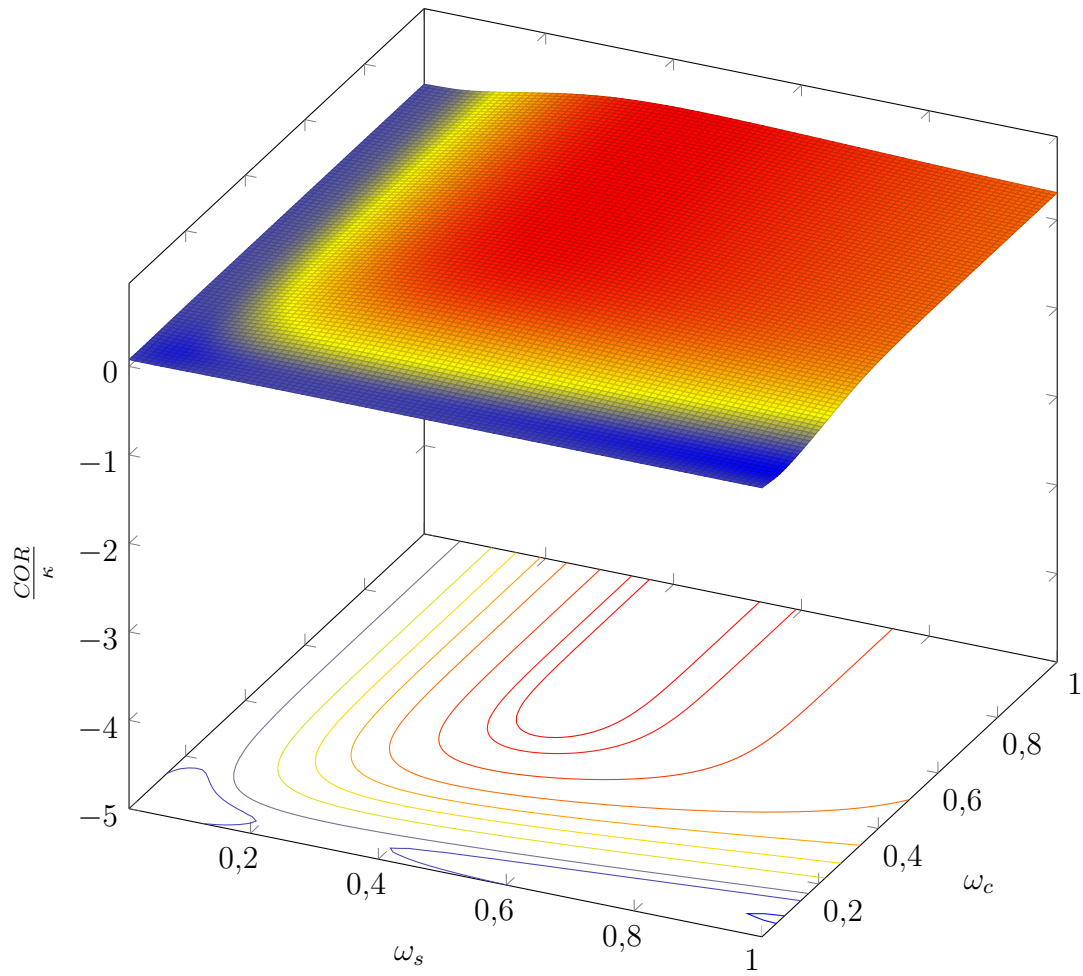


Figura 5.88 – Gráfico e isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 06.

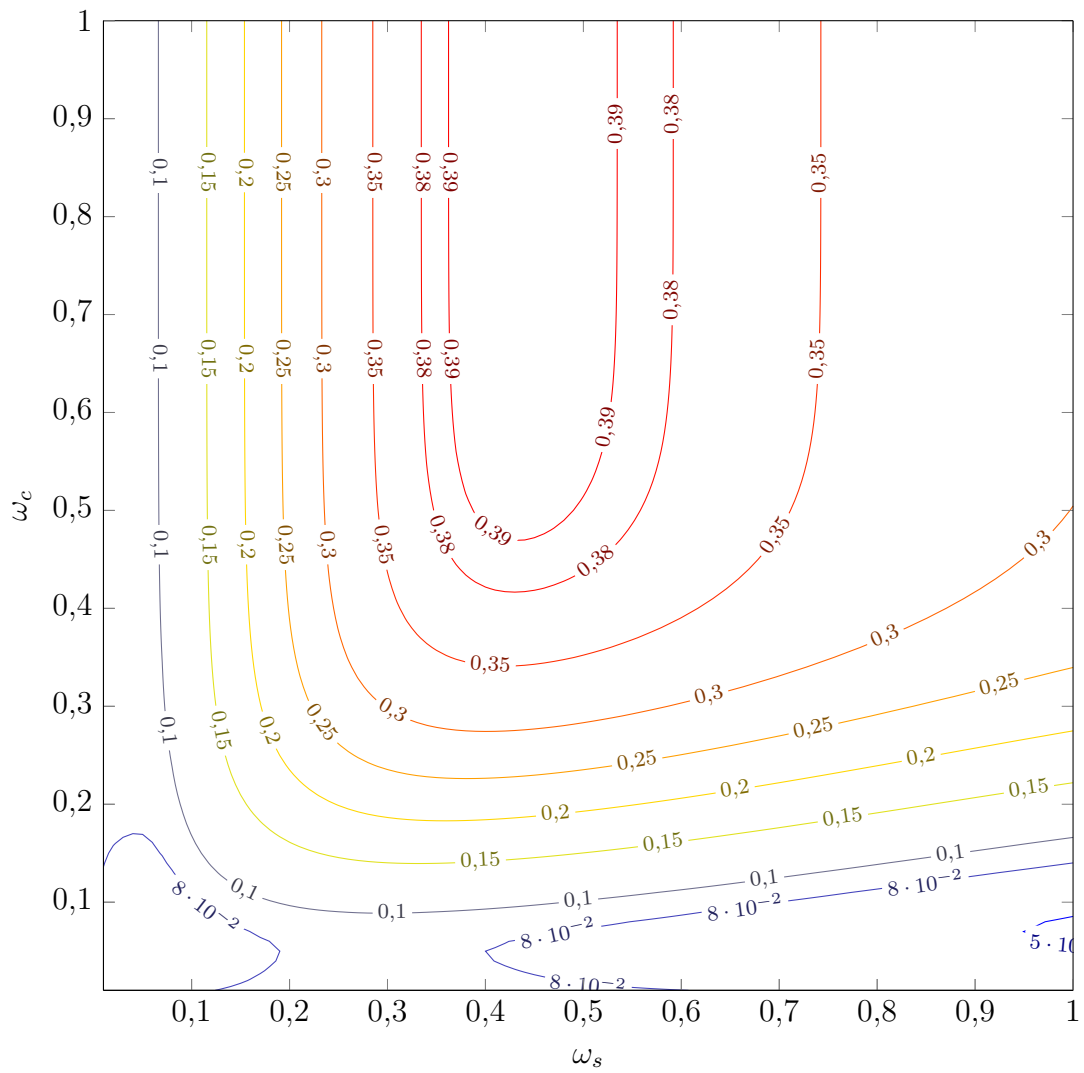


Figura 5.89 – Isolinhas da relação $\frac{COR}{\kappa}$ para a Simulação 06.

Apresenta-se, ainda, os índices estatísticos para a Simulação 06 com um dos parâmetros reflexivos ótimos $\omega_c = 0,6$ e $\omega_s = 0,4$ após 3 reflexões ($n = 3$).

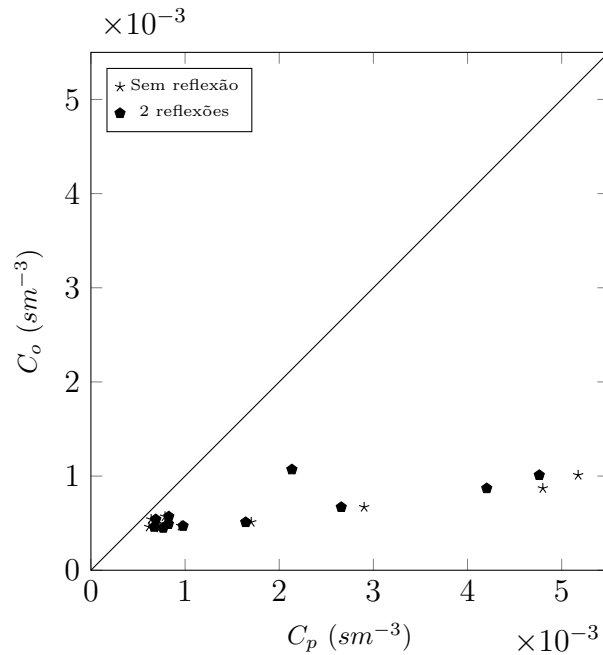


Figura 5.90 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,6$ e $\omega_s = 0,4$ para a Simulação 06.

Tabela 5.6 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,6$ e $\omega_s = 0,4$ para a Simulação 06.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	2,974	0,711	-1,519	5,456
Com reflexão ($n = 2$)	0,565	0,729	-1,459	1,839

No último conjunto de gráficos expostos para o caso convectivo, Figuras 5.76 a 5.89, percebe-se que a assimetria é sempre positiva e seus valores estão contidos em um intervalo pequeno. Quanto maior a assimetria, maior a curtose. Embora a região com os maiores valores da relação $\frac{COR}{NMSE}$ não coincida com os menores valores do índice κ , as regiões estão próximas umas das outras.

O mesmo fenômeno constatado no erro quadrático médio normalizado das simulações sob condições estáveis, é verificado nos erros das simulações sob condições convectivas,

Figuras 5.46, 5.61 e 5.76, porém além do padrão nas proximidade de $\omega_s = 1,0$, simultaneamente à ω_c próximo de 0,1, ocorre também quando $\omega_c \leq 0,1$ e $\omega_s \leq 0,1$ ao mesmo tempo. Para estes mesmos intervalos, o índice κ é máximo. É pertinente mencionar que este fenômeno manifestou-se similarmente na otimização realizada para o experimento de Copenhague, como pode ser verificado nos gráficos expostos na Seção A.2 do Apêndice A.

Os valores ótimos encontrados para os parâmetros reflexivos estão em regiões muito próximas, porém desta vez apresentando um comportamento diferente, enquanto ω_s é ótimo dentro de um intervalo pequeno $0,1 < \omega_s < 0,4$, existe uma gama maior de valores ótimos para ω_c . Novamente, os menores valores para o índice κ coincidem ou estão próximos às regiões ótimas. O fato de coincidir a região ótima nos 3 casos indica que em futuras simulações pode-se utilizar distribuições baseadas nestes valores, sem a necessidade de realizar todo o processo de otimização.

5.2 Usina Termelétrica Luiz Oscar Rodrigues de Melo

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos através da simulação da Equação 3.10, de acordo com os dados coletados expostos na Tabela 4.9. Foram realizadas 24 horas de simulação de emissão de NO_2 . A comparação é feita apenas com os padrões de qualidade do ar estabelecidos pela Resolução CONAMA 03/1990 [CONAMA, 1990]. De acordo com a resolução, os Padrões Primários de Qualidade do Ar são as concentrações de poluentes que, ultrapassadas, poderão afetar a saúde da população. Enquanto os Padrões Secundários de Qualidade do Ar são as concentrações de poluentes abaixo das quais se prevê o mínimo efeito adverso sobre o bem-estar da população, assim como o mínimo dano à fauna, à flora, aos materiais e ao meio ambiente em geral.

O Padrão Primário estabelecido para NO_2 é a concentração média de 1 hora de $0,32 \text{ g/m}^3$, e o Padrão Secundário estabelecido para NO_2 é a concentração média de 1 hora de $0,19 \text{ g/m}^3$. Primeiramente, na Tabela 5.7, são apresentadas as concentrações máximas de cada uma das 24 horas e, posteriormente as isolinhas das concentrações no entorno da usina. Nos gráficos das isolinhas, Figuras 5.91 a 5.114, cada asterisco (*) refere-se a um conjunto de 6 fontes.

Tabela 5.7 – Dados das concentrações simuladas da UTE LORM.

Hora	\bar{C}_{max} (g/m ³)
00	0,0327273
01	0,0327273
02	0,068766
03	0,0966171
04	0,0966171
05	0,0966171
06	0,0966171
07	0,0966171
08	0,0992926
09	0,0992926
10	0,0992926
11	0,0992926
12	0,0992926
13	0,0992926
14	0,0992926
15	0,0992926
16	0,0992926
17	0,0992926
18	0,0992926
19	0,0992926
20	0,1000161
21	0,119884
22	0,1207825
23	0,1207825

De acordo com a Tabela 5.7, nenhuma das concentrações máximas ultrapassa os padrões estabelecidos pela Resolução CONAMA 03/1990. Em uma próxima abordagem tenciona-se comparar as concentrações previstas pelo modelo com concentrações medidas no entorno da usina.

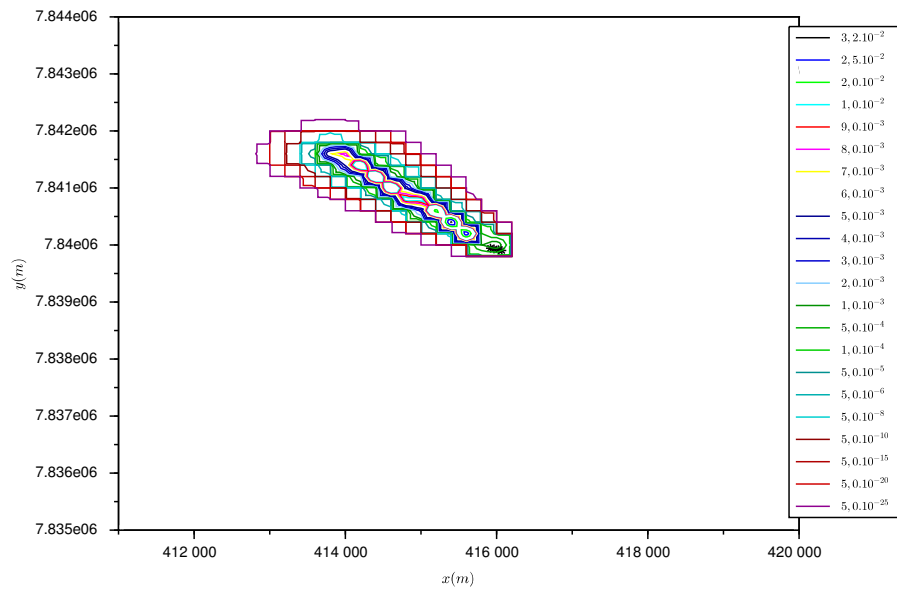


Figura 5.91 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 1$ hora.

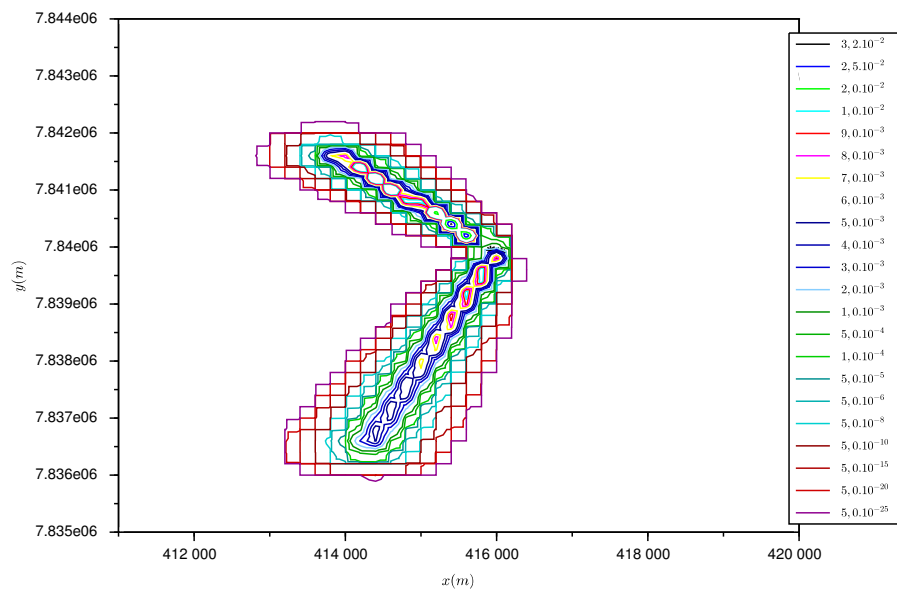


Figura 5.92 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 2$ horas.

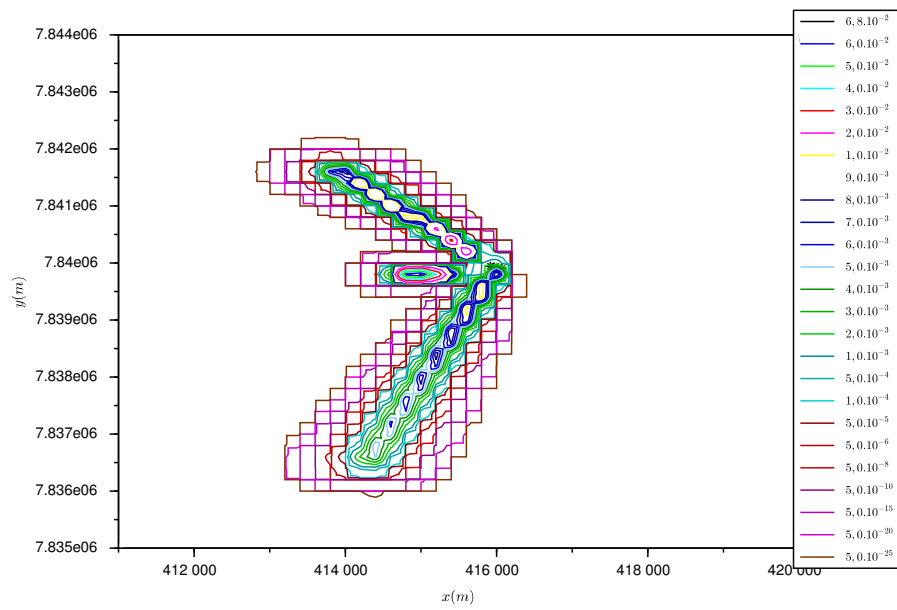


Figura 5.93 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 3$ horas.

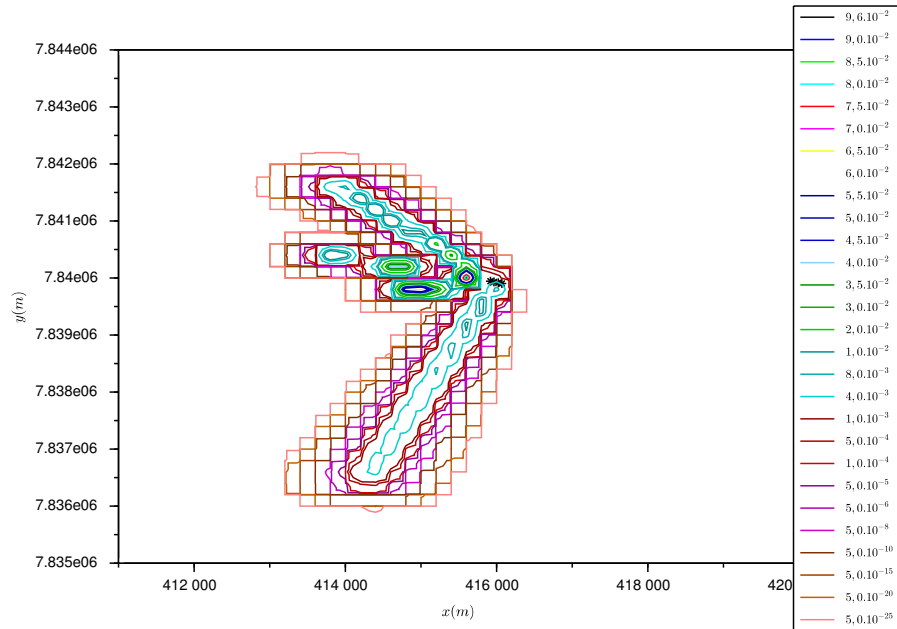


Figura 5.94 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 4$ horas.

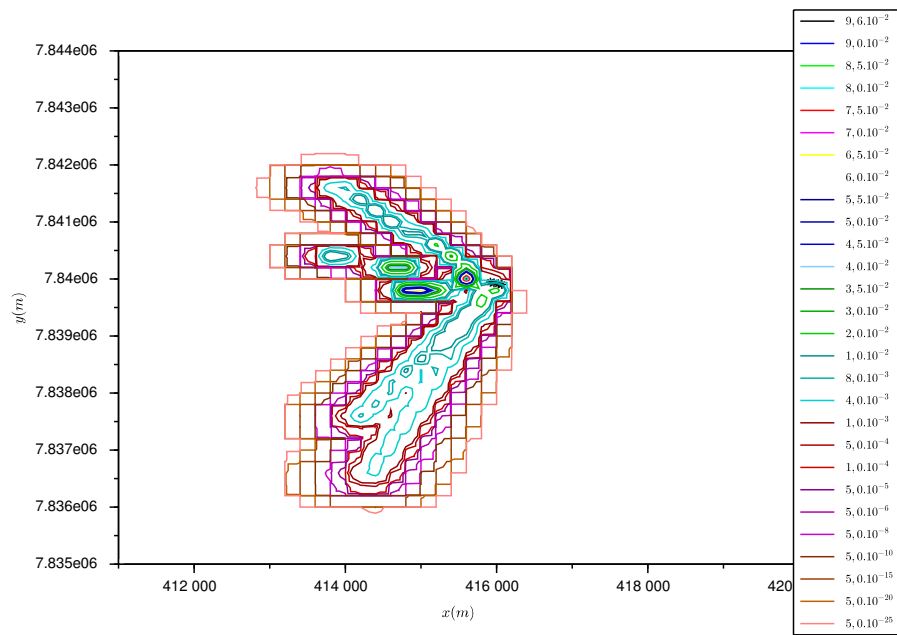


Figura 5.95 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 5$ horas.

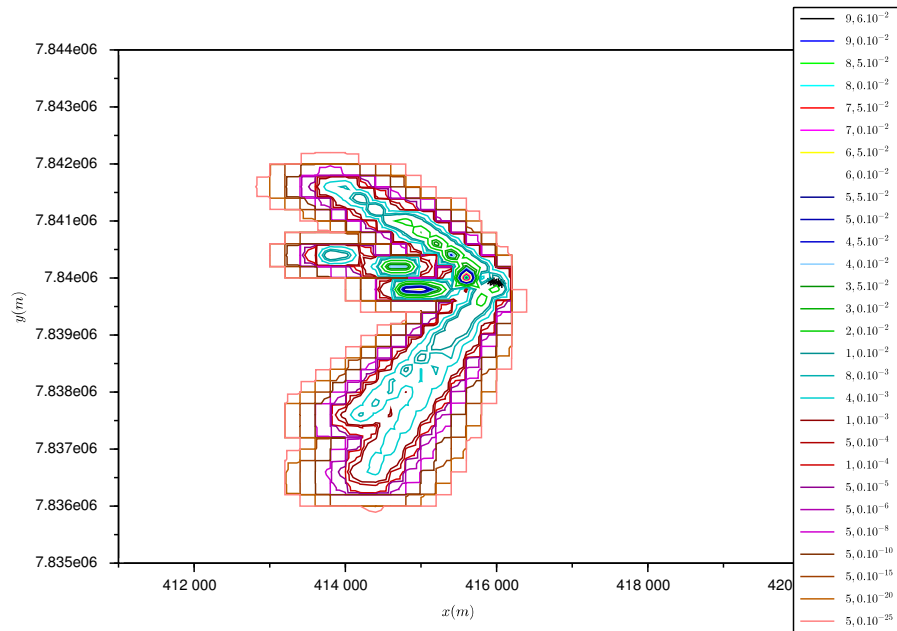


Figura 5.96 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 6$ horas.

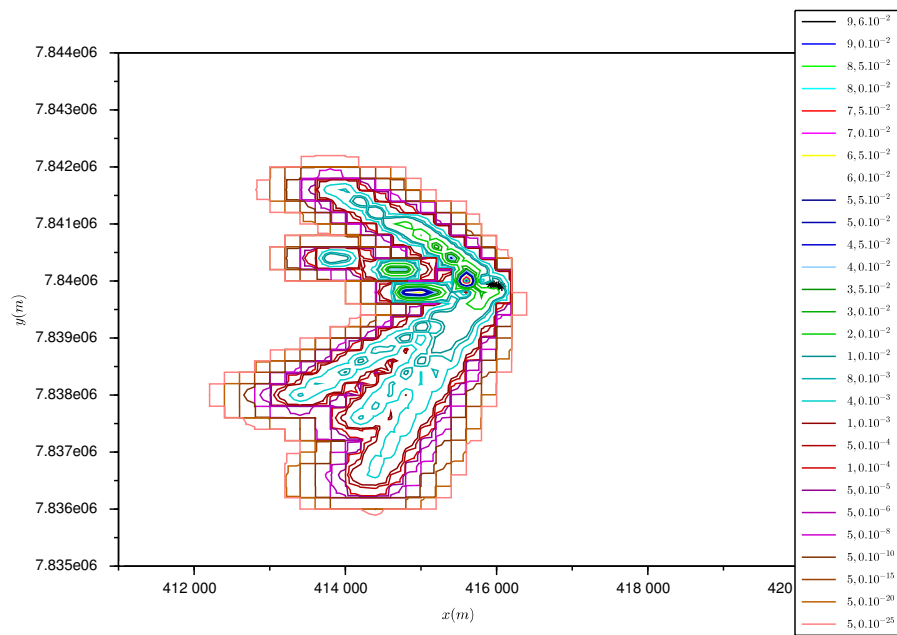


Figura 5.97 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 7$ horas.

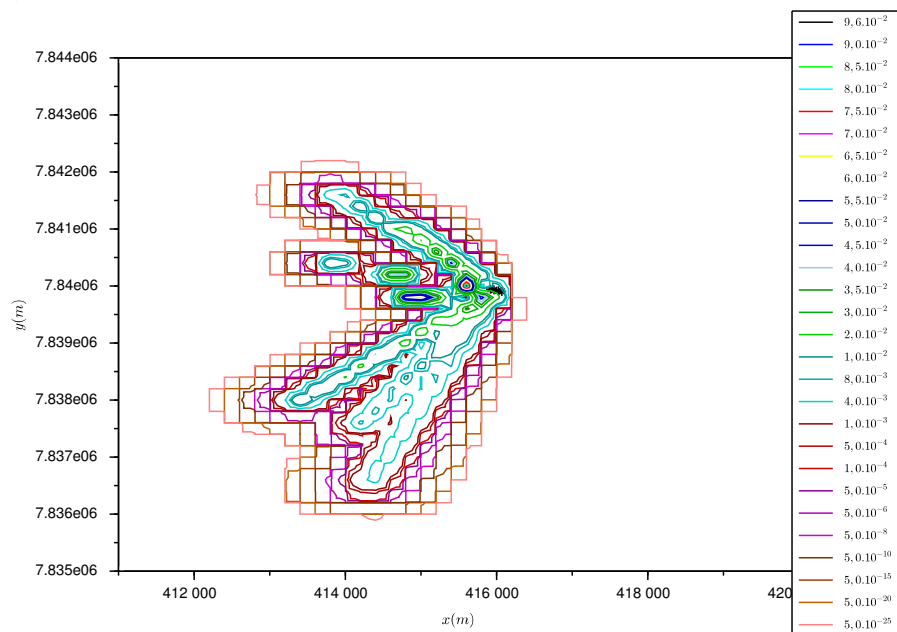


Figura 5.98 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 8$ horas.

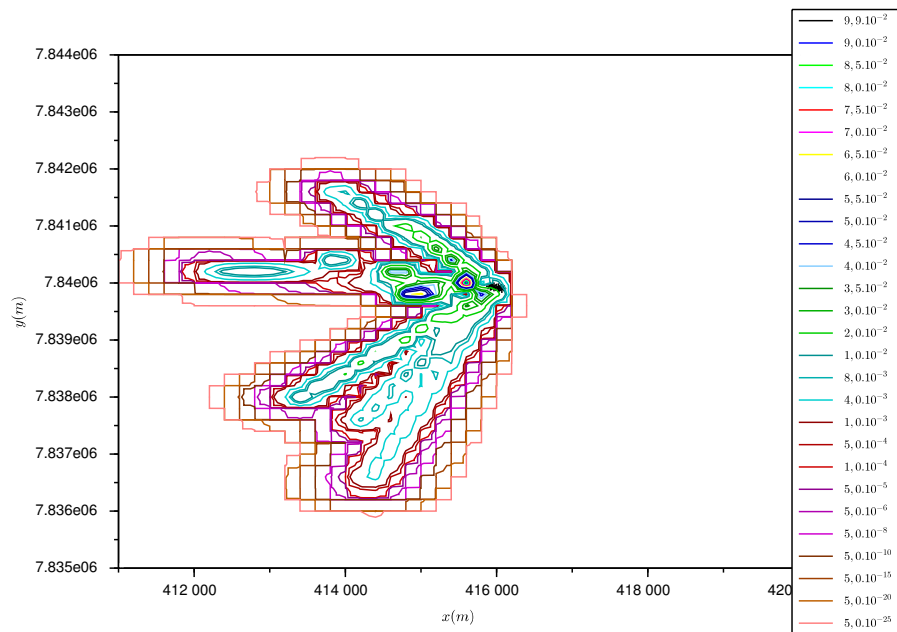


Figura 5.99 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 9$ horas.

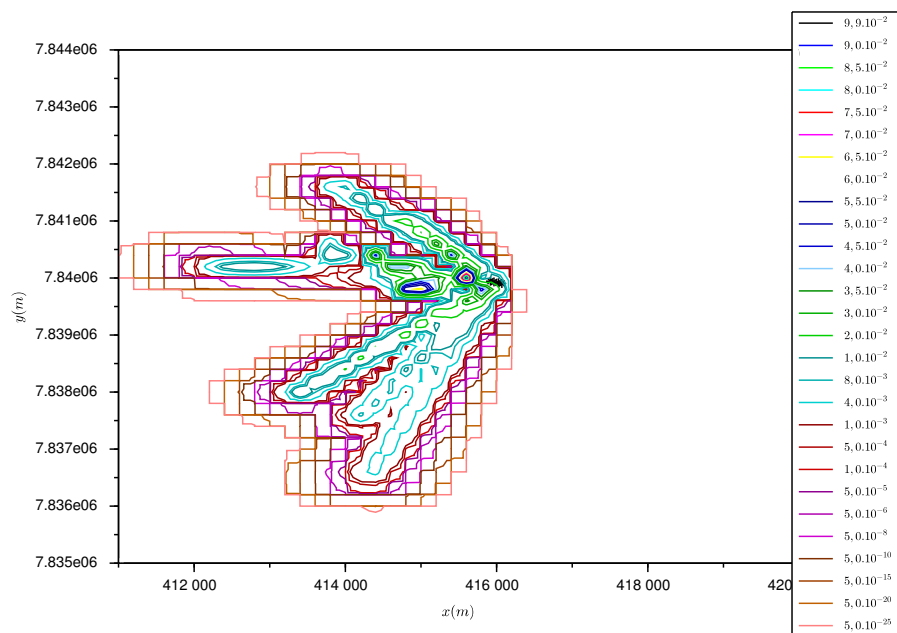


Figura 5.100 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 10$ horas.

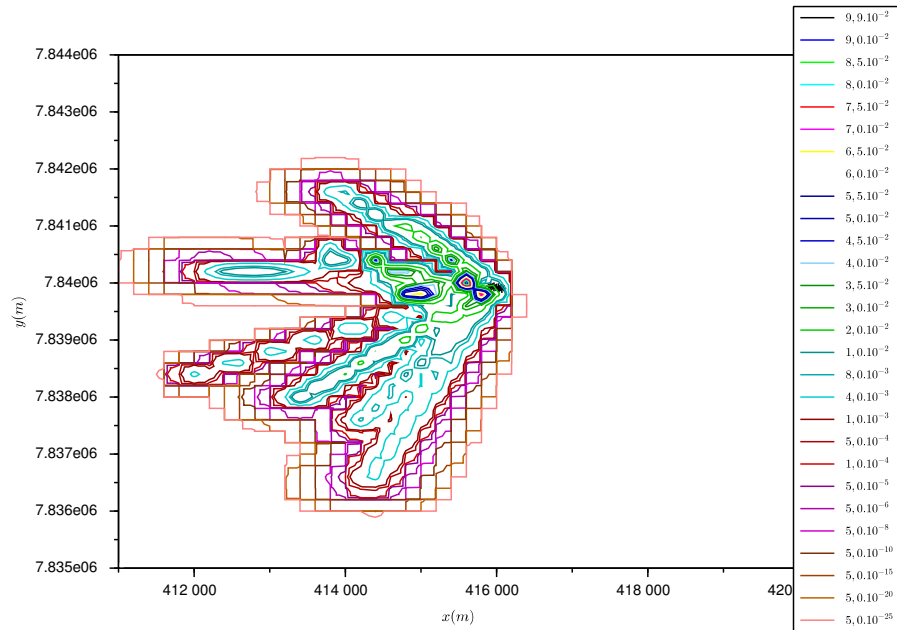


Figura 5.101 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 11$ horas.

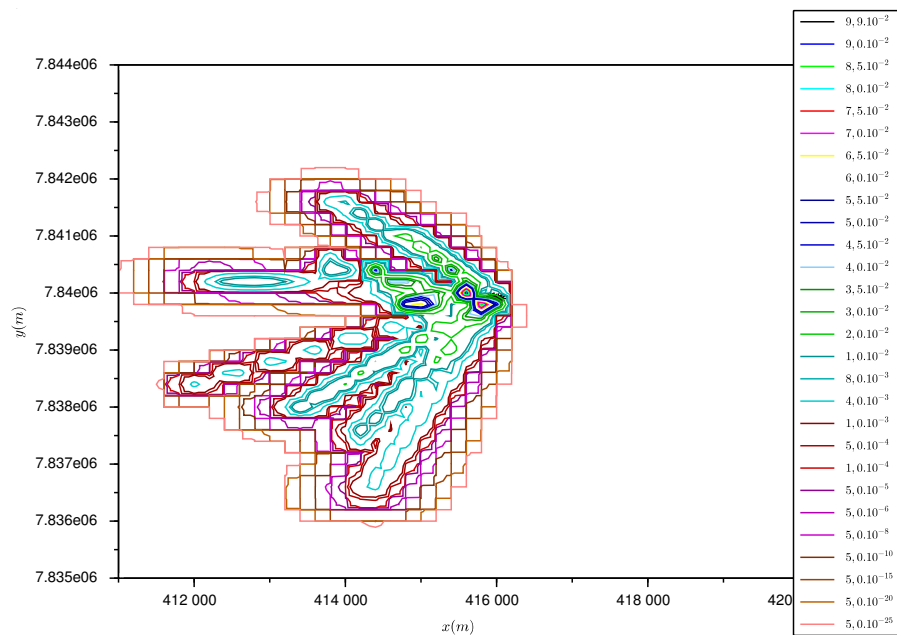


Figura 5.102 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 12$ horas.

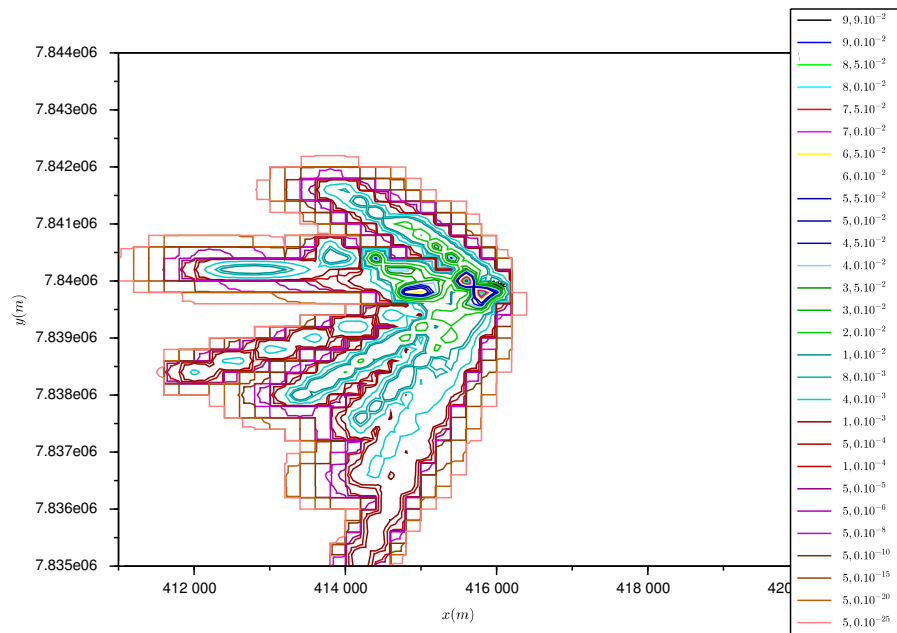


Figura 5.103 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 13$ horas.

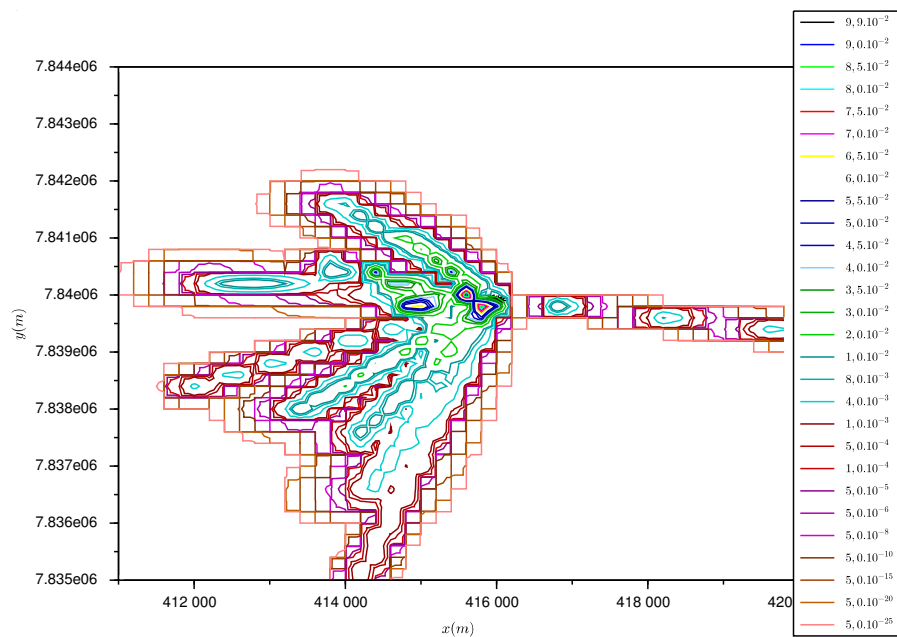


Figura 5.104 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 14$ horas.

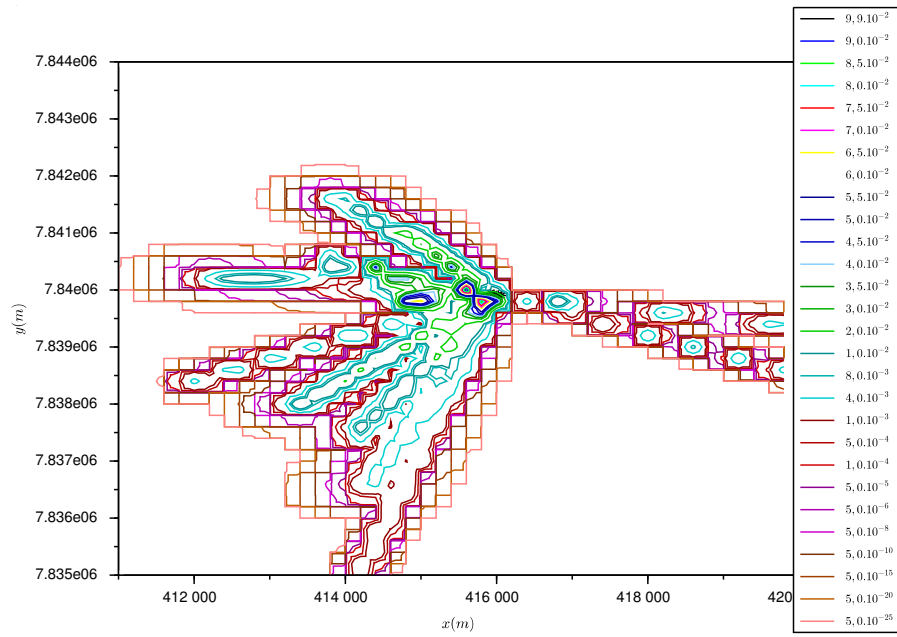


Figura 5.105 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 15$ horas.

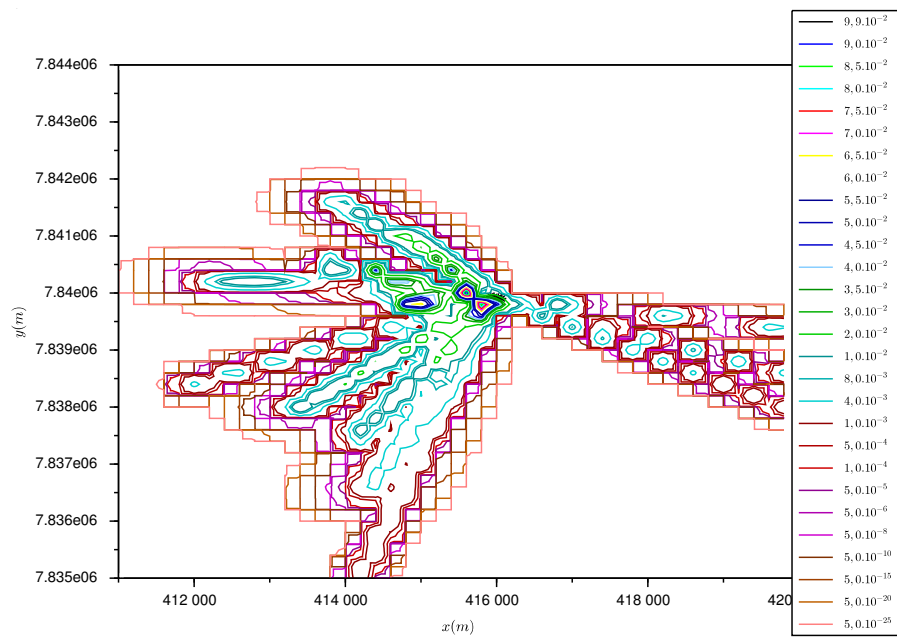


Figura 5.106 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 16$ horas.

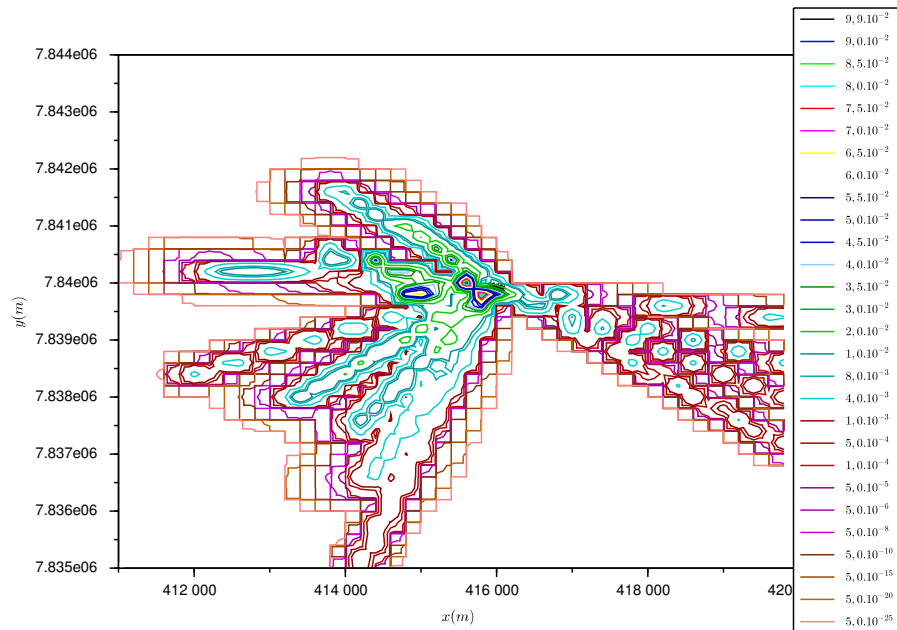


Figura 5.107 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 17$ horas.

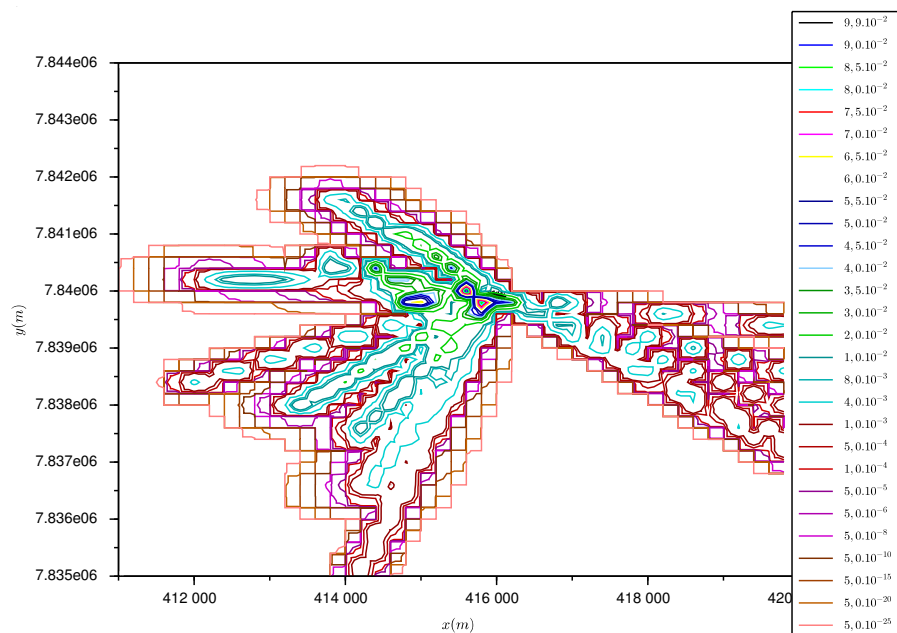


Figura 5.108 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 18$ horas.

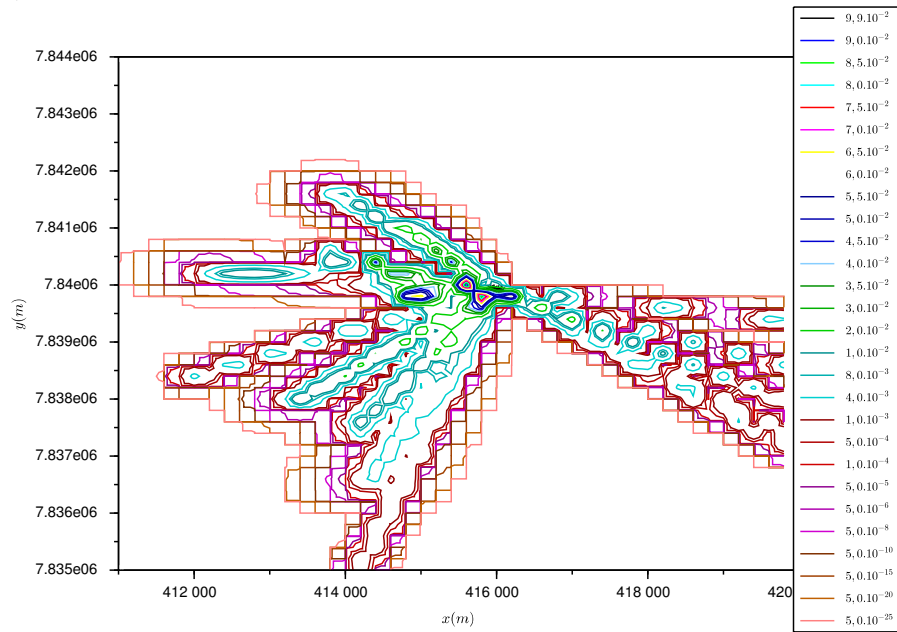


Figura 5.109 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 19$ horas.

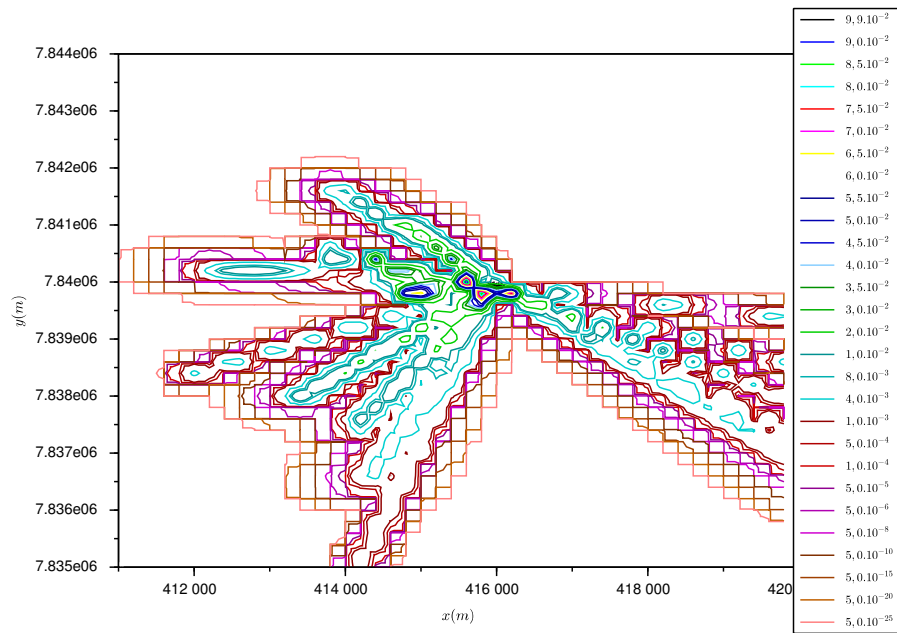


Figura 5.110 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 20$ horas.

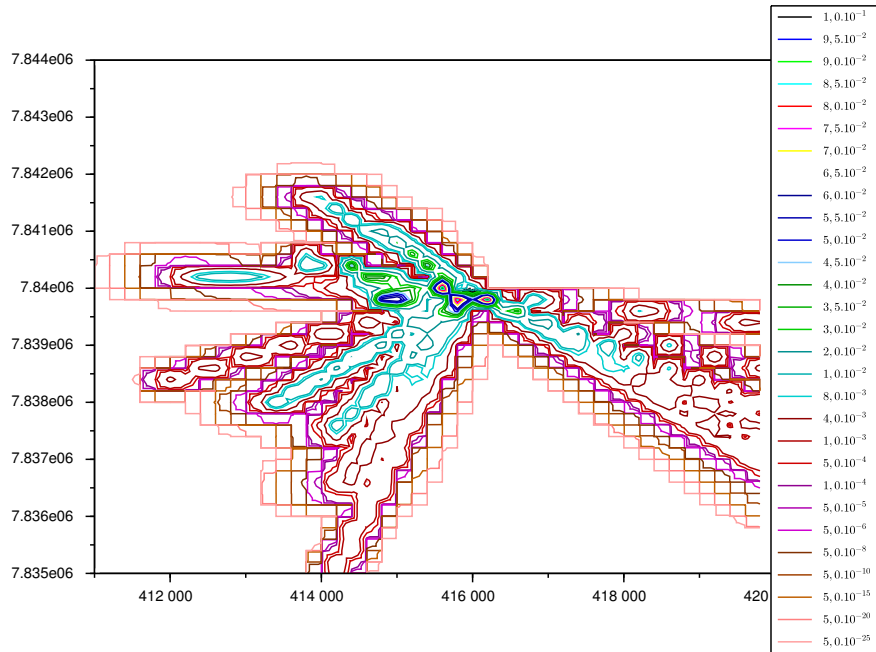


Figura 5.111 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 21$ horas.

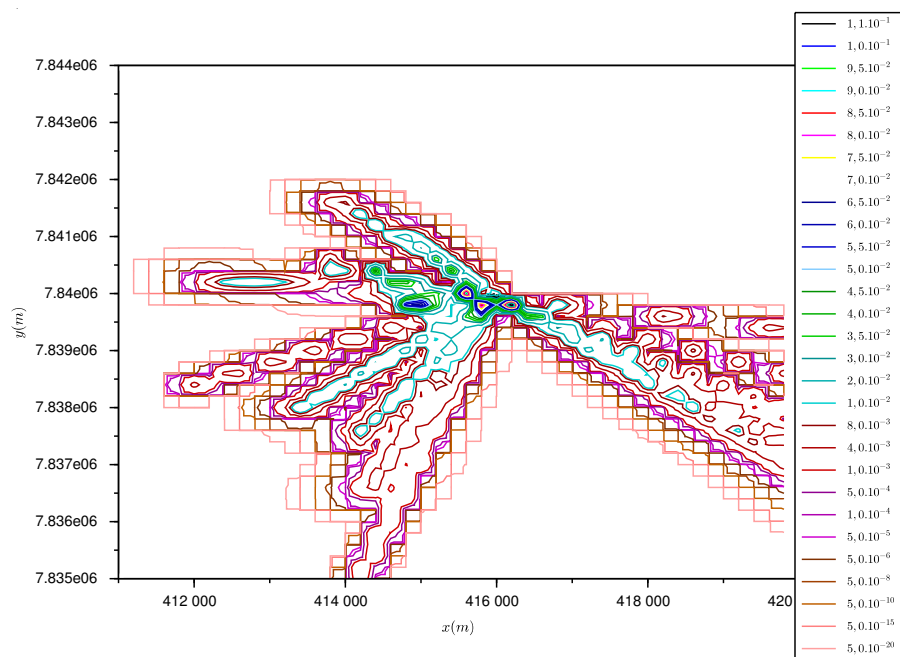


Figura 5.112 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 22$ horas.

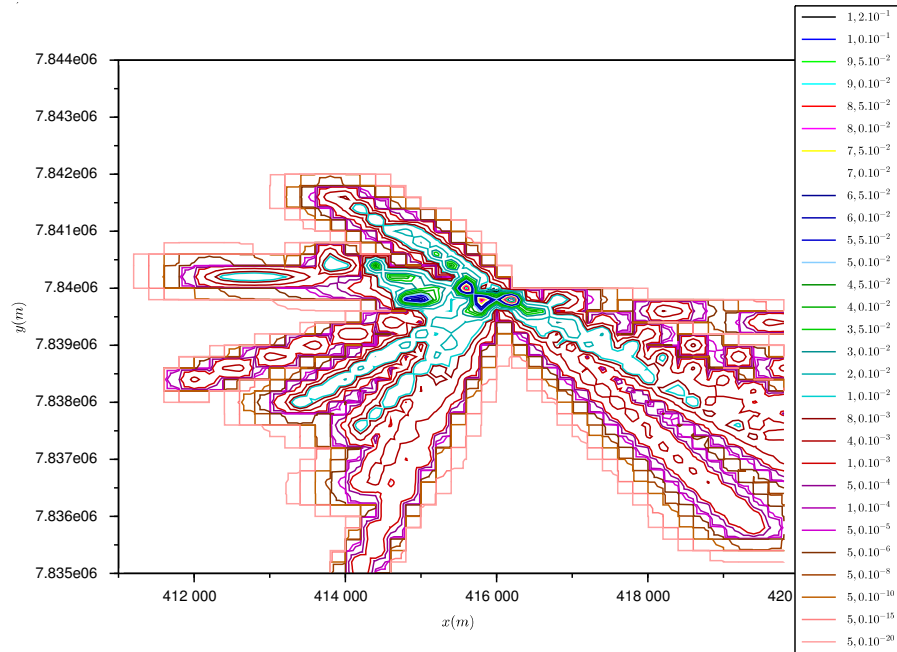


Figura 5.113 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 23$ horas.

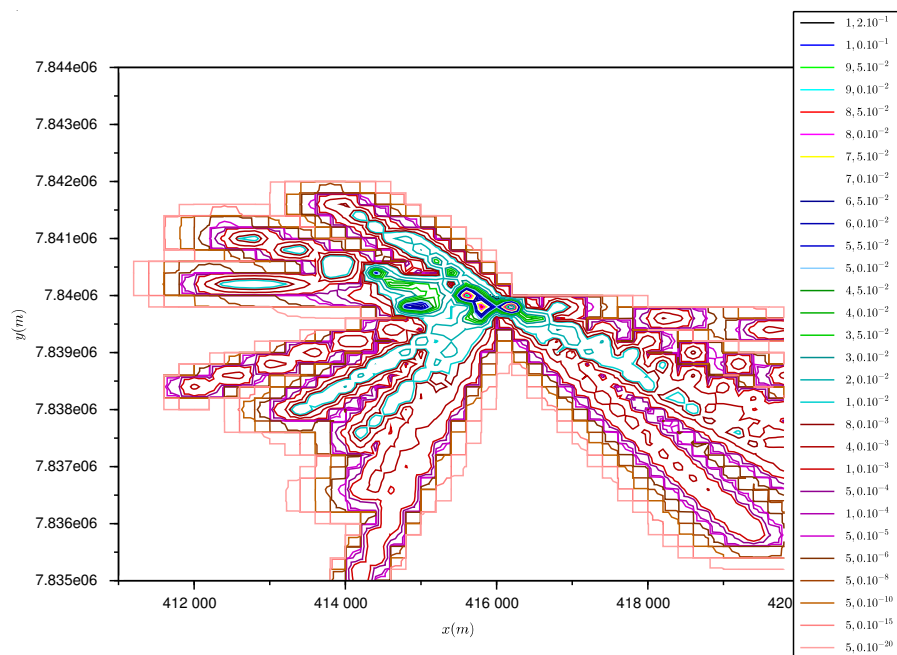


Figura 5.114 – Isolinhas da concentração (g/m^3) para a simulação da UTE LORM, com $t = 24$ horas.

6 CONCLUSÃO

Na presente pesquisa apresentou-se uma análise do comportamento da solução quando utilizadas reflexões parciais nos contornos do domínio vertical. Este trabalho é a continuidade do desenvolvimento do modelo introduzido no decorrer da pesquisa de mestrado realizada pela autora. Enquanto na dissertação os parâmetros reflexivos foram selecionados *ad hoc*, presentemente utilizou-se um mecanismo de otimização nos contornos através de índices estatísticos com valores distintos para os parâmetros de reflexão.

Usualmente, os modelos que simulam dispersão de poluentes na atmosfera abordam os contornos de forma fixa, seja por fluxo nulo ou concentração nula, porém isto não é necessariamente válido, pois pode existir uma parcela do poluente que escapa dos contornos estabelecidos para a camada limite. Ainda não é possível afirmar de modo definitivo qual a abordagem correta para os contornos, apesar disso, através da parametrização utilizada, nota-se claramente que há fenômenos físicos ainda desconhecidos por trás dos parâmetros inseridos no modelo.

No decorrer da pesquisa, comparou-se as soluções obtidas com o modelo semi-analítico proposto com dois experimentos de liberação de poluentes, cujos resultados foram expostos no exame de qualificação. Tinha-se como objetivo desenvolver uma metodologia de otimização e determinar os valores ótimos para os parâmetros da reflexão parcial.

Uma vez que alcançou-se tal objetivo, a próxima etapa planejada seria fazer uso da metodologia exposta juntamente com dados coletados pela torre meteorológica da Usina Termelétrica Luiz Oscar Rodrigues de Melo, com o propósito de obter o campo de concentração do contaminante em tempo real para fins de regulamentação conforme as leis ambientais estabelecidas para este tipo de atividade. Devido à ausência de dados de concentração, optou-se por utilizar os dados cedidos pela CMPC Celulose Riograndense, uma vez que o processo de otimização só é viável mediante estes dados.

A comparação com os dados medidos nos experimentos e na CMPC Celulose Riograndense mostra que o modelo com as reflexões parciais nos contornos ajusta satisfatoriamente as concentrações após as reflexões, de forma que planeja-se prosseguir as pesquisas neste sentido. A otimização apresentada indica que os valores ótimos para os parâmetros reflexivos variam conforme as condições meteorológicas.

Além disso, o fato de haver somente uma região de valores ótimos nos gráficos de

otimização indica que a inclusão das reflexões parciais tem relevância para melhorar a convergência da solução em comparação com os dados. Havendo a existência de diversos ótimos locais, seria hipoteticamente possível questionar que os argumentos são fracos, porém uma única aérea pronunciada de valores ótimos é uma indicação de que o modelo está passando por um processo de aprimoramento. Ainda existem aspectos físicos escondidos nos parâmetros de reflexão dos contornos, os quais não foram explorados nem explicados, porém não será tema desenvolvido nesta pesquisa, de modo que será devidamente explorado em pesquisas futuras.

É importante destacar que não existem dados ou modelos que investigam a interação do poluente com o solo e com o topo da camada limite atmosférica separadamente da dispersão, de forma que não é possível analisar e comparar somente o comportamento nos contornos. Usualmente, as pesquisas na área de dispersão de poluentes utilizam os índices estatísticos apenas para avaliar a qualidade da solução. Nesta pesquisa optou-se por uma abordagem inédita que faz uso de índices estatísticos como procedimento de otimização para ajustar o modelo de acordo com determinado conjunto de dados. Uma vez que o modelo está ajustado pode ser utilizado para realizar previsões, e os índices são empregados para avaliar a qualidade da solução. A utilização da combinação de índices estatísticos como $\frac{COR}{NMSE}$ e $\frac{COR}{\kappa}$ também é apresentada como contribuição original da pesquisa.

No que diz respeito à simulação e comparação com os dados de concentração da Usina Termelétrica Luiz Oscar Rodrigues de Melo, assim como a otimização do modelo para estes dados, pretende-se dar continuidade à pesquisa, visto que não foi possível avançar as pesquisas em consequência da falta de dados de concentração. Convém recordar que esta modelagem e simulação não será realizada somente a partir deste trabalho, mas juntamente com outros pesquisadores também vinculados ao projeto de pesquisa e desenvolvimento em atendimento à lei número 9.991, de 24 de julho de 2000 (alterada pelas leis número 10.438, de 26 de abril de 2002, número 10.848, de 15 de março de 2004, número 11.465, de 28 de março de 2007, número 12.111, de 09 de dezembro de 2009, e número 12.212, de 20 de janeiro de 2010), cuja regulamentação compete à ANEEL.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

Barratt, R. **Atmospheric dispersion modelling: an introduction to practical applications**. Earthscan, London, UK, 2001.

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

Batchvarova, E. e Gryning, S.-E. Applied Model for the Growth of the Daytime Mixed Layer, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 56, p. 261–274, 1990.

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

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

Biltoft, C. A., Turley, S. D., Watson, T. B., Crescenti, G. H., e Carter, R. G. **Over-Land Atmospheric Dispersion (OLAD) Test Summary and Analysis**. Customer report, U.S. Army Dugway Proving Ground, USA, 1999.

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

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.

Businger, J. A., Wyngaard, J. C., Y., I., e Bradley, E. F. Flux-profile relationships in the atmospheric surface layer, **Journal of the Atmospheric Sciences**, vol. 28, p. 181–189, 1971.

Buske, D., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., e Bodmann, B., **An analytical solution for the steady-state two-dimensional diffusion-advection-deposition model by the GILTT approach**, p. 27–36. Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; S. Potapenko, Birkhauser, Boston, 2007a.

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, 2007b.

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, p. 5496–5501, 2007c.

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

Carvalho, J. C. **Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva**. Dissertação de mestrado, Mestrado em Meteorologia, USP, 1996.

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

Chamberlain, A. C. **Aspects of travel and deposition of aerosol and vapour clouds**. Report AERE-HP/R-1261, UKAEA, Harwell, Berkshire, England, 1953.

Champagne, F. H., Friehe, C. A., LaRue, J. C., e Wyngaard, J. C. Flux measurements, flux estimation techniques, and fine-scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land, **Journal of the Atmospheric Sciences**, vol. 34, p. 515–530, 1977.

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

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

CONAMA. **Resolução CONAMA 03/1990 que estabelece os padrões primários e secundários de qualidade do ar e os critérios para episódios agudos de poluição do ar**, 1990.

Corrsin, S. Estimates of the relations between Eulerian and Lagrangian scales in large Reynolds number turbulence, **Journal of the Atmospheric Sciences**, vol. 20, p. 115–119, 1963.

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

Costa, C. P., Tirabassi, T., e Vilhena, M. T. The ADMM and GILTT methods applied in a puff dispersion model, **Proceedings do XXIX Congresso Ibero Latino-Americano sobre Métodos Computacionais em Engenharia**, 2008.

Cramer, H. E., Record, F. A., e Vaughan, H. C. **The study of the diffusion of gases or aerosols in the lower atmosphere**. Final Report AF 19(604)-1058, MIT Department of Meteorology, 1958.

Csanady, G. T. Dispersal of dust particles from elevated sources, **Australian Journal of Physics**, vol. 8, p. 545–550, 1955.

Csanady, G. T. Dispersal of dust particles from elevated sources, II. Limitations of the Approximate theory, **Australian Journal of Physics**, vol. 10, p. 558–564, 1957.

Csanady, G. T. Deposition of dust particles from industrial stacks, **Australian Journal of Applied Sciences**, vol. 9, p. 1–8, 1958.

Deardorff, J. W. e Willis, G. E. A parameterization of diffusion into the mixed layer, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 14, p. 1451–1458, 1975.

Degrazia, G. A. Modelling dispersion from elevated sources in a planetary boundary layer dominated by moderate convection, **Nuovo Cimento**, vol. 21C, p. 345–353, 1998.

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

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

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**, p. 1233–1240, 2001.

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, 1996.

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

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

Ermak, D. L. An analytical model for air pollution transport and deposition from a point source, **Atmospheric Environment**, vol. 11, p. 231–237, 1977.

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

Garratt, J. R. **The Atmospheric Boundary Layer**. Cambridge University Press, New York, 1 edition, 1992.

Gifford Jr., F. Relative atmospheric diffusion of smoke puffs, **Journal of Meteorology**, vol. 14, p. 410–414, 1957.

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.

Hanna, S. R. Lagrangian and Eulerian time-scale relations in the daytime boundary layer, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 20, p. 242–249, 1981.

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.

Högström, U. An experimental study on atmospheric diffusion, **Tellus A**, vol. 16(2), p. 205–251, 1964.

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

Horst, T. W. A surface depletion model for deposition from a gaussian plume, **Atmospheric Environment**, vol. 11, p. 41–46, 1977.

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

Jacobson, M. Z. **Fundamentals of Atmospheric Modeling**. Cambridge University Press, New York, 2 edition, 2005.

Keeping, E. S. **Introduction to Statistical Inference**. Dover Publications, Inc., New York, 1995.

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.

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

Lin, J. S. e Hildemann, L. M. A generalized mathematical scheme to analitically 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, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2014.

Mello, K. B. **Simulação da dispersão de poluentes na camada limite planetária através da solução da equação de Langevin pelo método da decomposição**. Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2010.

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. 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 Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation, **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**, vol. 1, p. 179–202. *Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications*, Organized by: D. Moreira; M. Vilhena, CRC Press, Boca Raton, Florida, 2009a.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D., e T., T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere, **Atmospheric Research**, vol. 92, p. 1–17, 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, J. 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., Costa, C. P., e Bodmann, B. Simulation of pollutant dispersion in the atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach, **Water and Soil Pollution**, vol. 177, p. 411–439, 2006b.

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

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

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.

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

Olesen, H. R., Larsen, S. E., e Højstrup, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer, **Boundary-Layer Meteorology**, vol. 29, p. 285–312, 1984.

Overcamp, T. J. A general Gaussian diffusion-deposition model for elevated point source, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 15, p. 1167–1171, 1976.

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

Pasquill, F. e Smith, F. B. **Atmospheric Diffusion**. Halsted Press, New York, 3 edition, 1983.

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

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 Sensoriamento Remoto, 1996.

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

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

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

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

Scriven, R. A. e Fisher, B. E. 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, New Jersey, 2 edition, 2006.

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

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

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

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

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

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

Stevens, B. Quasi-steady analysis of a PBL model with an eddy-diffusivity profile and nonlocal fluxes, **Monthly Weather Review**, vol. 128, p. 824–836, 2000.

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

Sutton, O. G. A theory of eddy diffusion in the atmosphere, **Proceedings of the Royal Society of London. Series A**, vol. 135, p. 143–165, 1932.

Sutton, O. G. The theoretical distribution of airborne pollutants from factory chimney stacks, **Quarterly Journal of the Royal Meteorology Society**, vol. 73, p. 426–436, 1947.

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

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**, p. In Press, 2008.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Wandel, C. e Kofoed-Hansen, O. On the Eulerian-Lagrangian Transform in the Statistical Theory of Turbulence, **Journal of Geophysical Research**, vol. 67(8), p. 3089–3093, 1962.

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

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

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

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

Zilitinkevich, S. S. Comments on "A model for the dynamics of the inversion above a convective boundary layer", **Journal of Atmospheric Sciences**, vol. 32, p. 991–992, 1975.

APÊNDICE A - Resultados do exame de qualificação

Neste apêndice, apresenta-se os resultados das simulações realizadas a partir dos experimentos de Hanford [Doran e Horst, 1985] e Copenhagen [Gryning e Lyck, 1984], expostas no exame de qualificação. Os experimentos diferenciam-se mutuamente principalmente pela altura da fonte e as condições micrometeorológicas nas quais foram executados, sendo fonte alta sob condições convectivas para Copenhagen e fonte baixa sob condições estáveis para Hanford. Aqui apresenta-se um breve resumo sobre os experimentos, assim como alguns dados micrometeorológicos importantes para a simulação deles.

A.1 Experimento de Hanford (Washington, EUA)

O experimento de Hanford foi realizado de maio a junho de 1983, em uma região de sul a leste do estado de Washington, em um terreno praticamente plano. A descrição detalhada do experimento foi fornecida por Doran e Horst, 1985. É um experimento de fonte baixa executado durante condições estáveis a quase-neutras. Por ser um experimento estável, a altura da camada limite atmosférica aqui considerada será a altura da camada limite estável, denotada por h

Foram liberados simultaneamente dois poluentes, um que deposita (ZnS) e um que não deposita (SF_6) de uma altura de 2 m e coletados a uma altura de 1,5 m acima do solo. Os coletores foram posicionados a 100, 200, 800, 1600 e 3200 m de distância da fonte. O comprimento de rugosidade do terreno era de 3 cm. No total foram realizados 6 experimentos. Em cada experimento o tempo de liberação foi em torno de 30 minutos, exceto no experimento 5 que foi de 22 minutos. A taxa de liberação média foi de 0,3 g/s.

No presente trabalho, foram utilizados somente os dados do SF_6 , pois não foi considerada a deposição no solo. Os valores dos parâmetros da camada limite atmosférica são apresentados na Tabela A.1, onde \bar{u} é a velocidade média do vento (m/s), u_* é a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Obukhov (m) e h é a altura da camada limite estável (m), que não foi fornecida no experimento, de forma que foi utilizada a relação $h = 0,4(u_*L/f_c)^{1/2}$ [Zilitinkevich, 1972], na qual f_c representa o parâmetro de Coriolis.

Tabela A.1 – Dados micrometeorológicos do experimento de Hanford [Doran e Horst, 1985].

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

A.1.1 Resultados

Primeiramente, apresenta-se os resultados do experimento de Hanford, que é estável e tem fonte baixa. A figura A.1 exhibe o gráfico de espalhamento para o caso de reflexão completa, ou seja, $\omega_c = \omega_s = 1,0$ e posteriormente seus índices estatísticos são expostos na tabela A.2.

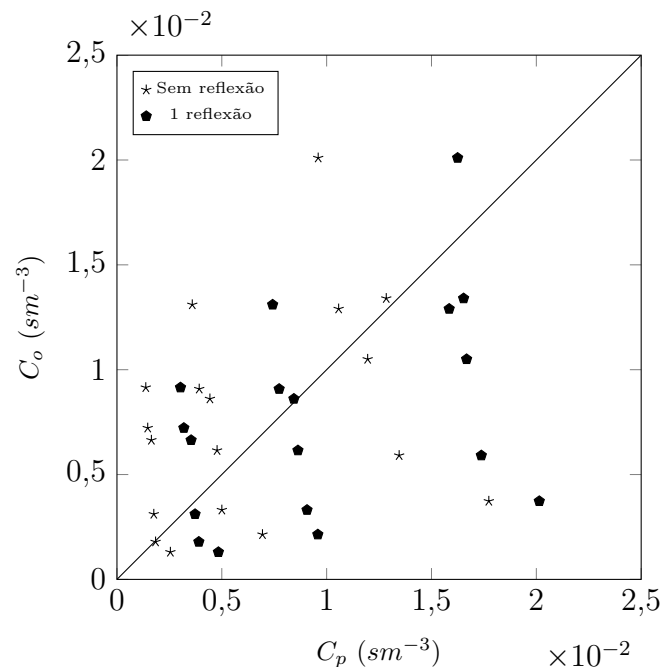


Figura A.1 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com uma reflexão completa, $\omega_c = 1,0$ e $\omega_s = 1,0$, para o experimento de Hanford.

Tabela A.2 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 1,0$ e $\omega_s = 1,0$ para o experimento de Hanford.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	1,17	0,252	-0,645	1,199
Com reflexão ($n = 1$)	0,505	0,379	-0,15	0,968

A seguir são apresentados os resultados para as reflexões parciais. Os valores utilizados para ω_c e ω_s estão indicados nas legendas das figuras A.2, A.3 e A.4, assim como das tabelas A.3, A.4 e A.5. Tais valores para ω_c e ω_s não foram escolhidos aleatoriamente, foram sugeridos pelos resultados da otimização que serão expostos na continuidade do trabalho.

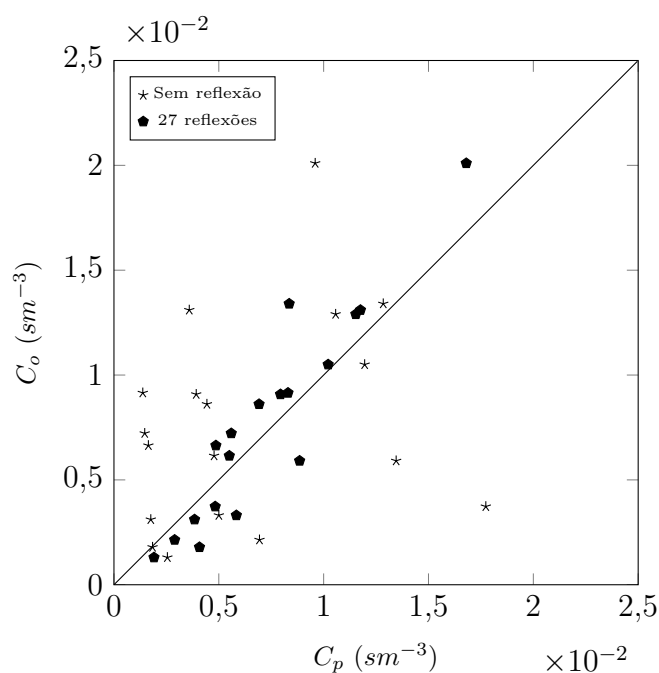


Figura A.2 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 27 reflexões parciais, $\omega_c = 0,01$ e $\omega_s = 0,01$, para o experimento de Hanford.

Tabela A.3 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,01$ e $\omega_s = 0,01$ para o experimento de Hanford.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	1,17	0,252	-0,645	1,199
Com reflexão ($n = 1$)	2,804	0,341	1,033	0,904
Com reflexão ($n = 2$)	0,586	0,618	0,507	0,655
Com reflexão ($n = 3$)	0,262	0,746	0,366	0,511
Com reflexão ($n = 4$)	0,159	0,808	0,313	0,44
Com reflexão ($n = 5$)	0,116	0,84	0,294	0,41
Com reflexão ($n = 6$)	0,096	0,858	0,29	0,4
Com reflexão ($n = 7$)	0,085	0,868	0,288	0,396
Com reflexão ($n = 8$)	0,079	0,874	0,287	0,393
Com reflexão ($n = 9$)	0,075	0,877	0,286	0,392
Com reflexão ($n = 10$)	0,073	0,879	0,285	0,392
Com reflexão ($n = 13$)	0,07	0,881	0,283	0,391
Com reflexão ($n = 20$)	0,069	0,882	0,282	0,391
Com reflexão ($n = 27$)	0,069	0,882	0,282	0,391

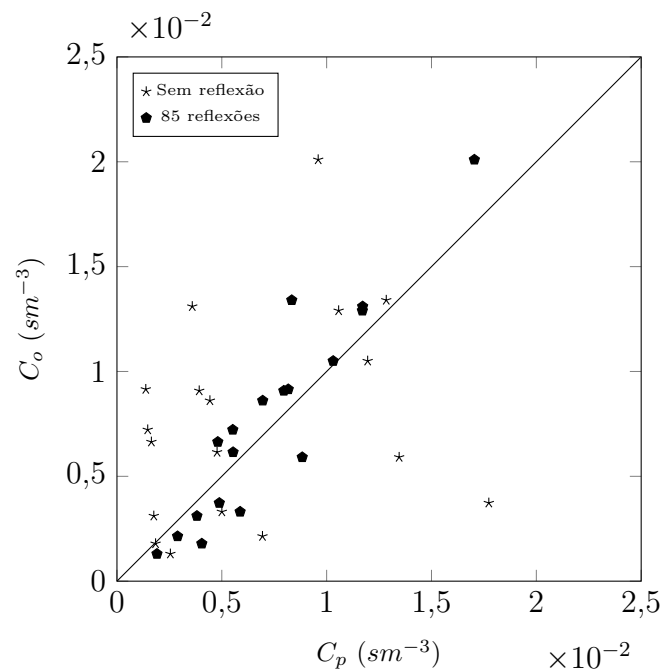


Figura A.3 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 85 reflexões parciais, $\omega_c = 0,003$ e $\omega_s = 0,003$, para o experimento de Hanford.

Tabela A.4 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,003$ e $\omega_s = 0,003$ para o experimento de Hanford.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	1,17	0,252	-0,645	1,199
Com reflexão ($n = 2$)	2,824	0,378	1,080	0,898
Com reflexão ($n = 4$)	0,793	0,559	0,613	0,731
Com reflexão ($n = 6$)	0,368	0,664	0,395	0,592
Com reflexão ($n = 8$)	0,217	0,736	0,296	0,496
Com reflexão ($n = 12$)	0,112	0,814	0,210	0,394
Com reflexão ($n = 16$)	0,079	0,848	0,183	0,359
Com reflexão ($n = 20$)	0,067	0,864	0,177	0,35
Com reflexão ($n = 30$)	0,057	0,878	0,172	0,347
Com reflexão ($n = 40$)	0,056	0,88	0,171	0,347
Com reflexão ($n = 50$)	0,056	0,881	0,17	0,347
Com reflexão ($n = 85$)	0,056	0,881	0,17	0,347

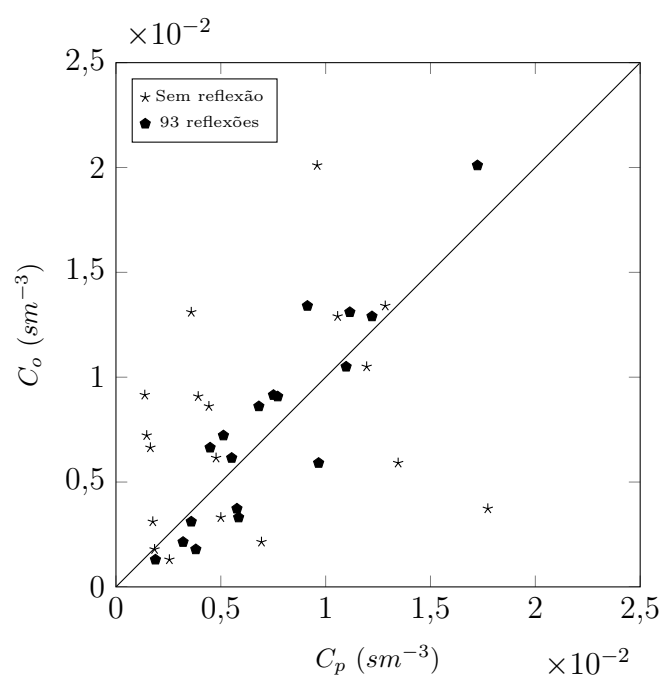


Figura A.4 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 93 reflexões parciais, $\omega_c = 0,003$ e $\omega_s = 0,01$, para o experimento de Hanford.

Tabela A.5 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,003$ e $\omega_s = 0,01$ para o experimento de Hanford.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	1,17	0,252	-0,645	1,199
Com reflexão ($n = 2$)	2,564	0,363	1,039	0,9
Com reflexão ($n = 4$)	0,774	0,527	0,587	0,749
Com reflexão ($n = 6$)	0,383	0,627	0,363	0,613
Com reflexão ($n = 8$)	0,238	0,702	0,263	0,513
Com reflexão ($n = 12$)	0,131	0,786	0,176	0,399
Com reflexão ($n = 16$)	0,096	0,823	0,151	0,359
Com reflexão ($n = 20$)	0,081	0,842	0,147	0,348
Com reflexão ($n = 30$)	0,068	0,860	0,149	0,345
Com reflexão ($n = 40$)	0,066	0,865	0,149	0,345
Com reflexão ($n = 50$)	0,065	0,866	0,149	0,345
Com reflexão ($n = 60$)	0,065	0,867	0,149	0,345
Com reflexão ($n = 93$)	0,065	0,867	0,149	0,345

A partir das figuras expostas acima, observa-se que após as reflexões parciais os valores simulados para a concentração se aproximam dos valores medidos experimentalmente, assim como os índices estatísticos também indicam tal comportamento, pois a cada reflexão o índice melhora de maneira convergente. A reflexão completa pouco modifica as concentrações, indicando que não é o modelo mais próximo do fenômeno físico.

Na sequência são apresentados os resultados da otimização realizada para o experimento de Hanford, com o intuito de determinar quais os valores de ω_c e ω_s que melhor se ajustam às reflexões. Na figura A.5 tem-se um gráfico de superfície de todos os valores para o erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para os ômega entre 0 e 0,1. Os valores entre 0,1 e 1,0 foram descartados para melhor visualização dos gráficos. Na figura A.6 apresenta-se as isolinhas do gráfico anterior com indicação dos valores para cada linha.

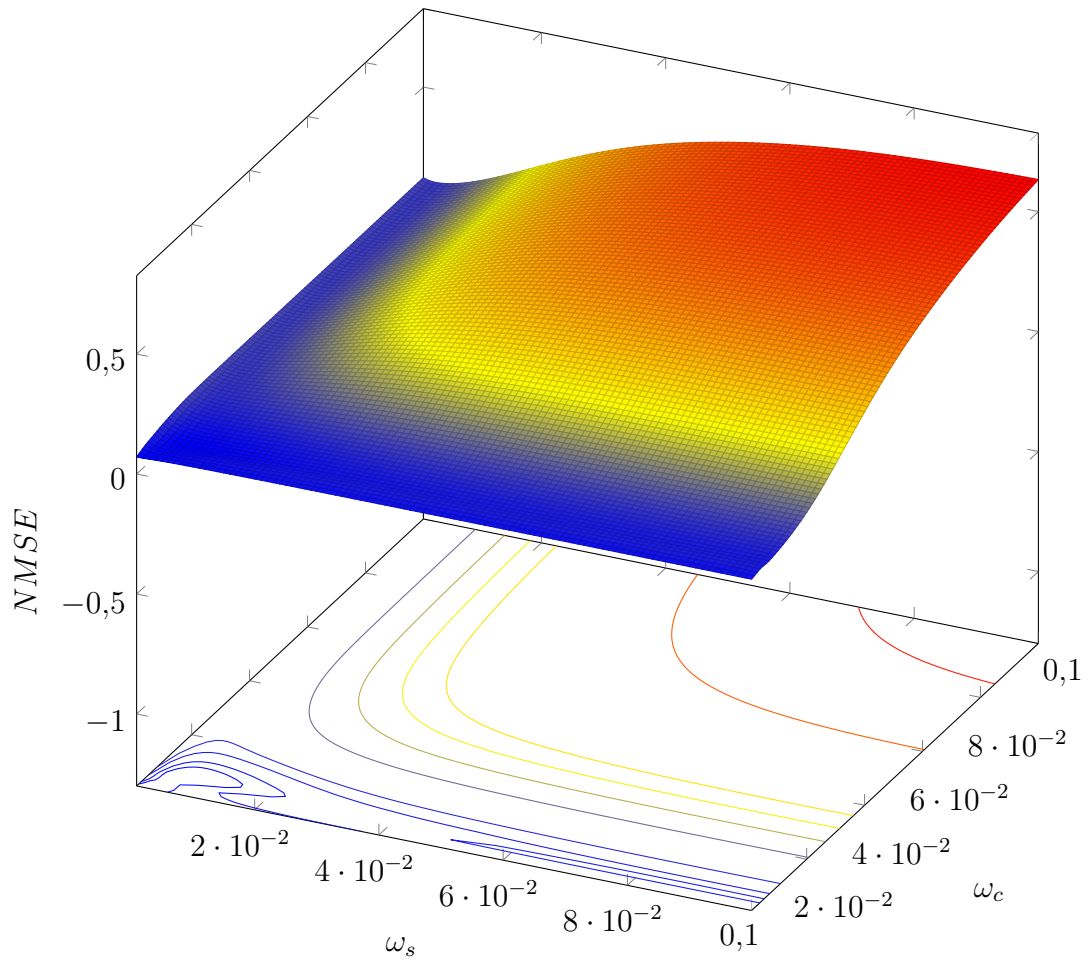


Figura A.5 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para o experimento de Hanford.

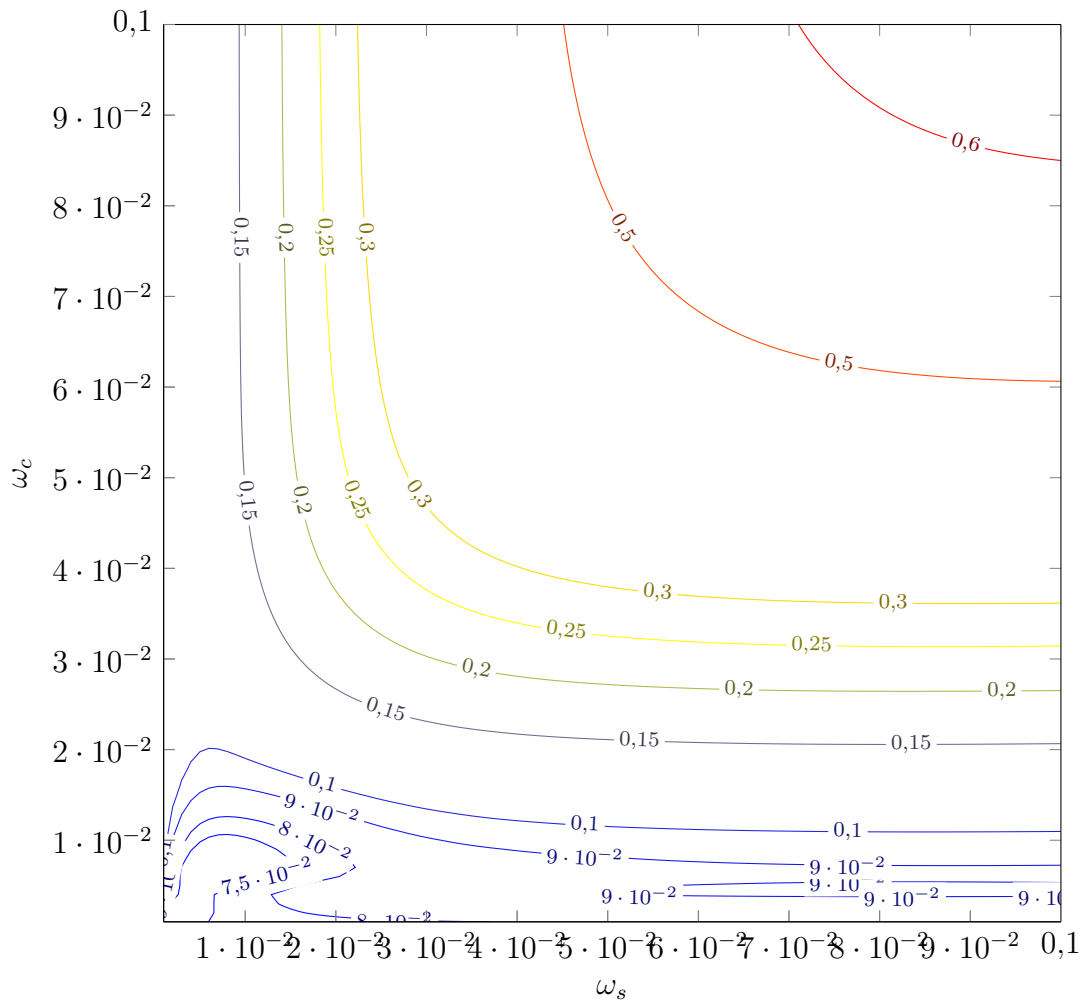


Figura A.6 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado (*NMSE*) para o experimento de Hanford.

Para a otimização foi também calculado os valores para o índice de correlação (COR) para o mesmo intervalo de ω_c e ω_s , sendo o gráfico apresentado na figura A.7 e as isolinhas na figura A.8.

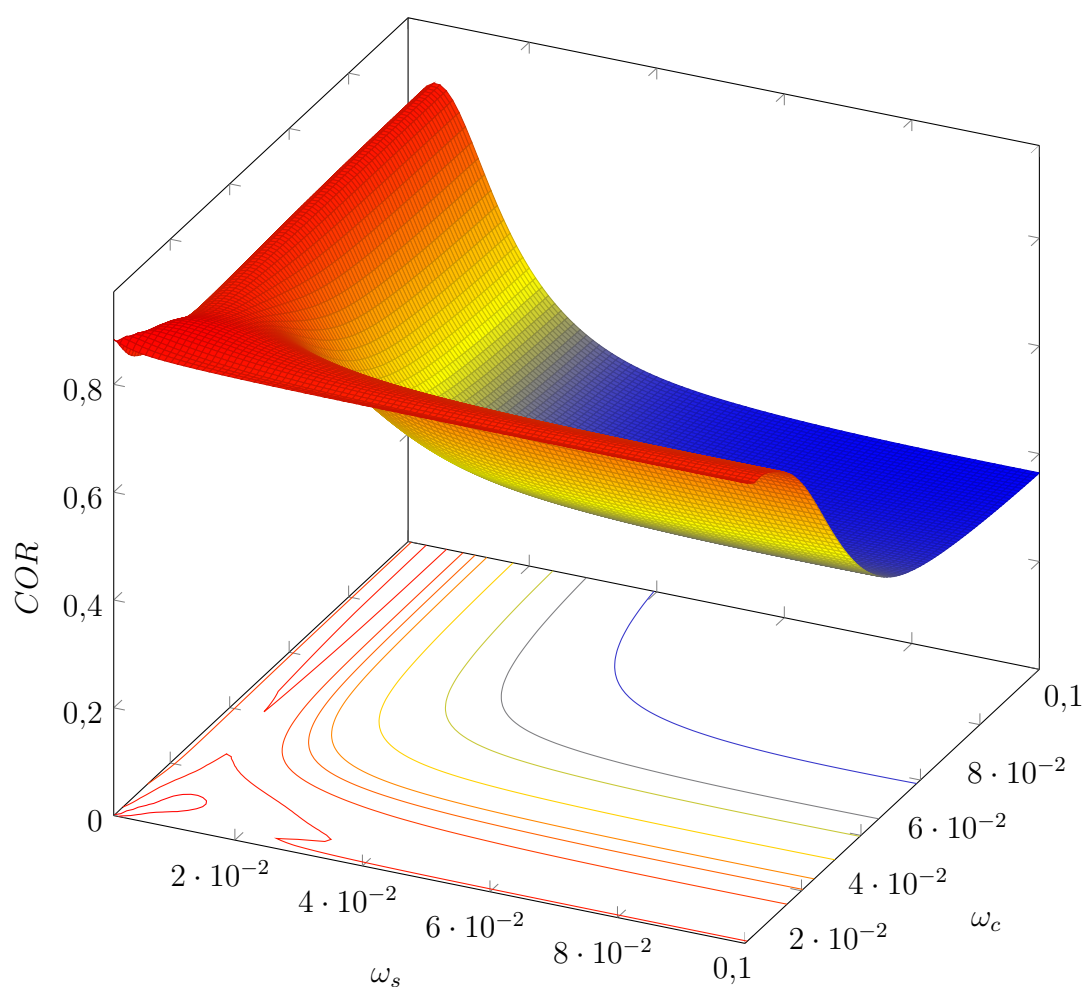


Figura A.7 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para o experimento de Hanford.

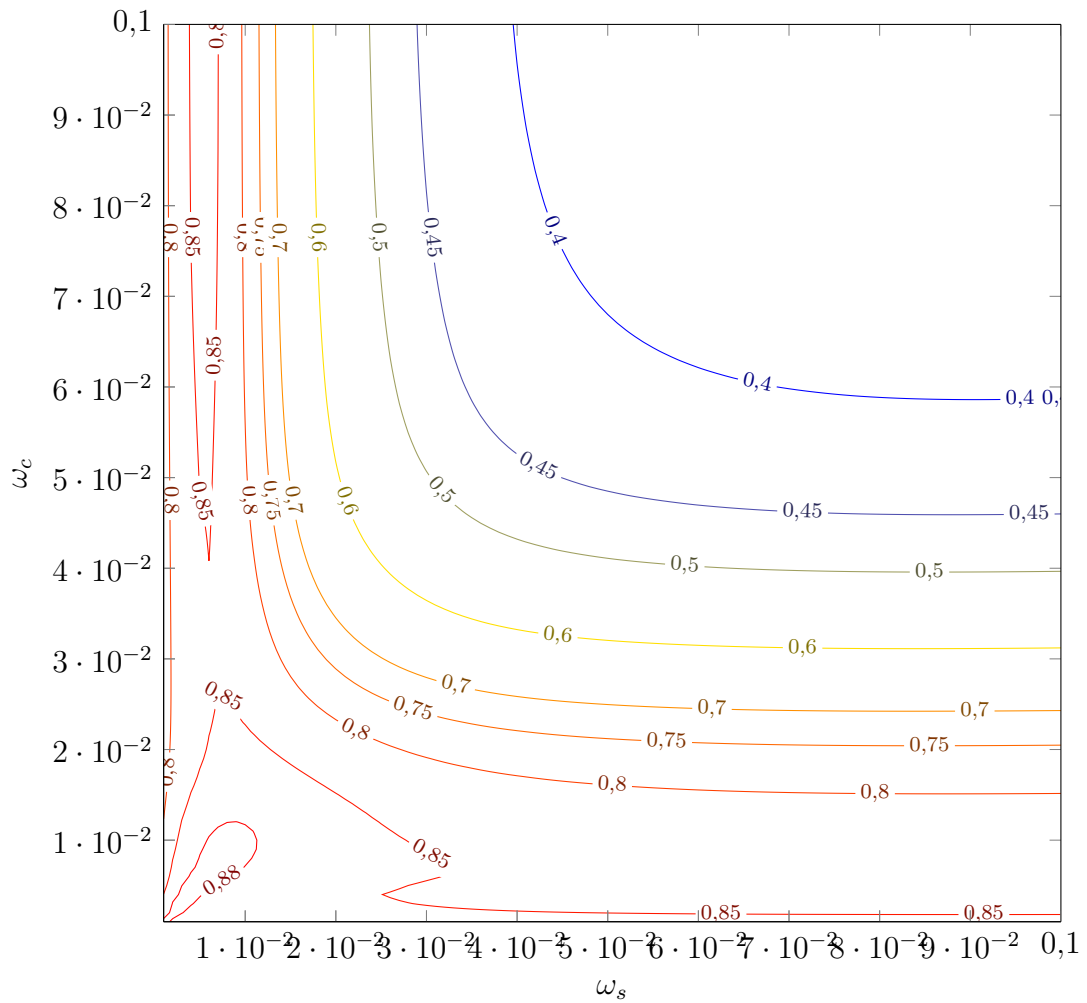


Figura A.8 – Isolinhas do índice de correlação (*COR*) para o experimento de Hanford.

Para encerrar esta subseção, apresenta-se os gráficos e isolinhas dos terceiros e quartos momentos estatísticos, também conhecidos como assimetria e curtose, respectivamente. A assimetria é apresentada nas figuras A.9 e A.10, e a curtose nas figuras A.11 e A.12.

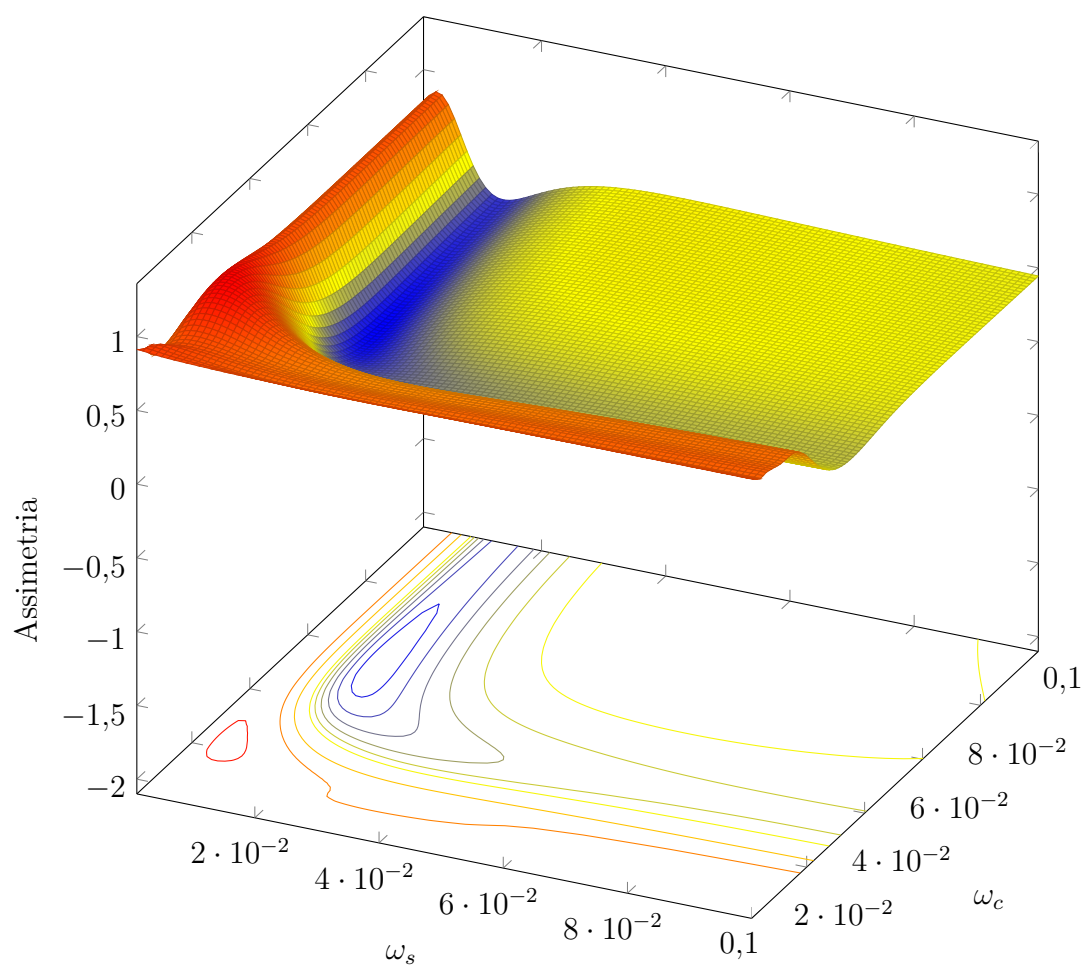


Figura A.9 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para o experimento de Hanford.

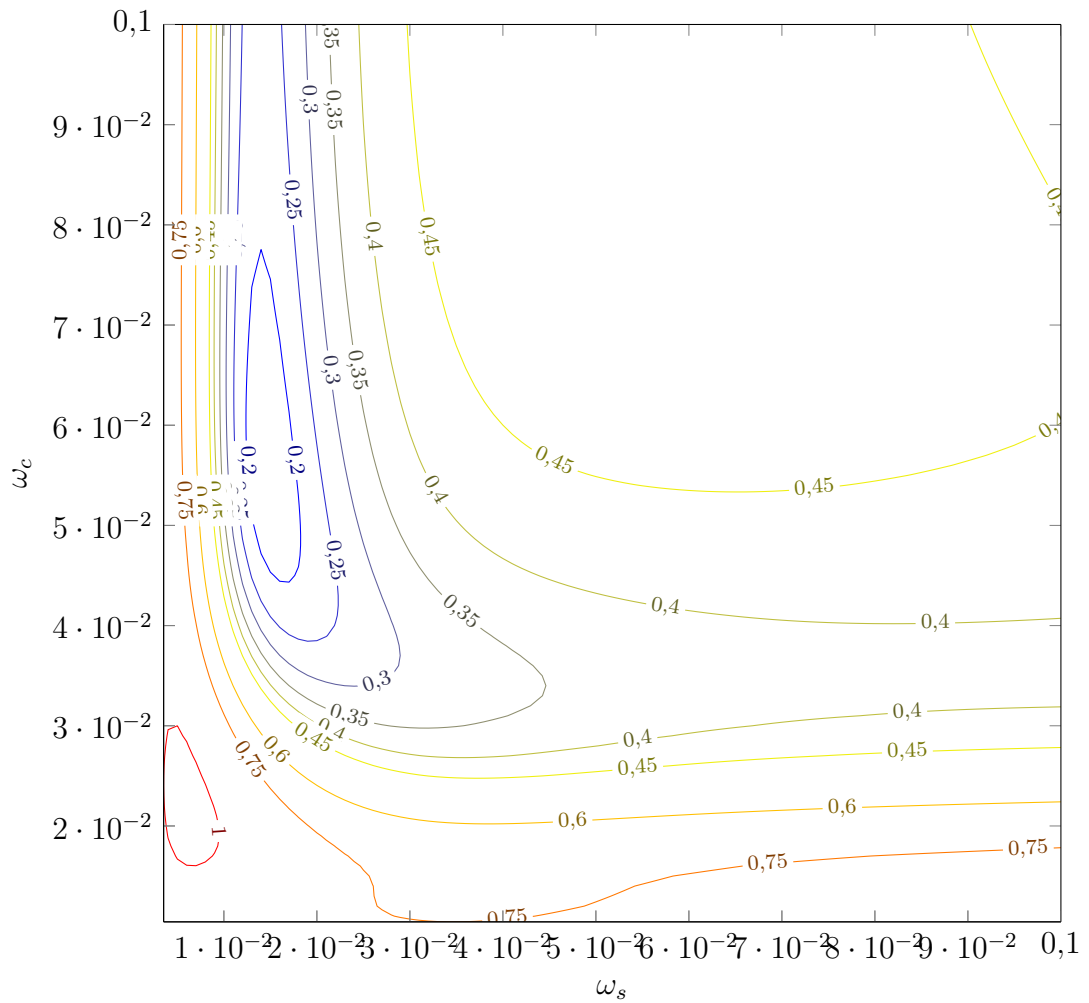


Figura A.10 – Isolinhas da assimetria (3^o momento estatístico) para o experimento de Hanford.

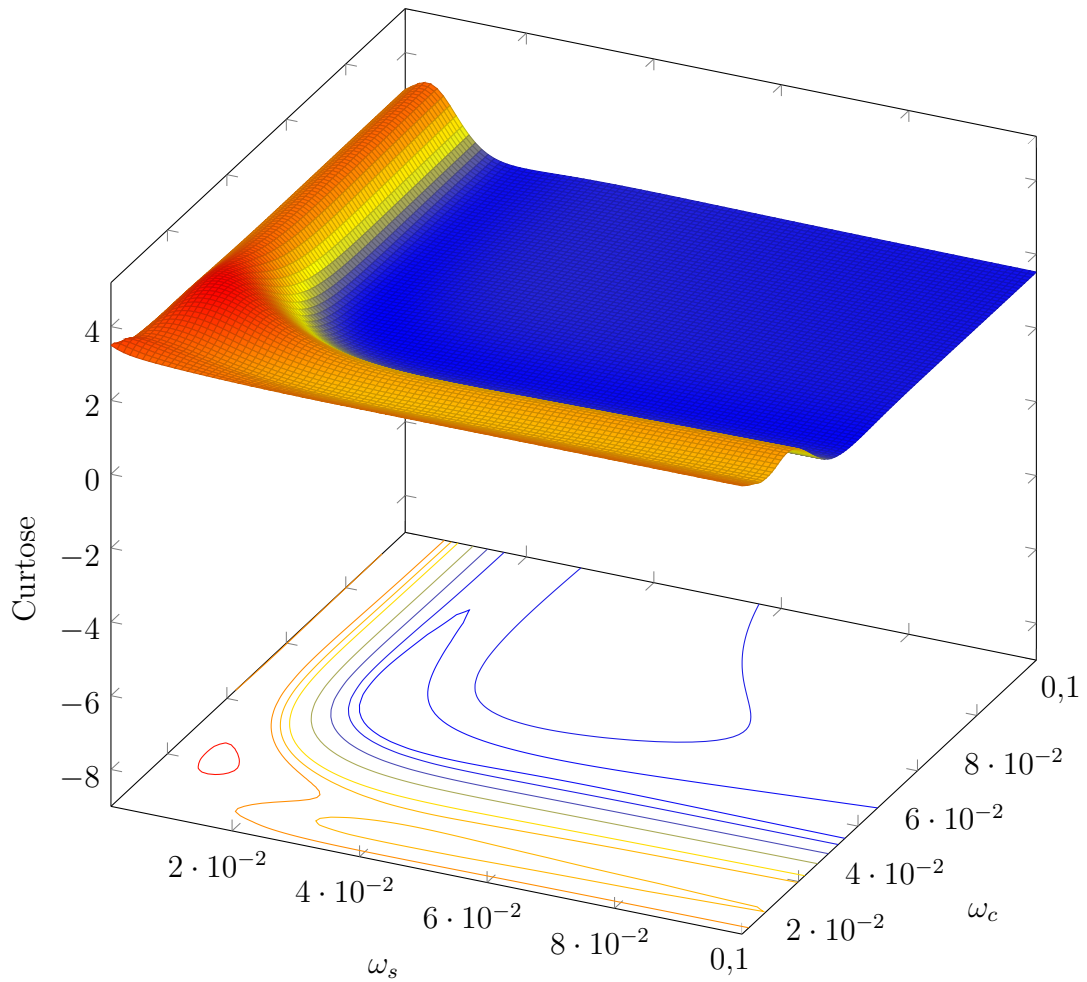


Figura A.11 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Hanford.

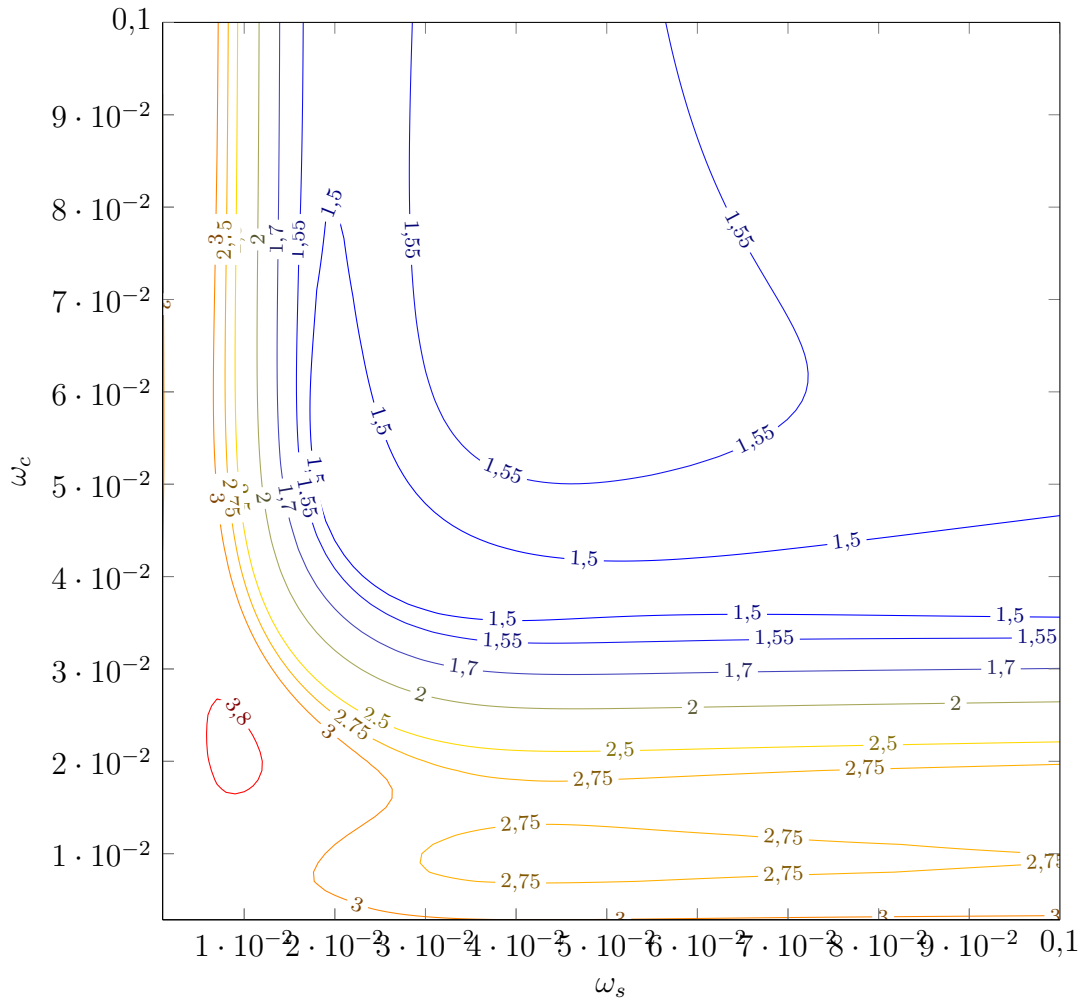


Figura A.12 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Hanford.

Nos gráficos da assimetria, figuras A.9 e A.10, nota-se que em algumas regiões a distribuição é bastante assimétrica, enquanto em outras a assimetria é mais sutil. Em nenhuma região dos gráficos a distribuição é simétrica. O padrão da curtose exposta nas figuras A.11 e A.12 se assemelha ao padrão da assimetria, portanto, do mesmo modo, existem diferentes valores de curtose para ômegas distintos. Valores maiores de curtose indicam que é necessário uma distribuição mais homogênea para simular a distribuição em questão.

A.2 Experimento de Copenhagen (Dinamarca)

O experimento difusivo de Copenhagen foi realizado no período de setembro de 1978 a julho de 1979 em uma área residencial ao norte da cidade de Copenhagen. A descrição detalhada do experimento é fornecida por Gryning e Lyck, 1984. É um experimento de fonte alta executado durante condições convectivas.

O traçador hexafluoreto de enxofre (SF_6) foi liberado sem empuxo a partir de uma torre de televisão com uma altura de 115 m e depois coletado na altura do solo em até três unidades de amostragem, localizadas em arcos perpendiculares ao vento médio e posicionadas de 2 a 6 quilômetros de distância da fonte. O comprimento de rugosidade do terreno era de 0,6 m. O tempo de liberação foi de 1 hora e a taxa de liberação era constante e variou de 2,4 a 4,7 g/s, dependendo do experimento. No total foram realizados 11 experimentos, porém em apenas 9 deles foram obtidas medições suficientes.

Na tabela A.6 são apresentados os dados micrometeorológicos obtidos no experimento, sendo que todos são médias obtidas em medições de uma hora, \bar{u} é a velocidade média do vento (m/s), u_* é a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de Obukhov (m), w_* é a escala de velocidade convectiva (m/s) e z_i é a altura do topo da camada limite (m). Os valores da escala de velocidade convectiva (w_*) não foram fornecidos pelo experimento e, portanto, foram calculadas pela relação $w_* = u_* \left(-\frac{z_i}{kL}\right)^{1/3}$, onde k é a constante de von Kármán.

Tabela A.6 – Dados micrometeorológicos do experimento de Copenhagen [Gryning e Lyck, 1984].

Expt	\bar{u} (115 m) (m/s)	u_* (m/s)	L (m)	w_* (m/s)	z_i (m)
01	3,4	0,37	-46	1,76	1980
02	10,6	0,74	-384	1,72	1920
03	5,0	0,39	-108	1,15	1120
04	4,6	0,39	-173	0,69	390
05	6,7	0,46	-577	0,70	820
06	13,2	1,07	-569	1,91	1300
07	7,6	0,65	-136	2,11	1850
08	9,4	0,7	-72	2,13	810
09	10,5	0,77	-382	1,84	2090

A.2.1 Resultados

O experimento de Copenhagen é convectivo e tem fonte alta, porém se compararmos a altura da fonte com as alturas medidas da camada limite, pode ser considerado experimento de fonte baixa. Primeiramente, são apresentados, na figura A.13, os gráficos de espalhamento para o caso de reflexão completa, ou seja, $\omega_c = \omega_s = 1,0$ e, posteriormente, seus índices estatísticos são expostos na tabela A.7.

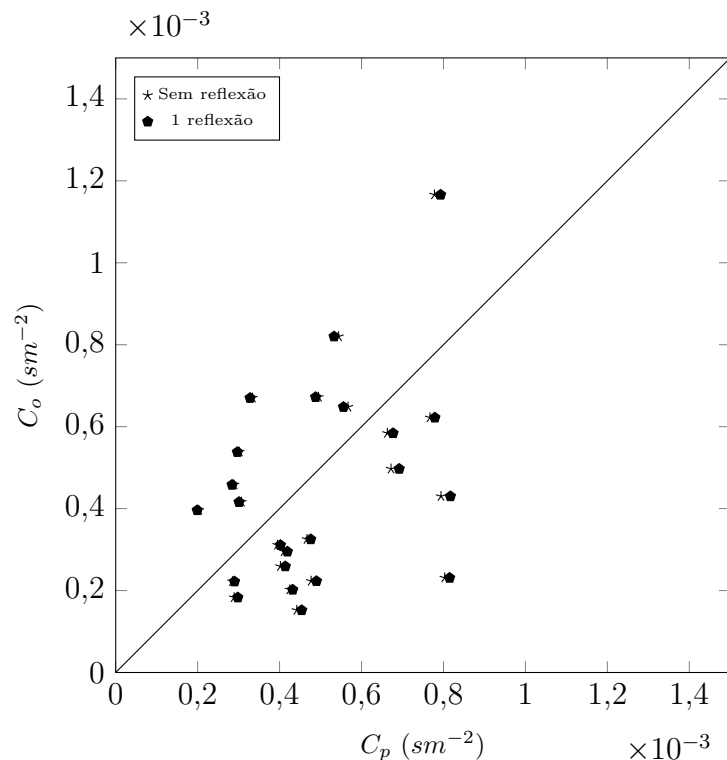


Figura A.13 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 1 reflexão completa, $\omega_c = 1,0$ e $\omega_s = 1,0$, para o experimento de Copenhagen.

Tabela A.7 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 1,0$ e $\omega_s = 1,0$ para o experimento de Copenhagen.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	0,262	0,380	0,28	1,045
Com reflexão ($n = 1$)	0,275	0,356	0,251	1,069

A seguir são apresentados os resultados para as reflexões parciais. Os valores utilizados para ω_c e ω_s estão indicados nas legendas das figuras A.14, A.15 e A.16, assim como das tabelas A.8, A.9 e A.10. Da mesma forma como para o experimento de Hanford, os valores de ω_c e ω_s foram sugeridos pelos resultados da otimização.

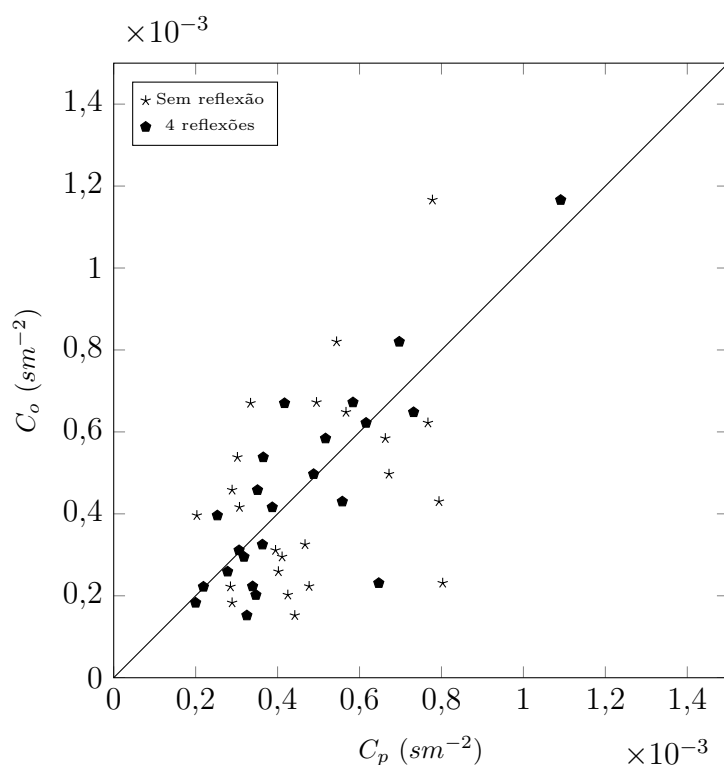


Figura A.14 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 4 reflexões parciais, $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$, para o experimento de Copenhagen.

Tabela A.8 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,2$ para o experimento de Copenhagen.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	0,262	0,380	0,28	1,045
Com reflexão ($n = 1$)	0,165	0,645	0,431	0,768
Com reflexão ($n = 2$)	0,091	0,787	0,174	0,441
Com reflexão ($n = 3$)	0,091	0,788	0,166	0,433
Com reflexão ($n = 4$)	0,091	0,788	0,166	0,433

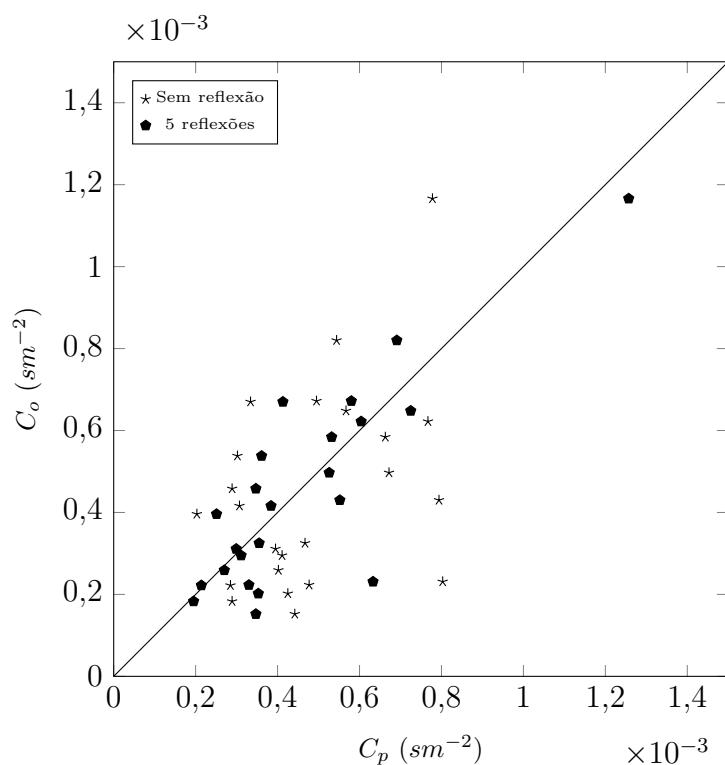


Figura A.15 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 5 reflexões parciais, $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,15$, para o experimento de Copenhagen.

Tabela A.9 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,2$ e $\omega_s = 0,15$ para o experimento de Copenhagen.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	0,262	0,380	0,28	1,045
Com reflexão ($n = 1$)	0,169	0,648	0,443	0,760
Com reflexão ($n = 2$)	0,09	0,794	0,089	0,351
Com reflexão ($n = 3$)	0,09	0,795	0,055	0,316
Com reflexão ($n = 4$)	0,09	0,795	0,054	0,315
Com reflexão ($n = 5$)	0,09	0,795	0,054	0,315

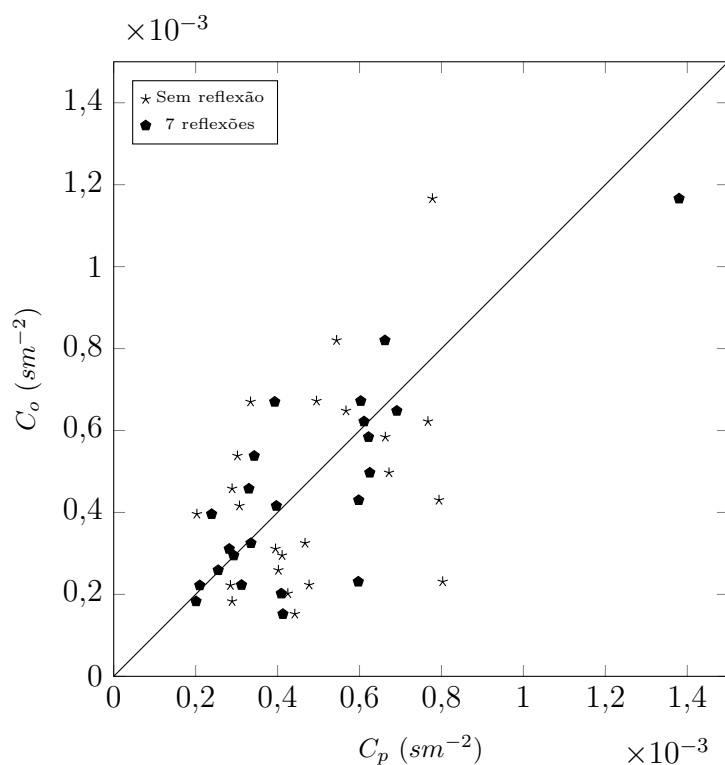


Figura A.16 – Gráfico de espalhamento das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) sem reflexão e com 4 reflexões parciais, $\omega_c = 0,3$ e $\omega_s = 0,1$, para o experimento de Copenhagen.

Tabela A.10 – Avaliação estatística das concentrações observadas (C_o) e previstas pelo modelo (C_p) com os parâmetros $\omega_c = 0,3$ e $\omega_s = 0,1$ para o experimento de Copenhagen.

Modelo	$NMSE$	COR	FS	κ
Sem reflexão	0,262	0,380	0,28	1,045
Com reflexão ($n = 1$)	0,189	0,651	0,491	0,755
Com reflexão ($n = 2$)	0,102	0,767	0,115	0,419
Com reflexão ($n = 3$)	0,107	0,775	-0,014	0,284
Com reflexão ($n = 4$)	0,11	0,775	-0,04	0,256
Com reflexão ($n = 5$)	0,11	0,775	-0,043	0,254
Com reflexão ($n = 6$)	0,11	0,775	-0,043	0,253
Com reflexão ($n = 7$)	0,11	0,775	-0,043	0,253

No caso do experimento de Copenhagen, o mesmo comportamento relatado no experimento de Hanford pode ser observado. Após as reflexões parciais as concentrações

previstas pelo modelo se aproximam das concentrações medidas no experimento, assim como os índices estatísticos melhoram de maneira convergente. Novamente, é possível verificar que, quando é utilizada a reflexão completa, a contribuição é insuficiente para gerar bons resultados.

A seguir serão apresentados os resultados da otimização para o experimento de Copenhagen, os mesmos índices apresentados na subseção anterior serão aqui expostos. Nas figuras A.17 e A.18 tem-se o gráfico e as isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), respectivamente; nas figuras A.19 e A.20 o gráfico e as isolinhas do índice de correlação (COR); nas figuras A.21 e A.22 o gráfico e as isolinhas da assimetria; e nas figuras A.23 e A.24 o gráfico e as isolinhas da curtose.

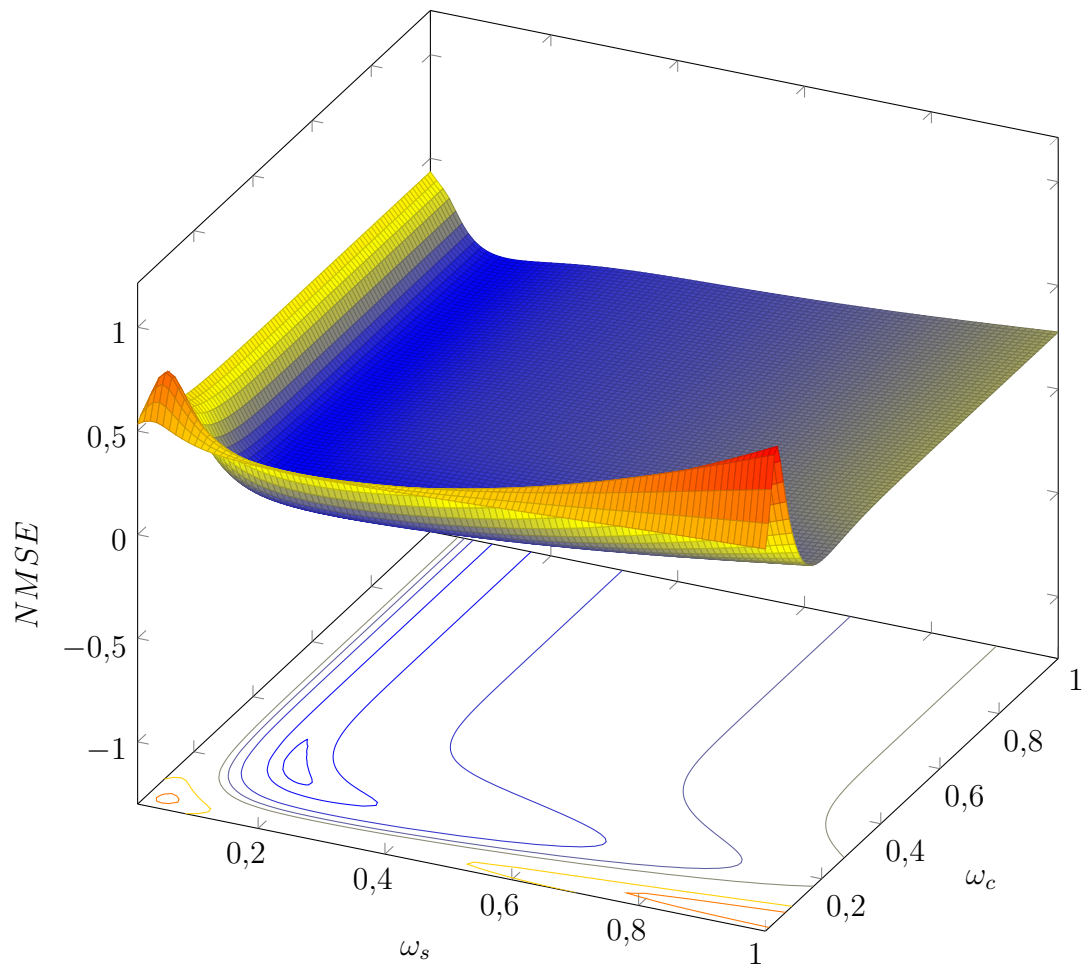


Figura A.17 – Gráfico e isolinhas do erro quadrático médio normalizado ($NMSE$) para o experimento de Copenhagen.

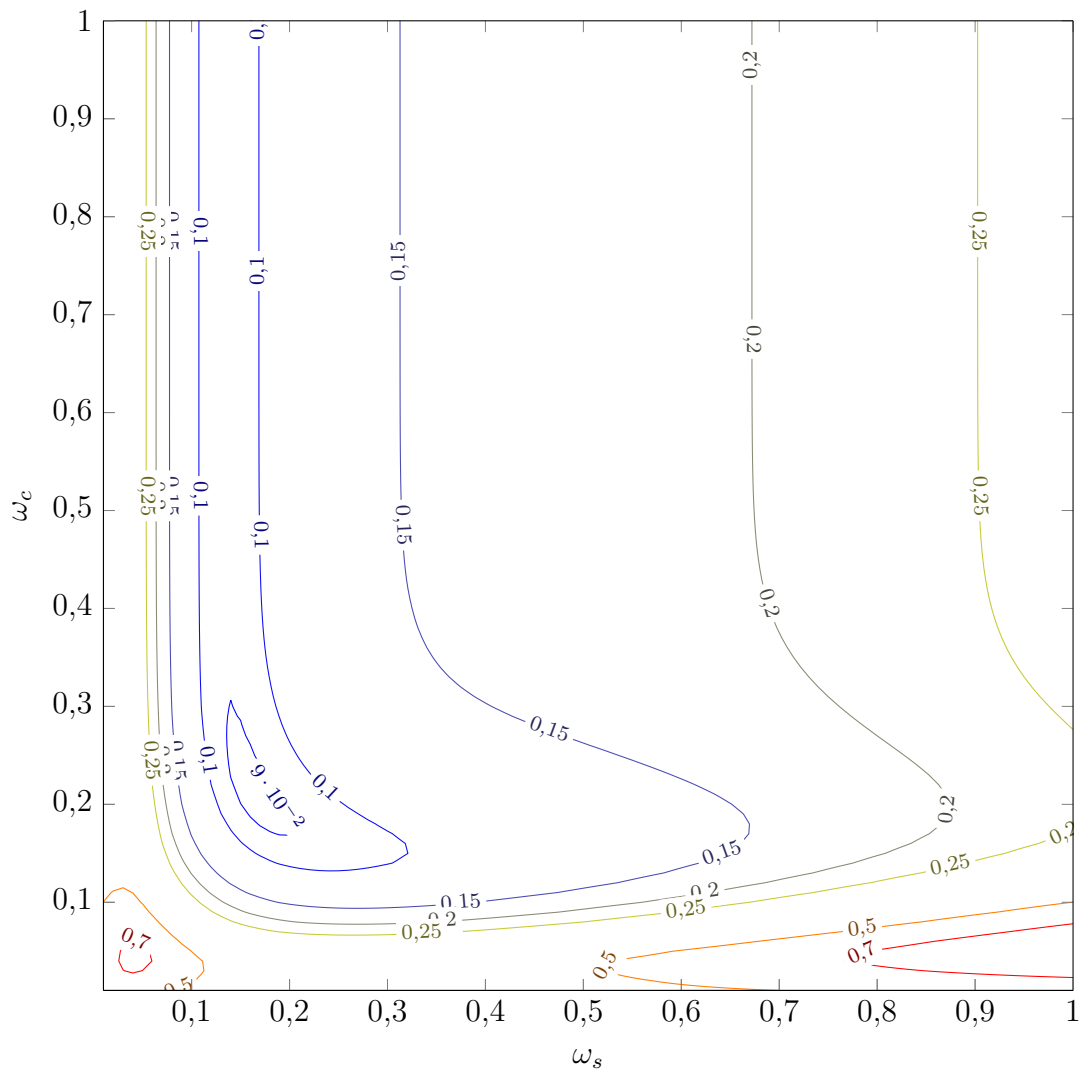


Figura A.18 – Isolinhas do erro quadrático médio normalizado (*NMSE*) para o experimento de Copenhagen.

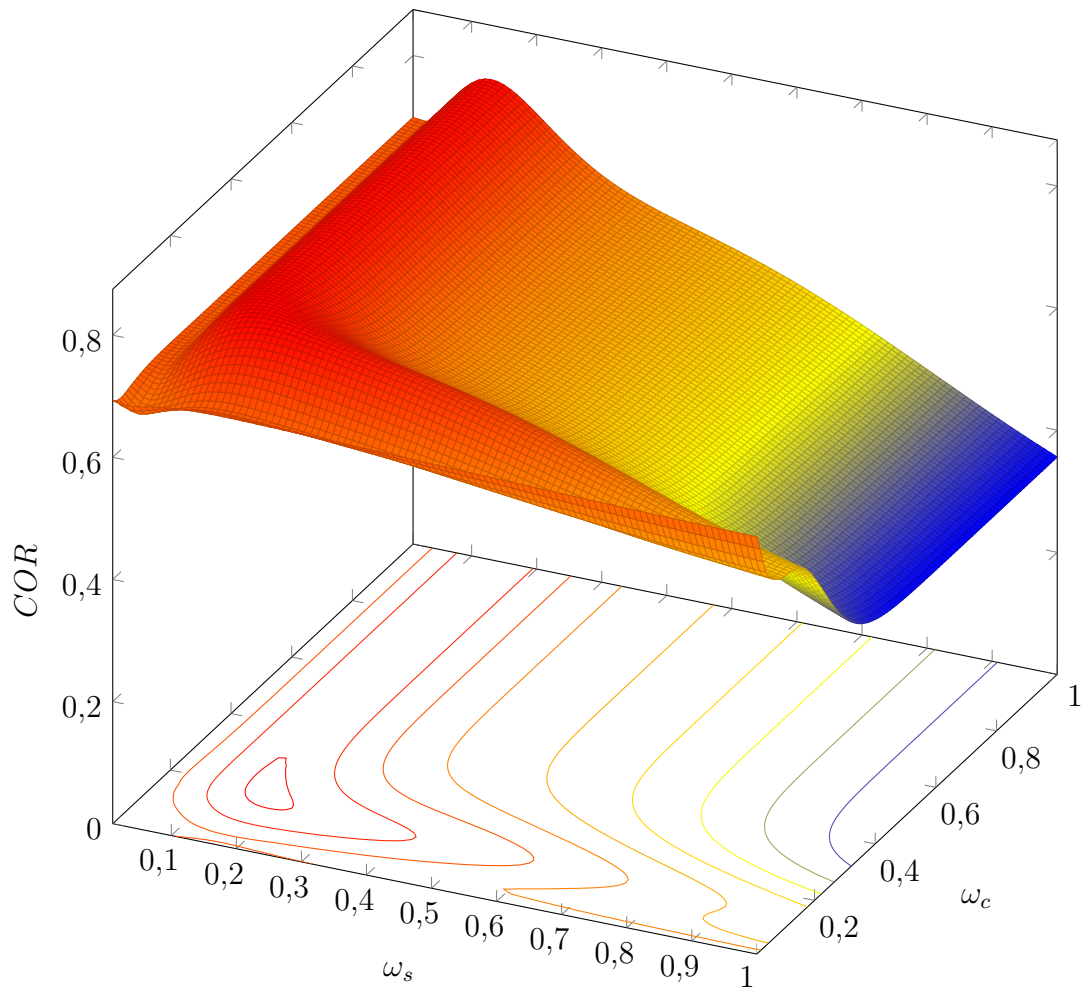


Figura A.19 – Gráfico e isolinhas do índice de correlação (COR) para o experimento de Copenhagen.

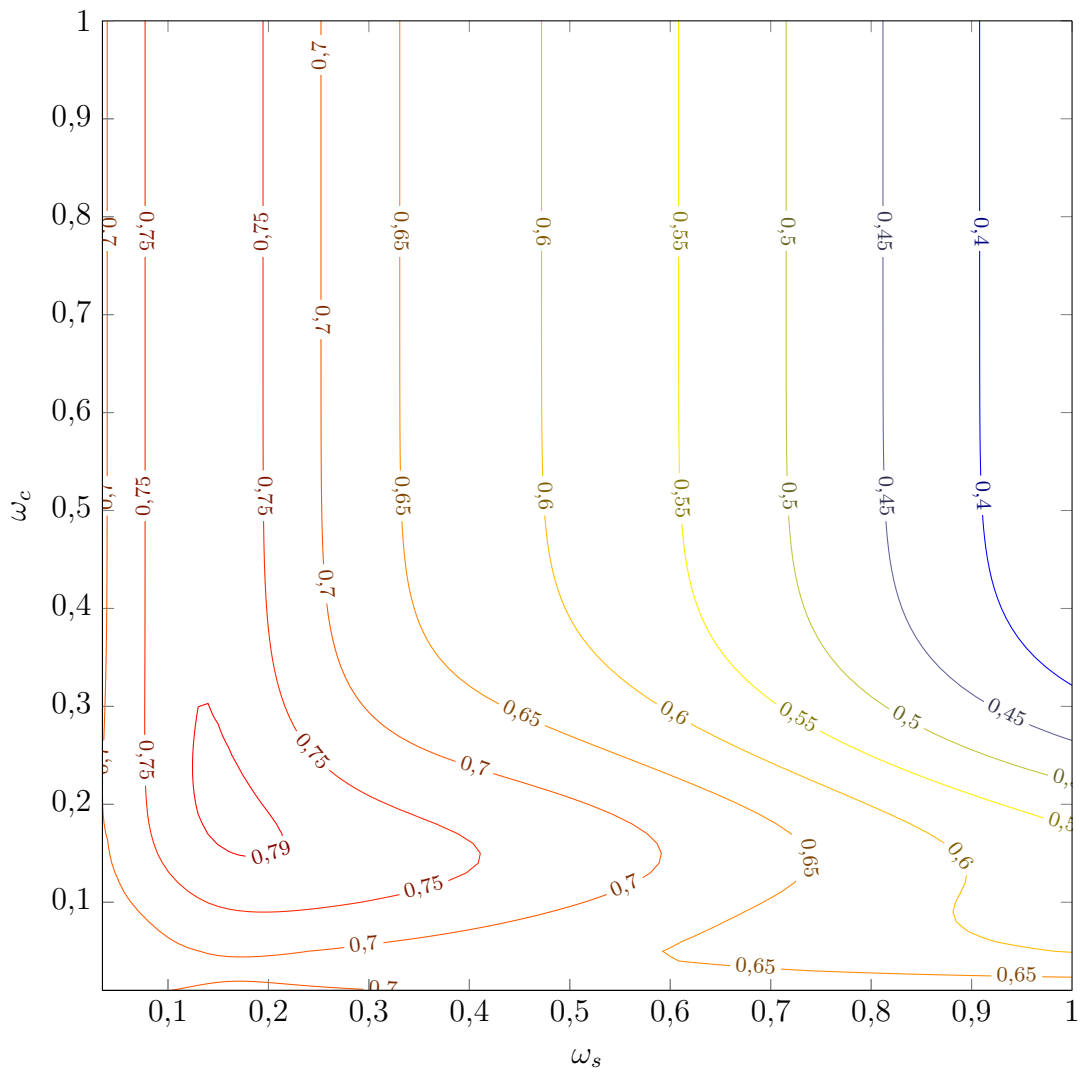


Figura A.20 – Isolinhas do índice de correlação (COR) para o experimento de Copenhagen.

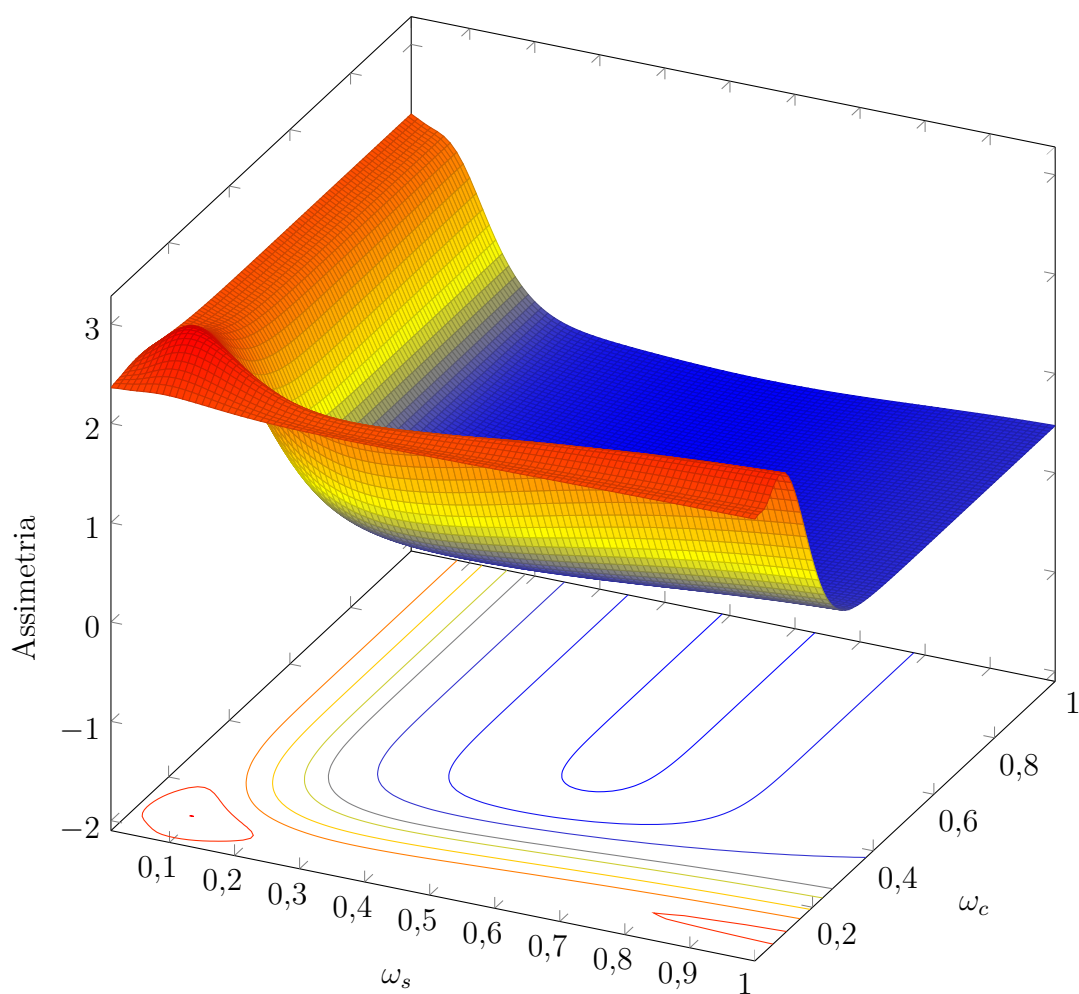


Figura A.21 – Gráfico e isolinhas da assimetria (3° momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.

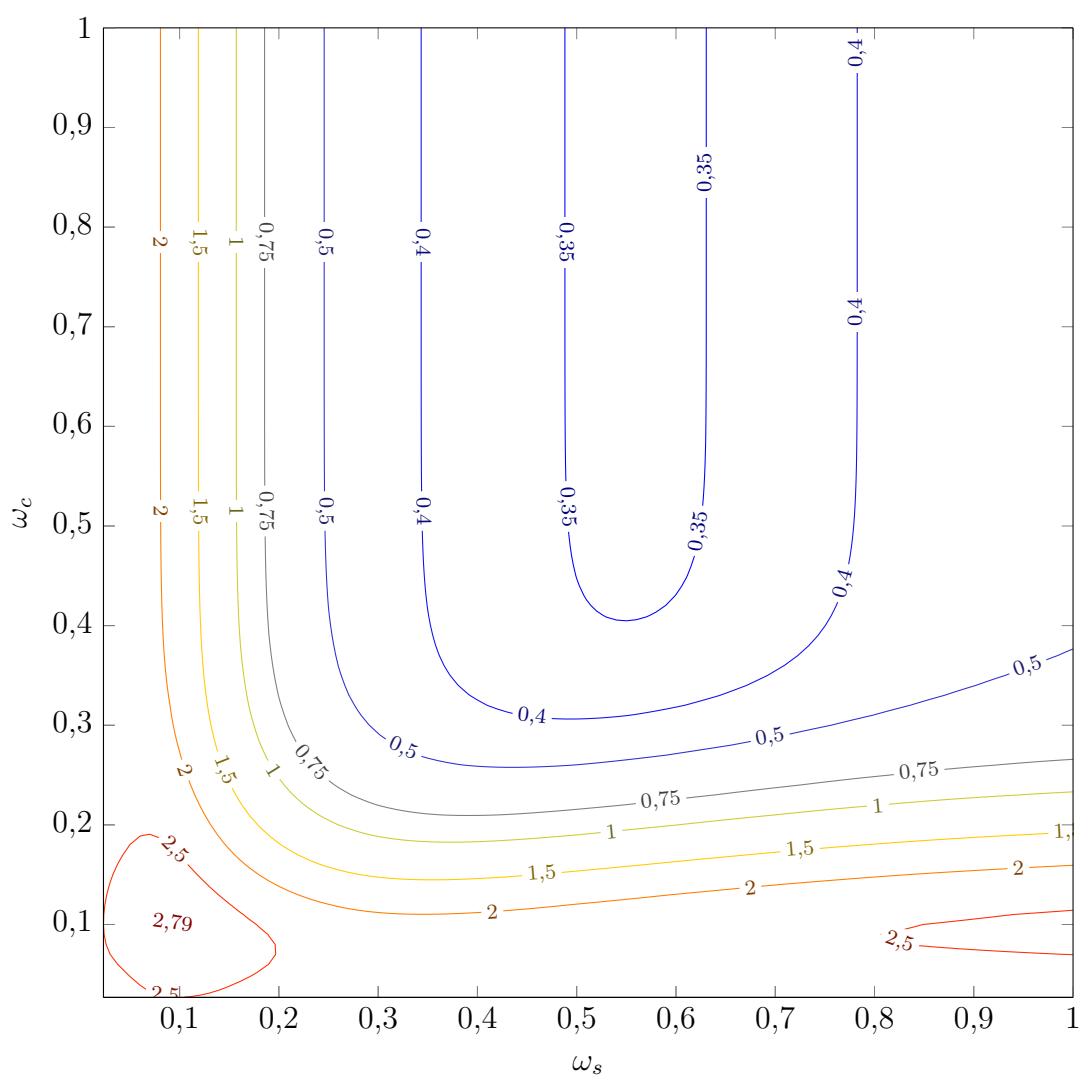


Figura A.22 – Isolinhas da assimetria (3^o momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.

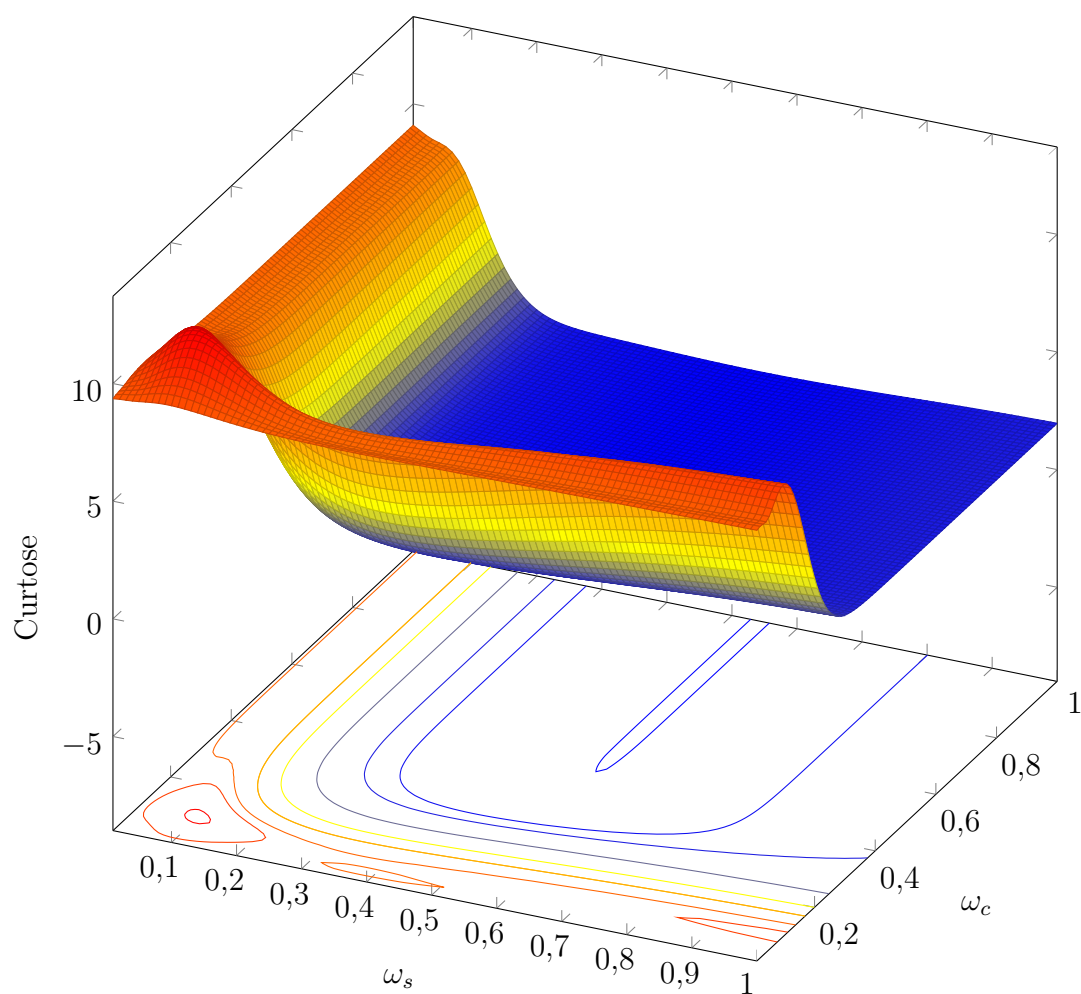


Figura A.23 – Gráfico e isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.

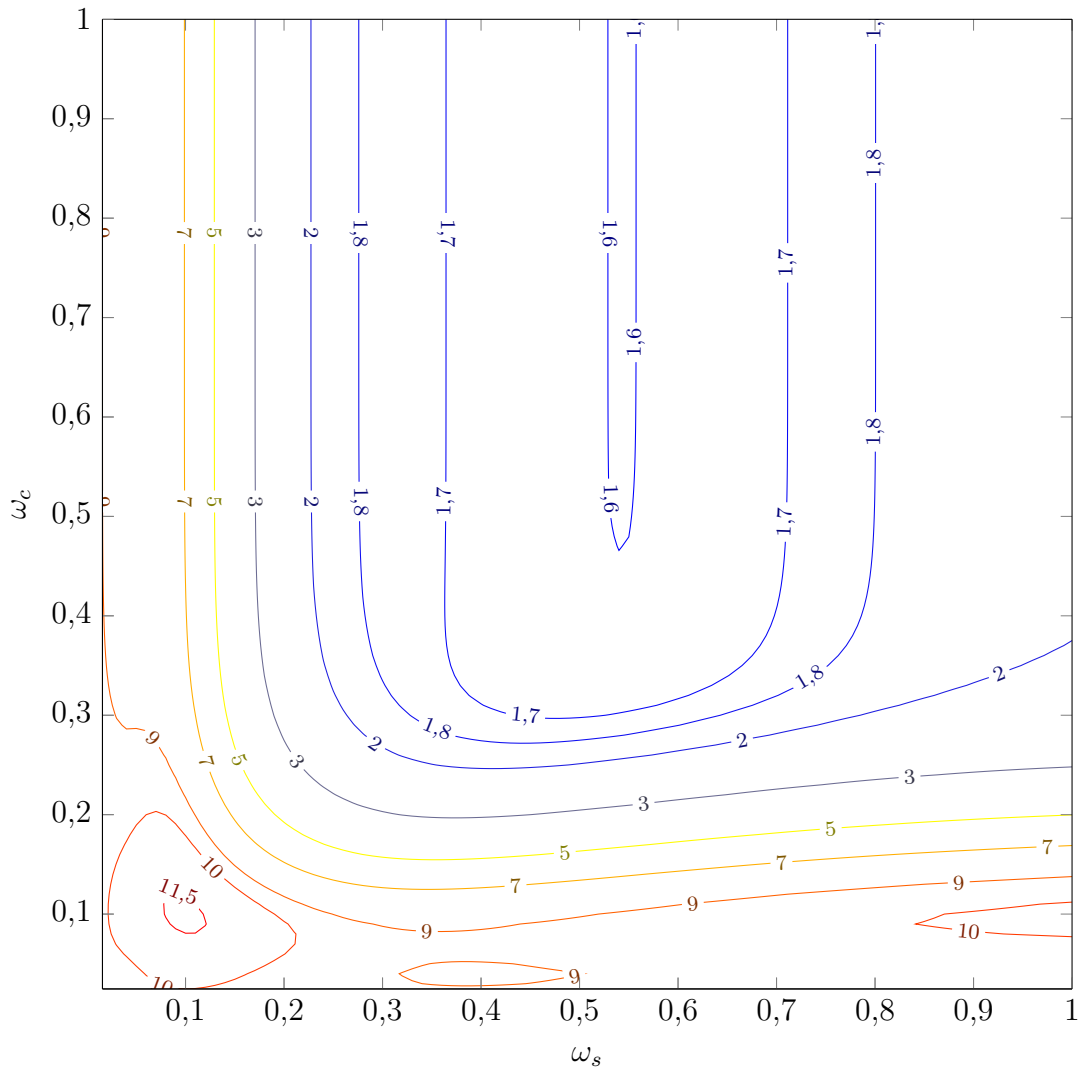


Figura A.24 – Isolinhas da curtose (4° momento estatístico) para o experimento de Copenhagen.

Pode-se observar nas figuras de correlação e erro quadrático médio normalizado de ambos os experimentos, que existe apenas uma região onde encontram-se os valores ótimos para ω_c e ω_s , o que indica que a inclusão das reflexões parciais tem relevância para melhorar a convergência da solução em comparação com os dados experimentais. Além disso, pela estrutura assimétrica dos gráficos, é possível afirmar que as reflexões na camada limite planetária são mais relevantes que as reflexões no solo. Quando realizada a otimização, ω_c e ω_s não são distribuições simétricas. Tipicamente, quando calculada a assimetria de uma gaussiana, todos os graus de liberdade contribuem da mesma forma, enquanto as distribuições obtidas mostram que existem efeitos que são responsáveis pela

assimetria, maior na camada limite do que no solo.