

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

**ZIMORA - UM MODELO NUMÉRICO 3D DE  
DISPERSÃO ATMOSFÉRICA**

**TESE DE DOUTORADO**

**HANS ROGÉRIO ZIMERMANN**

**Santa Maria, RS, Brasil**

**2009**

# **ZIMORA - UM MODELO NUMÉRICO 3D DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA**

**por**

**Hans Rogério Zimmermann**

Tese de Doutorado apresentado para o Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Áreas Clássicas da Fenomenologia e Suas Aplicações, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de

**Doutor em Física**

**Orientador: Prof. Dr. Osvaldo Luiz Leal de Moraes**

**Santa Maria, RS, Brasil**

**2009**

**Universidade Federal de Santa Maria**  
**Centro de Ciências Naturais e Exatas**  
**Programa de Pós-Graduação em Física**

A Comissão Examinadora, abaixo assinada,  
aprova a Tese de Doutorado

**ZIMORA - UM MODELO NUMÉRICO 3D DE DISPERSÃO  
ATMOSFÉRICA**

elaborada por  
**Hans Rogério Zimmermann**

como requisito parcial para obtenção do grau de  
**Doutor em Física**

**COMISSÃO EXAMINADORA:**

**Prof. Dr. Osvaldo Luiz Leal de Moraes**  
(Presidente/Orientador)

**Profa. Dra. Márcia Cristina Bernardes Barbosa(UFRGS)**

**Prof. Dr. Éverson Dal Piva(UFSM)**

**Prof. Dr. Otávio Costa Acevedo(UFSM)**

**Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia(UFSM)**

Santa Maria, Agosto de 2009.

# *Agradecimentos*

Dedico meus sinceros agradecimentos àqueles que muito me ajudaram para concluir este trabalho. Com certeza essas pessoas tornaram a realização deste trabalho uma tarefa prazerosa. Em especial:

- à Deus por tudo;
- ao Prof. Dr. Osvaldo Luiz Leal de Moraes, por toda dedicação, paciência e estímulo em sua orientação;
- a todos os professores do Departamento de Física da UFSM;
- Aos professores Dra. Márcia Cristina Bernardes Barbosa, Dr. Éverson Dal Piva, Dr. Otávio Costa Acevedo e Dr. Gervásio Annes Degrazia pelas valiosas sugestões;
- à minha família, pelo incentivo e segurança que me passaram durante todo esse período;
- aos colegas do Laboratório de Micrometeorologia: Ms. Cláudio Alberto Teichrieb, Ms. Janaína Viário Carneiro, Dr. Roberto de Oliveira Magnago, Ms. Virnei Silva Moraes, Ms. Andréa Ucker Timm, Dr. Vagner Anabor, Dra. Maria Cristina Andres Arbage, Dra. Cintya de Azambuja Martins, Dr. Rodrigo da Silva, Ms. Guilherme Sausen Welter, Ms. Franciano Puhales e Ms. Felipe Denardim pelo agradável convívio ao longo dos últimos anos;
- a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho;
- à minha namorada Luciana B. Zambon;
- ao CNPq pelo auxílio financeiro.

## **RESUMO**

Tese de Doutorado

Programa de Pós-Graduação em Física  
Universidade Federal de Santa Maria

### **ZIMORA - UM MODELO NUMÉRICO 3D DE DISPERSÃO ATMOSFÉRICA**

AUTOR: HANS ROGÉRIO ZIMERMANN

ORIENTADOR: OSVALDO LUIZ LEAL DE MORAES

Data e Local da Defesa: 27 de Agosto de 2009, Santa Maria.

Nesta tese, apresentamos o processo de desenvolvimento e validação de um modelo numérico 3D para a equação de difusão-advecção. Modelos como este têm sido desenvolvidos objetivando a investigação científica para dar suporte ao controle de emissões de poluentes atmosféricos e à tomada de decisões no desenvolvimento de políticas ambientais. Para a elaboração deste modelo utilizamos a implementação de um esquema numérico explícito na discretização das equações envolvidas. Durante este processo, exaustivos testes foram realizados para que a implementação garantisse estabilidade, consistência e convergência. Como forma de minimizar uma das principais deficiências encontradas na maioria dos modelos de dispersão atmosféricos (MDA), qual seja, a imprecisão da entrada de dados meteorológicos para a inicialização destes modelos, utilizamos um campo de vento realístico gerado por um modelo numérico de circulação de mesoescala. No entanto, como este modelo de mesoescala fornece informações com uma escala maior do que a necessária para a descrição da trajetória de uma pluma, foi preciso desenvolver um método de interpolação apropriado para intermediar estas distâncias. Nosso modelo contempla, ainda, a hipótese da turbulência atmosférica não ser isotrópica, onde os coeficientes de difusão turbulenta são variáveis no tempo e espaço e, ainda, diferentes nas direções lateral e vertical. Em nosso modelo, estes coeficientes foram estimados utilizando a parametrização de camada limite proposta por Moraes (2000). Para a validação do modelo, utilizamos dados experimentais obtidos em um experimento realizado próximo à usina termelétrica Presidente Médici, no município de Candiota/RS. Estes dados compreendem medidas de concentração superficial de  $SO_2$ , velocidade do vento em superfície medidos em torres meteorológicas, bem como dados de turbulência medido em torre micrometeorológica. Os resultados da validação mostraram que o modelo funciona bem, ao menos para o tipo de fonte e topografia onde está localizada, ou seja, emissão contínua e topografia homogênea.

Palavras-chaves: Modelo Numérico 3D, Poluição Atmosférica, Dispersão Atmosférica.

## **ABSTRACT**

Tese de Doutorado

Programa de Pós-Graduação em Física  
Universidade Federal de Santa Maria

### **ZIMORA - A 3D NUMERICAL MODEL FOR ATMOSPHERIC DISPERSION**

AUTOR: HANS ROGÉRIO ZIMERMANN

ORIENTADOR: OSVALDO LUIZ LEAL DE MORAES

Data e Local da Defesa: 27 de Agosto de 2009, Santa Maria.

In this thesis, we presents a development and validation of a 3D numerical model for the advection-diffusion equation. Models of this kind has been developed for scientific investigations and to support atmospheric emissions control and environmental policy decisions. To develop this model, we used the computational implementation of an explicit numerical scheme for the discretization of the envolved equations. During this procedures, exhaustive tests were performed to ensure that the used implementations agrees to the stability, consistence and convergence criterias. As a way for minimizing one of the main deficiencies found in almost the major atmospheric dispersion models, i.e. imprecisions in the meteorological input data for initializing this models, we used a realistic atmospheric flow field generated by mesoscale circulation model. As the mesoscale model gives information at scale larger than the necessary for description of a plume trajectory, a weighted linear average proper interpolation was developed for intermediate these distances. Our model considers the assumption that atmospheric turbulence is not isotropic, where diffusion coefficients are variables in time and space and are different for lateral and vertical directions. In our model we estimate this coefficients by the atmospheric boudary layer parameterizations proposed by Moraes (2000). For validation of the model, we used experimental datasets from field experiment carried near a thermoelectric power plant presidente Médici, in the city of Candiota/RS. These datasets contains surface  $SO_2$  concentrations, surface wind velocity measured in meteorological towers as well as turbulence data measured in micrometeorological towers. The results of the validation indicates that the model works well, at least for the source and the terrain were it is located. i.e. continuous emission and homogeneous topography.

Key-words: 3D Numerical Model, Atmospheric Pollution, Atmospheric Dispersion.

# Conteúdo

## Lista de Siglas

## Lista de Figuras

## Lista de Tabelas

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 15
<b>2</b>	<b>Aporte Teórico</b>	p. 21
2.1	Base Estatística da Turbulência . . . . .	p. 21
2.1.1	Valor Esperado, Flutuações e Função Densidade de Probabilidade	p. 21
2.1.2	Correlações e Escalas Integrais . . . . .	p. 23
2.1.3	Média de Reynolds . . . . .	p. 26
2.1.4	Transporte por gradiente turbulento . . . . .	p. 28
2.2	Equações Diferenciais Parciais . . . . .	p. 30
2.2.1	Aspectos Matemáticos . . . . .	p. 33
2.2.2	Análise das Famílias de <i>curvas características</i> . . . . .	p. 34
2.3	Metodologia Numérica . . . . .	p. 39
2.3.1	Aproximações por Diferenças Finitas . . . . .	p. 40
2.3.2	Método de Diferenças Finitas . . . . .	p. 41
2.3.3	Discretizações . . . . .	p. 44
2.3.4	Limitações do processo numérico . . . . .	p. 51
2.3.5	Esquema de Lax-Wendroff . . . . .	p. 55
2.4	Histórico da Análise Objetiva . . . . .	p. 56

<b>3 O Modelo ZIMORA</b>	p. 60
3.1 Dedução da Equação Diferencial de Difusão-Advecção . . . . .	p. 60
3.2 Discretização da Equação de Difusão-Advecção . . . . .	p. 65
3.2.1 Condições iniciais e de contorno e definição da fonte . . . . .	p. 68
3.3 Implementação Computacional . . . . .	p. 71
3.4 Parametrização da Camada Limite Planetária . . . . .	p. 80
3.5 Esquema de interpolação para o campo de vento . . . . .	p. 80
3.6 Fonte dos dados e Procedimento de validação . . . . .	p. 92
<b>4 Resultados e discussões</b>	p. 96
4.1 Análise da Direção do Transporte do Poluente . . . . .	p. 99
4.2 Validação do Modelo . . . . .	p. 104
4.3 Discussão . . . . .	p. 111
<b>5 Conclusões</b>	p. 115
<b>Bibliografia</b>	p. 118
<b>Apêndice A – Simulações do Zimora</b>	p. 124
<b>Apêndice B – Simulações do Zimora - Ampliação sobre estações</b>	p. 156
<b>Apêndice C – BRAMS</b>	p. 187
C.0.1 Parametrizações . . . . .	p. 191



## *Lista de Siglas*

3L – Três Lagoas (Estação de coleta)

ADF – Aproximacao por Diferenca finita

ATMET – Atmospheric, Meteorological and Environment Technologies

BRAMS – Brazilian Regional Atmospheric Modelling System

CAN – Candiota (Estação de coleta)

CFL – Courant-Friedrichs-Lewy

CGTEE – Companhia de Geração Térmica de Energia Elétrica

CLA – camada Limite Atmosferica

CLA – Camada Limite Atmosférica

CLP – Camada Limite Planetária

COPELM – Companhia de Pesquisa e Lavra Mineral

CPTEC – Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos

CRM – Companhia Riograndense de Mineração

CSU – Colorado State University

DJ – Dia Juliano

ECT – Energia cinética Turbulenta

EDF – Equacao de Diferenca Finita

EDP – Equacao Diferencial Parcial

ELT – Erro Local de Truncamento

FA2 – Factor Of 2 (Fator de 2)

FB – Fractional Bias (Desvio Fracional)

FDP – Funcao Densidade de probabilidade

FINEP – Financiadora de Estudos e Projetos

FS – Fractiona Standard Bias (Desvio fracional padrão)

GruMA – Grupo de Modelagem Atmosférica

IAG – Instituto Astronômico e Geofísico

IME – Instituto de Matemática e Estatística

INPE – Instituto nacional de Pesquisas Espaciais

JNWP – Joint Numerical Weather Prediction

LEAF – Land Ecosystem-Atmosphere Feedback Model

McIDAS – Man Computer Interactive Data Access System

MDA – Modelo de Dispersao Atmosferica

MP – Material Particulado

NASA – National Aeronautics and Space Administration

NG – Número de pontos de Grade

NMSE – Normalized Mean Squred Error (Erro quadrático médio Normalizado)

NO<sub>x</sub> – Oxido Nitroso

NS – Número de pontos Observados

PPM – Pre– Processador meteorologico

R – Correlation Coefficient (Coeficiente de Correlação)

RAMS – Regional Atmospheric Modelling System

RANS – Reynolds Averaged Navies–Stokes

SO<sub>2</sub> – Dióxido de Enxofre

SPC – Storm Prediction Center

SSEC – Space Science and Engineering Center

TOPMODEL – Topography-based hydrological model

UFSM – Universidade Federal de Santa Maria

USP – Universidade de São Paulo

UTPM – Usina Termoelétrica Presidente Médici

VOC – Compostos Orgânicos Voláteis

ZIMORA – Nome do Modelo Numérico (aglutinação dos nomes dos autores ZIMermann e MORAEs)

# *Lista de Figuras*

2.1	Função de autocorrelação . . . . .	p. 25
2.2	Região R com fronteira $\delta R$ . . . . .	p. 31
2.3	Propagação de perturbação em EDPs elípticas. . . . .	p. 31
2.4	Curva L no plano xy. . . . .	p. 34
2.5	Curva <i>característica</i> C no plano xy. . . . .	p. 35
2.6	Curvas <i>características</i> . . . . .	p. 36
2.7	Propagação de um pulso ao longo de duas curvas <i>características</i> . . . . .	p. 38
2.8	Zona de influência em EDPs <i>hiperbólicas</i> . . . . .	p. 39
2.9	Malha regular unidimensional . . . . .	p. 41
2.10	Aproximação por diferenças finitas . . . . .	p. 42
2.11	Domínio de dependência e influência em EDPs <i>parabólicas</i> . . . . .	p. 45
2.12	Domínio físico de dependência em EDPs <i>parabólicas</i> . . . . .	p. 45
2.13	Domínio de dependência e influência em EDPs <i>hiperbólicas</i> . . . . .	p. 46
2.14	Domínio físico de dependência em EDPs <i>hiperbólicas</i> . . . . .	p. 46
2.15	Domínio numérico de dependência em <i>métodos explícitos</i> . . . . .	p. 47
2.16	Domínio numérico de dependência em <i>métodos implícitos</i> . . . . .	p. 47
2.17	Estêncil da discretização de EDPs <i>hiperbólicas</i> . . . . .	p. 49
3.1	Teste de Difusão unidimensional . . . . .	p. 72
3.2	Teste de transporte advectivo unidimensional. . . . .	p. 73
3.3	Teste de transporte unidimensional utilizando método de Lax-Wendroff e condições de contorno. . . . .	p. 74
3.4	Testes de simulação de transporte 2D . . . . .	p. 75

3.5	Testes de simulação de difusão 2D . . . . .	p. 76
3.6	Teste de comportamento da massa na difusão pura 2D . . . . .	p. 77
3.7	Teste de comportamento da massa com transporte 2D . . . . .	p. 77
3.8	Testes de simulação de transporte 3D . . . . .	p. 79
3.9	Fluxograma do módulo de redução de escala do <b>ZIMORA</b> . . . . .	p. 83
3.10	Exemplo de uma grade bidimensional com quatro nós de valores conhecidos (preto) e nós que precisam ser apropriadamente interpolados para se obter seus valores (cinza) em uma resolução maior . . . . .	p. 84
3.11	Simulação de 1h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações . . . . .	p. 87
3.12	Simulação de 1h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas. . . . .	p. 88
3.13	Simulação de 2h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações. . . . .	p. 88
3.14	Simulação de 2h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas. . . . .	p. 89
3.15	Simulação de 3h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações. . . . .	p. 89
3.16	Simulação de 3h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas. . . . .	p. 90
3.17	Simulação de 6h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações. . . . .	p. 90
3.18	Simulação de 6h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas. . . . .	p. 91
3.19	Simulação de 7h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações. . . . .	p. 91
3.20	Simulação de 7h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas. . . . .	p. 92
4.1	Esquema de validação do <b>ZIMORA</b> . . . . .	p. 96
4.2	Foto da usina termelétrica Presidente Médici . . . . .	p. 97
4.3	Imagem Google da região das estações . . . . .	p. 98
4.4	Direção do vento dia DJ267 (24/09/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 100
4.5	Direção do vento dia DJ268 (25/09/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 100

4.6	Direção do vento dia DJ269 (26/09/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 101
4.7	Direção do vento dia DJ270 (27/09/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 101
4.8	Direção do vento dia DJ271 (28/09/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 102
4.9	Direção do vento dia DJ272 (29/09/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 102
4.10	Direção do vento dia DJ273 (30/09/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 103
4.11	Direção do vento dia DJ274 (01/10/2007) medido na Estação 3L. . . . .	p. 103
4.12	Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ269 (26/09/2007) na Estação 3L. . . . .	p. 105
4.13	Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ270 (27/09/2007) na Estação 3L. . . . .	p. 106
4.14	Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ272 (29/09/2007) na Estação Candiota. . . . .	p. 107
4.15	Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ273 (30/09/2007) na Estação 3L. . . . .	p. 108
4.16	Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ274 (01/10/2007) na Estação 3L. . . . .	p. 109
4.17	Diagrama de espalhamento Zimora versus Observação . . . . .	p. 110
4.18	Abstração da Camada Limite Noturna . . . . .	p. 114
A.1	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 24/09/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 124
A.2	Simulação da evolução horária de concentração de $SO_2$ no dia 24/09/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 125
A.3	Simulação da evolução horária de concentração de $SO_2$ no dia 24/09/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 126
A.4	Simulação da evolução horária de concentração de $SO_2$ no dia 24/09/2007 (18h-24h) . . . . .	p. 127
A.5	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 128

A.6	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 129
A.7	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 130
A.8	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 131
A.9	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 132
A.10	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 133
A.11	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 134
A.12	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (18h-24h) . . . . .	p. 135
A.13	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 136
A.14	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 137
A.15	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 138
A.16	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (18h-24h) . . . . .	p. 139
A.17	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 140
A.18	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 141
A.19	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 142
A.20	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (18h-24h) . . . . .	p. 143

A.21 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 144
A.22 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 145
A.23 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 146
A.24 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (18h-24h) . . . . .	p. 147
A.25 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 30/09/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 148
A.26 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 30/09/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 149
A.27 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 30/09/2007 (18h-24h) . . . . .	p. 150
A.28 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (00h-06h) . . . . .	p. 151
A.29 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (06h-12h) . . . . .	p. 152
A.30 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (12h-18h) . . . . .	p. 153
A.31 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (18h-24h) . . . . .	p. 154
B.1 Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 24/09/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 156
B.2 Simulação da evolução horária de concentração de $SO_2$ no dia 24/09/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 157
B.3 Simulação da evolução horária de concentração de $SO_2$ no dia 24/09/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 158
B.4 Simulação da evolução horária de concentração de $SO_2$ no dia 24/09/2007 (18h-24h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 159



B.5	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 160
B.6	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 161
B.7	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 162
B.8	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 25/09/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 163
B.9	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 164
B.10	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 165
B.11	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 166
B.12	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 26/09/2007 (18h-24h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 167
B.13	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 168
B.14	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 169
B.15	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 170
B.16	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 27/09/2007 (18h-24h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 171
B.17	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 172
B.18	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 173
B.19	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 174

B.20	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 28/09/2007 (18h-24h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 175
B.21	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 176
B.22	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 177
B.23	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 178
B.24	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 29/09/2007 (18h-24h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 179
B.25	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 30/09/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 180
B.26	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 30/09/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 181
B.27	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 30/09/2007 (18h-24h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 182
B.28	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (00h-06h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 183
B.29	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (06h-12h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 184
B.30	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (12h-18h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 185
B.31	Simulação da evolução horária de concentração $SO_2$ no dia 01/10/2007 (18h-24h) - Ampliação sobre as estações . . . . .	p. 186

## *Lista de Tabelas*

3.1	Valores para a primeira camada de pesos $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_A}$ . . . . .	p. 85
3.2	Valores para a segunda camada de pesos $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_B}$ . . . . .	p. 85
3.3	Valores para a terceira camada de pesos $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_C}$ . . . . .	p. 85
3.4	Valores para a quarta camada de pesos $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_D}$ . . . . .	p. 86
3.5	Valores finais da grade do MDA com o campo de velocidades do vento com alta resolução interpolado pelo esquema de multi camadas de medias ponderadas. camada $\tilde{Z}_{5 \times 5}$ . . . . .	p. 86
4.1	Resultados do índices estatísticos. . . . .	p. 111
C.1	Significado dos símbolos usados nas equações gerais do modelo BRAMS	p. 191

# 1 *Introdução*

Apresentamos, nesta tese, o desenvolvimento de um modelo numérico tridimensional para a dispersão atmosférica (**ZIMORA**)[64], a partir da concepção de modelos *eulerianos* e levando em consideração informações realistas das emissões e da dinâmica da atmosfera local. Como uma ferramenta computacional, este tipo de modelo têm sido de grande utilidade prático-científica nos dias atuais.

A motivação para o desenvolvimento de um modelo numérico é dupla. Em primeiro lugar o desenvolvimento leva a formulação de novas técnicas necessárias para o procedimento computacional, ao mesmo tempo que possibilita a incorporação de parametrizações físicas mais realistas. Ou seja, a primeira motivação é essencialmente acadêmica. A segunda motivação é de ordem prática. O ZIMORA é um modelo sobre o qual possuímos um domínio completo, conhecemos suas limitações e podemos implementar melhorias, também, ele se aplica a fontes poluidoras com as quais o Laboratório de Micrometeorologia da UFSM está envolvido a mais de uma década.

O monitoramento e o controle da qualidade do ar, com o aumento da população e o rápido desenvolvimento industrial desde as últimas décadas, tem sido cada dia mais relevante. Os efeitos das emissões de poluentes também têm se mostrado mais alarmantes, já que seus danos à sociedade e ao meio ambiente não estão limitados apenas às áreas onde os poluentes estão sendo emitidos. Em decorrência deste aumento populacional e crescimento industrial, há uma maior demanda de energia provocando, conseqüentemente, maior emissão de poluentes atmosféricos ( $SO_2$ ,  $NO_x$ , Compostos Orgânicos Voláteis - VOCs e aerossóis). A queima de combustíveis fósseis para geração de energia, está entre as principais fontes de emissão destes poluentes atmosféricos.

A dispersão de poluentes ocorre em uma região particular da atmosfera: a Camada Limite Atmosférica - CLA. Esta é a região que é diretamente influenciada pela presença da superfície terrestre, sendo sua extensão vertical variável no tempo e espaço. Durante o período noturno ela pode não ser superior a uma ou duas centenas de metros, já durante o período diurno ela pode se estender até alguns quilômetros. A altura da CLA, assim como varia ao

longo do dia, varia também ao longo do ano. Em um mesmo local ela é diferente no inverno e no verão. Ela também é diferente para diferentes locais, em regiões tropicais, por exemplo, a CLA é distinta daquela observada em regiões temperadas, sobre os oceanos é diferente que sobre o continente, sobre o deserto possui pouca, ou quase nenhuma, semelhança com a observada sobre áreas com vegetação ou urbanas.

Portanto, uma adequada estimativa da extensão da CLA, isto é, a altura da camada onde ocorrem as emissões, mostra-se de fundamental importância no processo de determinação das concentrações de poluentes atmosféricos.

Investigar estas concentrações, ou seja, obter uma descrição do fenômeno de Poluição Atmosférica, requer a descrição precisa de dois outros processos distintos no processo de dispersão: a *advecção* e a *difusão*<sup>1</sup>, ou seja, a dispersão de poluentes na atmosfera pode, de uma forma básica, ser entendido como a soma de dois processos.

O processo advectivo é aquele que é o resultado da velocidade média do vento, ou seja, o vento transporta o poluente de um ponto para outro como um todo, já o processo difusivo pode ser resumido como a forma com que o poluente se abre na atmosfera. De uma maneira simplificada, pode-se dizer que a advecção ocorre na horizontal enquanto a difusão ocorre na vertical. De uma maneira geral, os dois processos ocorrem nas duas direções. Entretanto, a difusão horizontal é de menor importância do que a advecção nesta direção, enquanto que a difusão vertical é de maior importância do que a advecção vertical.

Além disso, enquanto a advecção é um processo que ocorre em toda a atmosfera, a difusão é um processo resultante da turbulência atmosférica que, em grande parte, está restrita à Camada Limite Atmosférica. Pode-se dizer que a difusão é um processo que ocorre essencialmente na CLA.

Modelos e teorias de dispersão são usados para estimar as concentrações de poluentes emitidos por fontes antropogênicas, ou naturais, a partir de algumas informações, como características da fonte e o estado da atmosfera. Estes modelos desempenham um importante papel através de suas estimativas, por exemplo, na regulamentação de atividades industriais, tipicamente sendo usados para demonstrar e validar padrões de qualidade do ar.

Existem vários modelos matemáticos capazes de reproduzir o campo de concentração de poluentes emitidos por continuamente por fontes pontuais elevadas na CLA. Muitos destes modelos numéricos de dispersão de poluentes ou também chamados de Modelos de Qualidade do Ar, ou ainda Modelos de Dispersão Atmosférica (MDA), têm sido desenvolvidos

---

<sup>1</sup>Para nos referir à *difusão turbulenta*, que é característica da CLA, utilizamos neste texto apenas o termo *difusão*.

objetivando a investigação científica para dar suporte ao controle de emissões, à tomada de decisões no desenvolvimento de políticas ambientais, ou ainda em sistemas de resposta de emergência, controle de qualidade do ar e em outros estudos de dispersão de poluentes pela comunidade científica.

A modelagem do transporte de poluentes pode ser feita por duas abordagens distintas, referidas como *euleriana* ou *lagrangeana*. A abordagem *euleriana* está baseada na equação da continuidade, já a abordagem *lagrangeana* está baseada na equação de Langevin. Na descrição *lagrangeana* descrevem-se as trajetórias das partículas dos poluentes enquanto elas se movem na atmosfera e considera-se que este movimento é aleatório. Os modelos calculam, então, as concentrações a partir de uma estatística aplicada a um grande número de trajetórias. Nestes modelos, o sistema de referência é um sistema móvel. Diz-se, em tal caso, que o observador segue junto com a pluma enquanto ela viaja. Na descrição *euleriana*, porém, o referencial é fixo. O observador descreve a trajetória da pluma enquanto ela percorre o espaço.

As principais diferenças entre estes modelos residem na complexidade dos mesmos e na forma como os processos *advectivos* e *difusivos* são neles incorporados. Já as semelhanças entre estes modelos é a necessidade de uma representação adequada dos processos dinâmicos e termodinâmicos que governam a evolução temporal da CLA.

A existência da turbulência na CLA é um fator complicador nos modelos matemáticos da atmosfera, pois ao representar a turbulência nas equações da atmosfera nos deparamos, agora, com um conjunto não fechado. Ou seja, o sistema passa a ter mais incógnitas do que equações. Estas incógnitas adicionais que surgem são fluxos turbulentos e estes estão relacionados com a capacidade da atmosfera em misturar os poluentes. A intensidade da turbulência é, por assim dizer, uma medida da capacidade que a atmosfera possui de diluir os poluentes.

Nos modelos *eulerianos* a parametrização do transporte turbulento é baseada na teoria de similaridade da camada limite convectiva e nos parâmetros de escalas locais de uma camada limite estável (Pasquill and Smith, 1983). As teorias de similaridade empregam escalas de velocidades e de comprimentos típicos para expressar o transporte nos diferentes cenários da CLA.

Nos modelos *lagrangeanos*, os parâmetros chave nestes modelos são as escalas de tempo integrais e as variâncias das velocidades turbulentas. As escalas de tempo são obtidas a partir das escalas de comprimento divididas pelas velocidades típicas, enquanto os desvios padrões das velocidades turbulentas são expressos em termos da escala de velocidade convectiva e

da velocidade de fricção.

Portanto, todos os modelos operacionais empregados no cálculo da concentração de poluentes utilizam grandezas físicas que descrevem a estrutura da turbulência na camada limite planetária. Muitos destes parâmetros surgem como variáveis climatológicas, como é o caso da altura da camada limite e da escala de velocidade convectiva.

Um modelo é uma réplica matemática das leis da natureza. Ele busca prever, numericamente, o estado futuro de um sistema físico a partir de informações de seu estado atual. De modo geral, se o modelo é constituído por equações lineares a descrição do estado futuro pode ser obtida analiticamente. Entretanto, em muitas situações, ainda que as equações sejam lineares a solução analítica não é possível devido à complexidade do sistema e do número de equações envolvidas. Por outro lado, quando as equações que compõem o modelo são não lineares a predição do estado futuro só é possível de ser feita numericamente. Este é o caso dos modelos atmosféricos. Particularmente, os modelos *eulerianos*, assentados na equação de conservação da massa, estão incluídos nesta classe de modelos. Em casos extremos, quando simplificações drásticas são impostas, soluções analíticas são possíveis. Exemplo disto é o modelo de pluma gaussiana, cuja dedução formal pode ser encontrada em Lyons [34]. No caso em que simplificações físicas não são impostas à equação de conservação, apenas o uso de técnicas numéricas e recursos computacionais permitem obter a solução da mesma.

Apesar da grande diversidade de modelos encontrados na literatura, muitos deles são utilizados apenas por conveniência e não por sua aplicabilidade ou precisão, pois, modelos com aplicabilidade específicas e mais precisos, geralmente são sistemas numéricos altamente complexos. Segundo Seaman [49], sistemas numéricos altamente complexos exigem um extensivo tempo de estudo para operá-los e interpretá-los adequadamente. Mesmo com a ajuda de documentação e manual de usuário, a verificação de erros e incompatibilidades em um código computacional de talvez umas 50,000 linhas ou mais se tornaria uma tarefa humanamente inviável. Além disso, a adaptação de um modelo requer um profundo entendimento dos limites da aplicabilidade das parametrizações.

Portanto, o desenvolvimento de um modelo com aplicabilidade específica, implementado a partir da adaptação de um modelo numérico pré-existente pode se tornar uma tarefa extremamente difícil ou até mesmo inviável. Isso justifica nosso empenho no desenvolvimento de um modelo a partir de sua raiz, contemplando a necessidade de levar em consideração a formulação e aplicação de parametrizações com base nos estudos realizados e dados disponíveis no grupo de micrometeorologia da Universidade Federal de Santa Maria

(UFSM). Este grupo realiza, há mais de uma década, pesquisas de campo, particularmente na região de Candiota, possuindo um grande conjunto de dados realísticos da atmosfera. Além disto, o Grupo de Modelagem Atmosférica (GruMa/UFSM) possui em operação o modelo de previsão de tempo regional (BRAMS), cujos dados de campo de vento podem ser utilizados no desenvolvimento de um novo modelo de dispersão com a aplicabilidade em região de emissões de poluentes por fontes pontuais.

Desta forma, o objetivo nesta tese é, a partir da concepção de modelos *eulerianos* e levando em consideração informações realistas das emissões e da dinâmica da atmosfera local, produzir uma ferramenta computacional de utilidade prático/científica que possa rotineiramente ser usada como diagnóstico e prognóstico das concentrações superficiais de poluentes passivos (MP),  $\text{NO}_x$  e  $\text{SO}_2$ , devido as emissões aéreas de fontes pontuais.

Em resumo, nesta tese é desenvolvido um modelo para obter numericamente uma solução para a equação de Difusão-Advecção. Este modelo resolve, pelo método de diferenças finitas, a equação de conservação da massa após o procedimento de Média de Reynolds. O modelo numérico, batizado de **ZIMORA** (uma aglutinação dos nomes dos autores **ZIM**ermann e **MORA**es) tem a vantagem de resolver com grande resolução espacial e temporal o campo de concentração. Como um campo de vento realístico é usado como dados externos que o alimentam, oriundos de um modelo regional de meso-escala de previsão de tempo cuja grade espacial de saída de dados é da ordem de quilômetros, é necessário fazer um procedimento de interpolação de grades de baixa resolução, da ordem de quilômetros, para resoluções finas, da ordem de metros. Além disto, o modelo também possibilita incorporar coeficientes de transportes fisicamente aceitáveis para uma turbulência não isotrópica. Estes coeficientes são estimados através da parametrização da CLA proposta por Moraes [41], que fisicamente considera a variabilidade da altura da CLA. Consequentemente, os coeficientes de difusividade (principalmente o vertical) implementados no modelo não são constantes durante as simulações.

Uma característica importante no **ZIMORA** é sua estabilidade numérica. Durante seu desenvolvimento fizemos exaustivos testes de implementação computacional para garantir que as equações de diferenças finitas seguissem certos critérios padrões, como consistência, convergência e estabilidade. Estes critérios são necessários para que estas equações de diferenças finitas representem uma equação diferencial. Embora a formulação da equação de difusão-advecção formulada no capítulo 3.1 não possua solução analítica, sua solução numérica obtida a partir do **ZIMORA** é fisicamente aceitável, como pode-se observar na validação dos resultados de sua simulação, onde dados obtidos em experimentos de campo são utilizados para testar e validar o modelo. Uma vez que não há solução analítica, a perfor-



mance do **ZIMORA** é auferida através da análise estatística feita com bases em um conjunto de índices estatísticos disponíveis na literatura Hanna [16].

Este trabalho está organizado da seguinte forma: no capítulo 2, apresentamos as noções matemáticas de Equações Diferenciais Parciais EDPS e suas formas de discretizações bem como suas limitações e erros de aproximação; no capítulo 3, discutimos a metodologia utilizada, como a dedução da Equação de difusão-Advecção utilizando o processo de Média de Reynolds e também a sua discretização e implementação computacional. Apresentamos ainda os procedimentos utilizados na obtenção de um esquema de interpolação por médias ponderadas para acoplar os dados do campo dinâmico de vento do Pré-Processador Meteorológico (PPM), utilizando a versão brasileira do Sistema de Modelagem Atmosférica Regional (BRAMS) em operação na UFSM; no capítulo 4, apresentamos e discutimos alguns resultados obtidos a partir das simulações realizadas utilizando o modelo numérico desenvolvido, **ZIMORA**, e sua validação através de dados experimentais apresentando os índices estatísticos sobre os valores simulados e experimentais; no capítulo 5, apresentamos as conclusões e sugestões para futuros trabalhos. Por fim, apresentaremos um conjunto de Apêndices contendo gráficos das simulações do **ZIMORA** e informações acessórias à esta tese.

## 2 *Aporte Teórico*

### 2.1 Base Estatística da Turbulência

A base do tratamento estatístico, na dinâmica atmosférica, é análoga as bases estatísticas utilizadas no estudo termodinâmico dos gases, porém constituída sobre as equações de Navier-Stokes.

#### 2.1.1 Valor Esperado, Flutuações e Função Densidade de Probabilidade

Seja uma certa grandeza  $A$ , que possa adotar uma série de  $N$  valores  $a_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Define-se o valor esperado, ou média de  $A$  como:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_i. \quad (2.1)$$

Em geral, temos que distinguir se o valor esperado é sobre conjunto (ensemble), temporal ou espacial. No primeiro caso, os valores distintos  $a_i$  são obtidos de amostras diferentes do mesmo experimento (realização). Se o processo que gera as medidas de  $A$  é estacionário, o valor esperado em ambos os casos será idêntico para  $N \rightarrow \infty$ . Veremos a implicação deste fato na formulação do *Teorema de Ergodicidade*.

No caso de obtermos a grandeza  $A$  como uma função contínua no tempo, o valor esperado sobre um certo intervalo de  $T$  é definido como:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T a(t) dt. \quad (2.2)$$

A obtenção da grandeza  $A$ , como uma função contínua no tempo, só é possível nos casos de expressões analíticas.

Em geral, quaisquer instrumentos utilizados em campanhas experimentais, coletam amostras

discretas de uma quantidade em questão; nestes casos é comum substituir o operador integral na expressão 2.2, pelo operador somatório, sem perda de generalidade.

Uma vez sendo possível expressar a grandeza  $A$  como uma função contínua do tempo, ela tenderá ao valor esperado  $\langle A \rangle$  definido por 2.2 no dado intervalo  $T$ . Num instante qualquer, por exemplo  $t \in [0, T]$ , define-se a flutuação de  $A$  como:

$$a'(t) = a(t) - \langle A \rangle. \quad (2.3)$$

É direto que,  $\langle a' \rangle = 0$ .

Uma grandeza importante no estudo da turbulência, é o desvio quadrático da média da flutuação,  $\langle a'^2 \rangle^{1/2}$ , porquê indica a escala de variação de  $a(t)$  em torno do seu valor médio.

Outra medida também muito importante, principalmente para a estimativa de uma tolerância de erro, é a flutuação relativa:

$$\varepsilon = \frac{\langle a'^2 \rangle^{1/2}}{\langle A \rangle}. \quad (2.4)$$

Quando efetuamos medidas experimentais, geralmente não estamos muito interessados especificamente na magnitude do valor  $a(t)$ , mas sim nas características de suas propriedades estatísticas, uma forma apropriada de fazer tal caracterização, é através de uma Função de Densidade de Probabilidade (**FDP**).

A FDP, é uma função que tem a propriedade de indicar a probabilidade  $P(a)$ , com que  $A$  tenha um valor entre  $a$  e  $a + da$ .

As relações da FDP, entre uma certa grandeza e suas propriedades estatísticas são:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} P(a) da, \quad (2.5)$$

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} aP(a) da, \quad (2.6)$$

$$\langle a'^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (a - \langle A \rangle)^2 P(a) da. \quad (2.7)$$

Observando 2.7, podemos concluir que se pode, em geral, calcular momentos de qualquer ordem, a partir da FDP, mediante:

$$\langle a^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (a - \langle A \rangle)^n P(a) da. \quad (2.8)$$

### 2.1.2 Correlações e Escalas Integrais

Uma forma de se medir a rapidez, tanto no tempo quanto no espaço, com que um sinal flutua, é através da autocorrelação.

Assumindo que uma variável  $a(t)$ , com um valor médio  $\langle A \rangle$  e uma flutuação  $a'(t)$  em um certo instante, podemos construir outra, a partir desta, introduzindo um deslocamento  $\xi$  de tempo, tal que

$$a(t + \xi) = \langle A \rangle + a'(t + \xi)$$

Se multiplicarmos as flutuações destas duas variáveis e realizarmos uma média temporal, obteremos um número que será diferente para cada valor de  $\xi$ . Se  $\xi$  for infinitesimalmente pequeno, este número se aproximará de  $\langle a'^2 \rangle$ , de forma que o coeficiente de correlação temporal,

$$R(\xi) = \frac{\langle a'(t)a'(t + \xi) \rangle}{\langle a'^2 \rangle}, \quad (2.9)$$

é uma função de  $\xi$  com a propriedade de  $R(\xi) \rightarrow 1$  quando  $\xi \rightarrow 0$ .

Por outro lado, se o sinal é estatisticamente estacionário, a função de autocorrelação será simétrica em relação a  $\xi = 0$ , e, portanto, sua primeira derivada será nula na origem.

Experimentalmente, e, em todos os estudos de turbulência, se observa que a função de autocorrelação tende assintoticamente para zero para grandes valores de  $\xi$ , conforme ser observado na figura idealizada (Figura 2.1).

Uma escala de tempo associada à autocorrelação, surge diretamente de sua integral, assumindo que esta seja convergente, e é denominada escala de tempo integral, expressa como:

$$\Gamma_1 = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \int_0^{\xi} R(\xi') d\xi'. \quad (2.10)$$

Quando efetuarmos o cálculo do valor médio de uma quantidade  $f(t)$ , sobre um intervalo de tempo  $T$ , então a variância ( $\sigma_{f(t)}^2$ ) no ensemble (conjunto) deve convergir para um valor

estável quando  $T \rightarrow \infty$ .

$$\sigma^2 = \overline{\left[ \frac{1}{T} \int_0^T f(t + \xi) d\xi - \overline{f(t)} \right]^2} \rightarrow 0 \text{ quando } T \rightarrow \infty, \quad (2.11)$$

onde a barra representa a média sobre o ensemble. A expressão acima pode ser reescrita como:

$$\sigma^2 = \overline{\frac{1}{T^2} \int_0^T \int_0^T f(t + \xi_1) f(t + \xi_2) d\xi_1 d\xi_2 - \frac{2}{T} \overline{f(t)} \int_0^T f(t + \xi) d\xi - \overline{f(t)}^2}, \quad (2.12)$$

podemos agora rearranjá-la, obtendo a seguinte expressão:

$$\sigma^2 = \overline{\frac{1}{T^2} \int_0^T \int_0^T f(t + \xi_1) f(t + \xi_2) d\xi_1 d\xi_2 - \overline{f(t)}^2}. \quad (2.13)$$

Introduzindo a função de autocorrelação 2.9 da seguinte forma,

$$R(\xi_1 - \xi_2) = \frac{\overline{f(t + \xi_1) f(t + \xi_2)} - \overline{f(t)}^2}{\overline{f'^2}}, \quad (2.14)$$

substituindo os termos dentro da integral em 2.13 pela expressão 2.14, obtemos:

$$\sigma^2 = \frac{\overline{f'^2}}{T^2} \int_0^T \int_0^T R(\xi_1 - \xi_2) d\xi_1 d\xi_2 = \frac{\overline{f'^2}}{T^2} \int_0^T \int_{-\xi_1}^{T-\xi_1} R(\xi) d\xi d\xi_1, \quad (2.15)$$

que pode ainda ser reescrita como:

$$\sigma^2 = \frac{\overline{f'^2}}{T^2} \left[ (T + \xi) R(\xi) d\xi + \int_0^T (T - \xi) R(\xi) d\xi \right] = 2 \frac{\overline{f'^2}}{T^2} \int_0^T \left( 1 - \frac{\xi}{T} \right) R(\xi) d\xi. \quad (2.16)$$

Quando  $T \rightarrow \infty$ , a expressão 2.16 se torna:

$$\sigma^2 = 2 \frac{\overline{f'^2}}{T^2} \int_0^T R(\xi) d\xi. \quad (2.17)$$

O argumento de estacionariedade estatística de uma série temporal  $f(t)$ , necessita que as variâncias e covariâncias se aproximem de valores estáveis, à medida que o tempo de média aumenta. Isto implica que uma escala de tempo integral  $\Gamma_{f(t)}$ , para série temporal,

deve existir.

A escala integral deve, todavia, depender da autocorrelação da variável  $f(t)$ , expressamos esta dependência como:

$$\Gamma_{f(t)} = \int_0^{\infty} R(\xi) d\xi. \quad (2.18)$$

Neste ponto, podemos substituir o último termo em 2.17 pela escala de tempo integral 2.18, obtendo a variância no ensemble como:

$$\sigma^2 \simeq 2 \frac{\overline{f'^2}}{T} \Gamma_{f(t)}. \quad (2.19)$$

Observando a expressão 2.19, fica evidente o fato de que  $\sigma^2 \rightarrow 0$  quando  $T \rightarrow \infty$ .

O significado físico, associado à esta escala de tempo integral 2.18, está relacionado ao tempo em que a variável mantém sua "memória" em relação a um instante anterior, ou seja, é o tempo em que existe forte correlação entre as medidas.

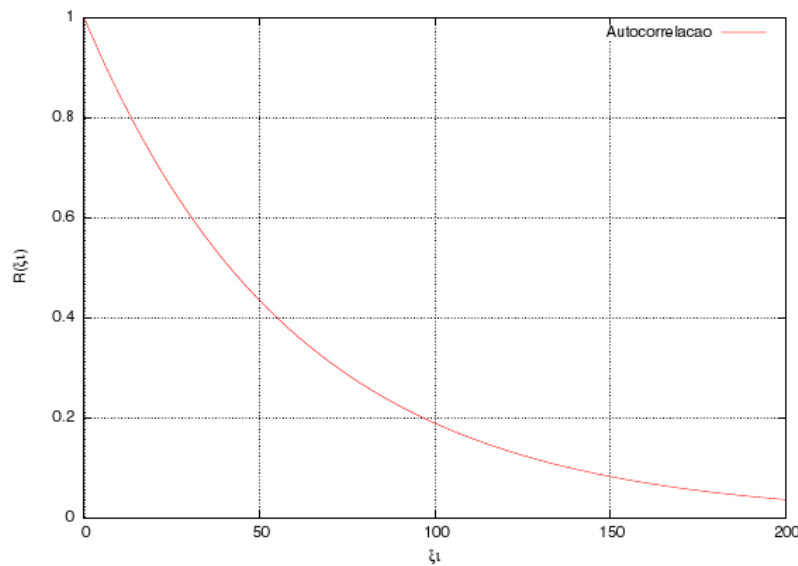


Figura 2.1: Função de autocorrelação.

Na figura 2.1, que representa uma função de autocorrelação exponencial, é possível entender seu significado físico observando que, para  $\xi = 0$  a variável observada apresenta correlação máxima, ao passo que para  $\xi > 200$  s, a variável "perdeu a memória"<sup>1</sup>. A escala integral pode ser aproximada pela área sob a curva  $R(\xi)$ , assim, a variância calculada

<sup>1</sup>As medidas estão descorrelacionadas, ou sua correlação é desprezível.

em 2.19, só tem significado se existir tal memória, e, que esta seja finita.

Podemos estimar o intervalo de tempo (janela) necessário para que o erro seja inferior ao aceitável, ou seja para que não exceda o valor  $\varepsilon = \frac{\sigma}{f(t)}$  por:

$$T \simeq 2 \frac{\sigma^2 \Gamma_{f(t)}}{f(t)^2 \varepsilon^2}. \quad (2.20)$$

De maneira prática, para estimarmos o tempo adequado para o cálculo da média temporal, utilizando 2.20, devemos substituir a variância no ensemble pela variância temporal, fazendo uso da hipótese ergódica (Kaimal e Finnigan, 1994), conforme definição na seção 2.1.3. Para valores típicos de  $\sigma_u = 1 \text{ m/s}$ ,  $\Gamma_u = 10 \text{ s}$  e  $\bar{u} = 5 \text{ m/s}$ , e especificando  $\sigma_{\bar{u}} = 0.1 \text{ m/s}$ , por exemplo, para um erro  $\varepsilon = 0.02$ , obteremos  $T=2000 \text{ s} \simeq 30 \text{ min}$ .

Aumentando o período  $T$  de média,  $\varepsilon$  ainda continua em níveis inexpressíveis, porém, com períodos de 1 hora ou mais, podemos esperar erros da ordem de 3,5 - 5 % para valores de  $\sigma_w^2$  e  $\overline{(w'\theta')}$  e, para  $\overline{(v'w')}$ , da ordem de 10 - 50 %, em medidas próximas à superfície [17].

### 2.1.3 Média de Reynolds

As equações de Reynolds, muito denominadas na literatura por *Reynolds Averaged Navier-Stokes* (RANS), contiuem a base matemática nas equações de estudos da dinâmica atmosférica (Silvestrini e Möller, 2004) [50].

Antes da apresentação da formulação do processo de média de Reynolds, é necessário termos em mente algumas definições importantes sobre os processos aleatórios na CLA, os quais serão severamente assumidos como condições necessárias, na teorização dos cálculos sobre fluxos e espectros.

Tais definições seguem:

1. **Turbulência Estacionária:** Um processo físico que pode ser representado por uma série numérica é dito estacionário quando seus valores médios não variam com o tempo, isto é, são invariantes ante uma translação no tempo;
2. **Turbulência Homogênea:** Um processo físico é dito homogêneo quando seus valores médios não se modificam com a posição, isto é, são invariantes ante uma translação no espaço, por exemplo: escoamentos uniformes.;

3. **Turbulência Isotrópica:** A turbulência é dita isotrópica quando os seus valores médios independem da direção, isto é, são invariantes ante rotações. Por exemplo: as intensidades da turbulência são equivalentes em todas as direções,

$$\langle u_x'^2 \rangle = \langle u_y'^2 \rangle = \langle u_z'^2 \rangle. \quad (2.21)$$

visível, neste caso, que a turbulência independe da direção. Para isto ser possível, o tamanho dos vórtices deve ser pequeno, pois somente pequenos vórtices podem ser isotrópicos. Grandes vórtices sofrem o efeito do cisalhamento do escoamento principal e de vórtices vizinhos, produzindo assim, através desse constante processo de deformação e divisão, intensidades de turbulência diferentes nas direções ortogonais;

4. **Processo Ergódico:** Um dado processo físico é dito ergódico quando seus valores médios independem da amostragem (realização) (Bendat e Pierzol, 1990) [6]. Em particular, a hipótese de ergodicidade, permite considerar que as médias de conjunto  $\langle [\cdot] \rangle$  (ensemble) possam ser avaliadas através de médias no tempo  $\overline{[\cdot]}$ ,

$$\langle A \rangle \equiv \frac{1}{T} \int_0^T A(t) dt, \quad (2.22)$$

se o processo for também estacionário, ou através de médias numa direção homogênea, se o processo é estatisticamente homogêneo nessa direção [32].

Em operações de análise de turbulência, tais como a derivação de equações de fluxo, ou fluxos turbulentos, é necessário se isolar as escalas de movimento, por exemplo, através de medidas de uma grandeza  $A$ , sobre um período de 30 minutos, pode-se determinar os valores médios dos desvios positivos e negativos da porção turbulenta em torno da média, Stull (1988) [54].

Com intuito de obter estas flutuações, Reynolds propõe que uma variável seja composta em uma parte média e outra parte flutuante (turbulenta) [54], conforme a expressão:

$$A(t) = a'(t) + \langle A \rangle. \quad (2.23)$$

A expressão 2.23, é comumente citada na literatura como *Decomposição de Reynolds*.

O argumento de Reynolds permite, ao coletarmos dados experimentalmente, decompor o sinal, revelando sua flutuação em torno do seu valor esperado.

Geralmente, é utilizado um operador, denotado por uma barra superior, que simboliza a



Média calculada utilizando a decomposição de Reynolds:

$$\overline{A(t)} = \overline{a'(t)} + \langle A \rangle \quad (2.24)$$

A expressão 2.24, é comumente descrita na literatura como *Média de Reynolds*.

Todas as regras estatísticas definidas na seção 2.1, podem, sem perda de generalidade, ser aplicadas às novas variáveis.

Este operador possui certas propriedades:

- i. A média da flutuação é nula ( $\overline{w'} = 0$ );
- ii. A correlação entre a flutuação e quantidades médias é nula ( $\overline{w'\theta} = 0$ );
- iii. A média de uma média é igual a própria média ( $\overline{\overline{w}} = \overline{w}$ );
- iv. A derivação espacial e temporal comutam com o operador média:

$$\frac{\partial \overline{w}}{\partial x_i} = \overline{\frac{\partial w}{\partial x_i}}; \quad \frac{\partial \overline{w}}{\partial t_i} = \overline{\frac{\partial w}{\partial t_i}}$$

A respeito da hipótese ergódica, Stull (1988) [54], diz que se a turbulência for homogênea e estacionária, pode-se fazer uso desta, já Kaimal (1994) [22], alerta que, caso a série temporal não seja estaticamente estacionária sobre relevante escala de tempo, a condição ergódica deve ser aplicada com cautela.

#### 2.1.4 Transporte por gradiente turbulento

Quando pequenas partículas são liberadas na atmosfera, elas se dispersam ou separam-se uma das outras sob a influência da turbulência. Este efeito tem sido notado muitas vezes e é, mais ou menos, análogo à difusão molecular pelos movimentos aleatórios das moléculas. Na turbulência, contudo, os movimentos aleatórios dos vórtices executam esse papel. Assim, o fenômeno é conhecido como *difusão turbulenta* e, como uma primeira aproximação, tende a ser contrário ao gradiente.

A difusão em um ponto físico na atmosfera, de acordo com o transporte gradiente, é proporcional ao gradiente de concentração local. Consequentemente, poderia ser dito que essa teoria é de natureza Euleriana, na qual considera as propriedades do movimento do fluido relativo a um sistema de coordenadas espaciais fixo.

Neste tipo de aproximação, assumimos que a turbulência causa um movimento total do material liberado na atmosfera no sentido contrário ao gradiente de concentração deste material e a uma taxa que é proporcional à magnitude deste gradiente. O fator de proporcionalidade é análogo aos coeficientes de viscosidade ou condutividade nas leis familiares para a transferência de momentum ou calor nos escoamentos laminares. De forma geral,

$$F_C = -\rho K \frac{\partial \bar{C}}{\partial n}, \quad (2.25)$$

onde  $F_C$ , é o fluxo turbulento, ou seja, a taxa de transferência turbulenta por unidade de área através de uma superfície fixa perpendicular ao escoamento,  $\bar{C}$  é a média da concentração por unidade de massa do ar e  $\frac{\partial \bar{C}}{\partial n}$  é o gradiente desta concentração. O sinal negativo na Eq. 2.25 é consistente com o fluxo contra-gradiente, ou seja, significa que o fluxo está no sentido contrário ao gradiente da concentração média.

Segundo Stull, na análise de turbulência, tais como a derivação de equações de fluxo, ou fluxos turbulentos e, conseqüentemente a equação de Difusão-Advecção, é necessário isolarmos as escalas de movimento, por exemplo, através de medidas de uma concentração  $C$  sobre um período de tempo específico e assim, podemos determinar os valores médios dos desvios positivos e negativos da sua porção turbulenta em torno da média .

Para obter estas flutuações, utilizamos a técnica de decomposição de Reynolds conforme a expressão 2.23 representando uma variável como a composição em uma parte média e outra parte flutuante (turbulenta):

$$C(t) = C'(t) + \langle C \rangle. \quad (2.26)$$

Este argumento de Reynolds permite, ao coletarmos experimentalmente dados de concentração, em nosso caso, decompor o sinal coletado, revelando sua flutuação em torno do seu valor esperado.

Utilizamos o operador, denotado por uma barra superior, que simboliza a Média calculada utilizando a decomposição de Reynolds conforme 2.24 obteremos:

$$\overline{C(t)} = \overline{C'(t) + \langle C \rangle}. \quad (2.27)$$

Lançando mão dos argumentos das regras do operador *Média de Reynolds* descritos nos itens i-iv da seção anterior, o valor instantâneo do transporte de uma concentração específica pode ser representado em termos de uma média e uma flutuação turbulenta em torno desta

média, de maneira que, por exemplo, a totalidade do fluxo vertical de transporte através de um plano vertical possa ser dado por:

$$wC = \overline{wC} + \overline{w'C'}, \quad (2.28)$$

onde convencionamos como positiva a componente vertical do campo de vento  $w > 0$  caracterizando transportes ascendentes. Uma vez que não há saldo de movimento vertical na atmosfera, geralmente consideramos nulo o primeiro termo que surge de qualquer movimento vertical médio  $\overline{wC}$  ao nível da superfície. Por esta razão, com uma boa aproximação, o fluxo total é equivalente ao segundo termo, o fluxo turbulento  $\overline{w'C'}$ .

## 2.2 Equações Diferenciais Parciais

As Equações Diferenciais Parciais (EDPs) que descrevem fenômenos físicos de interesse na mecânica dos fluidos, como o tratado nesta tese, podem ser classificadas segundo [12] e [20] em três categorias básicas, *Elípticas*, *Parabólicas* e *Hiperbólicas*.

Estas três categorias estão associadas a fenômenos físicos distintos. Os métodos empregados na resolução de uma categoria podem funcionar muito bem enquanto o mesmo método pode não funcionar adequadamente em outra. Dois tipos de fenômenos físicos que podemos distinguir na natureza, são os *estacionários* (aqueles que estão em equilíbrio) e os *transientes* (aqueles que evoluem no tempo).

Os problemas de equilíbrio são aqueles em que a variável de interesse não se altera com o tempo. Na maioria destes, as EDPs que descrevem a sua dinâmica são as equações diferenciais *elípticas*, cuja equação diferencial modelo é a Equação de Laplace. Bidimensionalmente esta equação pode ser expressa por:

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0, \quad (2.29)$$

onde  $\phi$  é a variável dependente e  $\nabla^2$  é o operador laplaciano.

A solução única para este tipo de problema que envolve EDPs é obtido especificando-se certas condições sobre a variável dependente na fronteira  $\delta R$  de uma região  $R$ , conforme a figura 2.2.

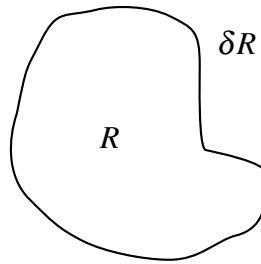


Figura 2.2: Região  $R$  com fronteira  $\delta R$ .

Estes também são conhecidos como problemas de valor de contorno [12]. Estas condições devem ser escolhidas apropriadamente em função do problema em questão.

A principal característica destes tipos de problemas, regidos por EDPS *elípticas*, é o fato de que quaisquer perturbações que ocorram em um ponto  $P$  qualquer, dentro da região  $R$ , se propagam em todas as direções dentro desta, afetando todos os outros pontos internos conforme a figura 2.3. A intensidade destas perturbações diminuem proporcionalmente com a distância a partir do ponto  $P$  onde foram geradas.

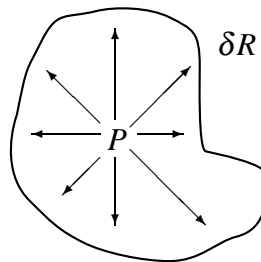


Figura 2.3: Propagação de perturbação em EDPS elípticas.

Decorre disto, que toda a região  $R$  é imediatamente afetada por quaisquer mudanças, seja no valor da variável dependente em um ponto  $P$  no interior da região  $R$  ou seja em sua fronteira  $\delta R$ .

Problemas transientes, ou também conhecidos como problemas de propagação, são aqueles que envolvem a evolução temporal das grandezas físicas de interesse. Tomando-se certos valores iniciais para essas grandezas, em um certo tempo  $t_0$ , é possível se calcular uma solução para as EDPS associadas ao problema em um tempo posterior. Novos valores são obtidos em sucessivos intervalos de tempo  $\Delta t$  até que seja alcançado um intervalo de tempo final  $t_f$ . Podemos expressar esta idéia através da expressão:

$$t_0, t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, t_0 + 3\Delta t, \dots, t_f - \Delta t, t_f.$$

Quando os fenômenos apresentam mecanismos de dissipação de energia, por exemplo,

difusão na forma de calor e escoamento em fluidos viscosos, eles são chamados dissipativos e são modelados por EDPS *parabólicas*. Em outros casos, conservativos, são modelados por EDPS *hiperbólicas*.

Na categoria de EDPS *parabólicas*, uma equação modelo em problemas transientes é a equação transiente de difusão de energia na forma de calor:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (2.30)$$

onde  $T$  é a temperatura e  $\alpha$  é o coeficiente de difusividade térmica.

Ao contrário dos problemas de equilíbrio, onde apenas definimos as condições de contorno, nos problemas transientes necessitamos estabelecer o valor inicial para a variável dependente no tempo inicial  $t_0$ , além das condições de contorno no tempo  $t \neq 0$ . Decorre disto, que estes fenômenos são comumente chamados de problemas de valor inicial.

Observando a expressão 2.30, nota-se que ela apenas relaciona as variações espaço-temporais de  $T$  e não seu valor. Portanto, deve-se especificar o valor inicial de  $T$  e então é possível, através da variação no espaço e no tempo dadas por 2.30, obter os novos valores de  $T$  para qualquer  $t \neq 0$ .

Nos problemas que envolvem EDPS *parabólicas* quaisquer perturbações que ocorram em um ponto qualquer  $P$ , dentro da região  $R$  num instante  $t > 0$ , só afetam as soluções em instantes de tempo posteriores ao instante de tempo em que ocorreu a perturbação  $t > t_p$  ( $t_p$  é o instante de tempo em que ocorreu a perturbação). Assim como nas EDPS *elípticas* os efeitos das perturbações se dissipam conforme aumenta distância ao ponto  $P$ .

As EDPS *hiperbólicas* são empregadas em problemas onde os fenômenos dissipativos são pequenos a ponto de poderem ser desprezados, tais como problemas de vibrações ou de advecção. Problemas descritos por equações diferenciais *hiperbólicas*, assim como no caso das EDPS *parabólicas*, necessitam tanto de condições iniciais quanto de condições de fronteira, portanto, também são chamados de problemas de valor inicial.

A equação modelo para problemas hiperbólicos é a equação da advecção, que unidimensionalmente pode ser expressa por:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad (2.31)$$

que representa o transporte de  $\phi$  no sentido crescente de  $x$  com uma velocidade  $v > 0$ .

Pode-se observar na expressão 2.31 que não há termo dissipativo, portanto a quantidade  $\phi$  deve ser apenas transportada sem nenhuma alteração em seu valor ao longo de  $x$  entre os instantes  $t_0$  e  $t_0 + \Delta T$ . O produto

$$v \frac{\partial \phi}{\partial x},$$

é geralmente conhecido como termo convectivo ou inercial.

Uma característica importante nas EDPS *hiperbólicas* é o fato de que quaisquer discontinuidades, presentes nas condições iniciais se propagam para a solução em  $t \neq 0$  devido a ausência de mecanismos dissipativos. Conseqüentemente, EDPS *hiperbólicas* admitem soluções descontínuas, portanto, segundo [12] ao serem utilizados métodos numéricos para avaliar sua solução, isto deve ser levado em conta no sentido da escolha de um método adequado que seja capaz de lidar com tais discontinuidades.

Processos físicos de convecção que possuam mecanismos de dissipação obedecem às equações *parabólicas* de adveccção-difusão, também conhecida como equação de transporte:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v \frac{\partial \phi}{\partial x} + \alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad (2.32)$$

onde  $v$  é a velocidade de propagação da quantidade  $\phi$  e  $\alpha$  é o coeficiente de difusividade de  $\phi$ .

### 2.2.1 Aspectos Matemáticos

Em geral existem diferentes aspectos sob os quais uma EDP pode ser classificada. Os mais comuns são com relação a sua *ordem*, *dimensionalidade* e *linearidade*.

Com relação a ordem, sua classificação se dá pela ordem da maior derivada presente na equação, por exemplo, a equação da difusão 2.30, pode ser classificada como de segunda ordem.

Segundo Fortuna [12], com relação à dimensionalidade classifica-se uma EDP pelo número de direções espaciais que nela aparecem. Deve-se observar a sutil diferença desta asserção em relação ao *número de variáveis*, uma vez que em problemas transientes a coordenada temporal  $t$  também é independente. Por exemplo, EDPS que tratam de problemas físicos transientes bidimensionais possuem além de uma coordenada temporal, duas coordenadas espaciais. Portanto, esta EDP possui três variáveis independentes, sendo uma temporal além de duas espaciais. Sendo assim, sua *dimensionalidade* é dois.

Em relação à *linearidade*, considerando uma EDP de segunda ordem em relação a duas variáveis  $x$  e  $y$  por exemplo:

$$A \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + D \frac{\partial \phi}{\partial x} + E \frac{\partial \phi}{\partial y} + F \phi = G \quad (2.33)$$

quando  $A, B, C, D, E, F$  e  $G$  forem constantes ou função apenas de  $x$  e  $y$ , a equação 2.33 é dita *linear*. Caso contrário é classificada como *não linear*.

Em função dos valores  $A, B$  e  $C$ , a equação 2.33 pode ser classificada como:

- *Elíptica*, se  $B^2 - 4AC < 0$ ;
- *Parabólica*, se  $B^2 - 4AC = 0$ ;
- *Hiperbólica*, se  $B^2 - 4AC > 0$ ;

### 2.2.2 Análise das Famílias de *curvas características*

Considerando uma equação de primeira ordem do tipo:

$$a \frac{\partial \phi}{\partial x} + b \frac{\partial \phi}{\partial y} = c \quad (2.34)$$

onde  $a, b$  e  $c$  podem ser funções de  $x, y$  e  $\phi$ , mas não das derivadas de  $\phi$ , pois elas podem ser descontínuas nas *características*. Supondo que  $\phi$  é especificado ao longo de uma curva  $L$  no plano  $xy$ , conforme a figura:

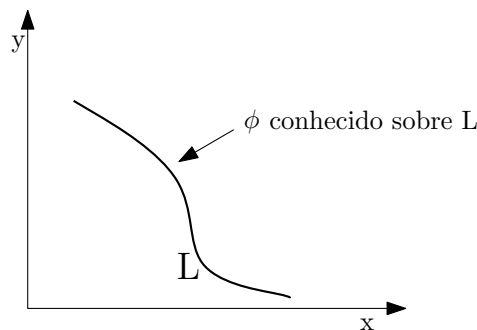


Figura 2.4: Curva  $L$  no plano  $xy$ .

Considerando uma curva *característica*  $C$ , que intercepta a curva  $L$ , e os valores de  $\phi$  nos pontos 1 e 2 (conforme figura 2.5). Se os pontos 1 e 2 forem suficientemente próximos, então, o valor de  $\phi$  no ponto 2 pode ser escrito como  $\phi_2 = \phi_1 + \delta\phi$ , com  $\delta\phi$  dado por:

$$\delta\phi = \frac{\partial\phi}{\partial x}\delta x + \frac{\partial\phi}{\partial y}\delta y. \quad (2.35)$$

No limite  $\delta x, \delta y \rightarrow 0$ , a equação 2.35 será escrita como:

$$d\phi = \frac{\partial\phi}{\partial x}dx + \frac{\partial\phi}{\partial y}dy. \quad (2.36)$$

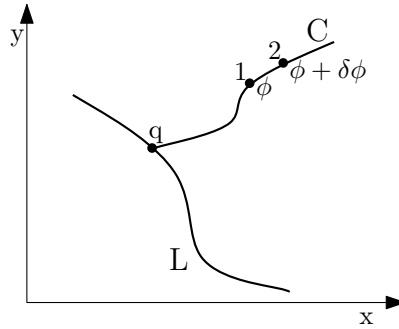


Figura 2.5: Curva *característica* C no plano xy.

Combinando as expressões 2.34 e 2.36, e rearranjando seus termos, obtém-se:

$$\left(\frac{dy}{dx} - \frac{b}{a}\right) \frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{\partial\phi}{\partial x} - \frac{c}{a}. \quad (2.37)$$

Se o valor de  $\phi$  for especificado ao longo da curva C, o valor do termo  $\frac{\partial\phi}{\partial y}$  pode ser determinado ao longo desta *característica* pela expressão 2.37. Para a expressão 2.34, sabe-se que os valores das primeiras derivadas de  $\phi$  ao longo das *características* podem ser indeterminados. Portanto, para que  $\frac{\partial\phi}{\partial y}$  seja indeterminado ao longo da curva C, deve-se ter que:

$$\frac{dy}{dx} - \frac{b}{a} = 0, \quad (2.38)$$

o que define a equação da curva *característica* C:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{b}{a}. \quad (2.39)$$

Existem infinitas curvas *características* no plano xy, todas com equação da forma 2.39. Dependendo da forma da expressão  $\frac{b}{a}$ , algumas vezes é possível integrar diretamente 2.39 para obter a expressão analítica da curva *característica*. Por exemplo, quando  $h = \frac{b}{a}$  for constante, têm-se:



$$\int dy = \int h dx \Rightarrow y(x) - y_0 = h(x - x_0), \quad (2.40)$$

onde as constantes de integração  $x_0$  e  $y_0$  representam a coordenada de um ponto qualquer sobre as *característica*. A equação para a *característica*  $C$  mostrada na figura 2.5, é determinada substituindo as coordenadas  $(x_q, y_q)$  do ponto  $q$  na expressão 2.40, resultando:

$$y(x) - y_q = h(x - x_q). \quad (2.41)$$

As curvas definidas pela expressão 2.40 podem ser observadas na figura 2.6.

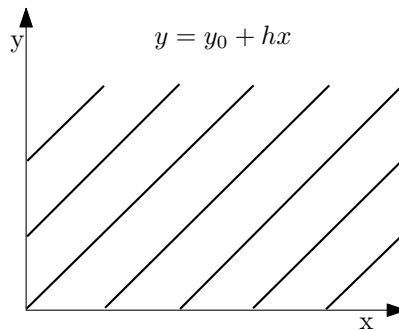


Figura 2.6: Curvas *características* dadas pela expressão 2.40.

Utilizando esta noção de *características*, reconsiderando a expressão 2.33, considerando apenas os termos de segunda derivada, reescreve-se:

$$A \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - G = 0. \quad (2.42)$$

Para ser possível identificar as curvas *características*, é necessário que as derivadas parciais de segunda ordem de  $\phi$  sejam indeterminadas ao longo destas curvas. Se tomarmos  $p = \frac{\partial \phi}{\partial x}$  e  $q = \frac{\partial \phi}{\partial y}$ , pequenas variações em  $p$  e  $q$  podem ser expressas como:

$$dp = \frac{\partial p}{\partial x} dx + \frac{\partial p}{\partial y} dy = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} dx + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} dy, \quad (2.43)$$

$$dq = \frac{\partial q}{\partial x} dx + \frac{\partial q}{\partial y} dy = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} dy + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} dx. \quad (2.44)$$

Isolando os termos  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$  em 2.43 e  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}$  em 2.44 e substituindo os resultados em 2.42 e multiplicando todos os termos por  $\frac{dy}{dx}$  se obtém:

$$\left[ A \left( \frac{dy}{dx} \right)^2 - B \left( \frac{dy}{dx} \right) + C \right] \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} - \left[ A \left( \frac{dp}{dx} \frac{dy}{dx} \right) + C \left( \frac{dq}{dx} \right) - G \left( \frac{dy}{dx} \right) \right] = 0. \quad (2.45)$$

Se for imposta a condição de que  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y}$  também seja indeterminado ao longo a da curva *característica*, o resultado será:

$$A \left( \frac{dy}{dx} \right)^2 - B \left( \frac{dy}{dx} \right) + C = 0. \quad (2.46)$$

É direto que:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}. \quad (2.47)$$

Em função do valor do discriminante em 2.47, vimos na seção 2.2.1, que podemos classificar as EDPS de acordo com os valores de  $A, B$  e  $C$ .

Por possuïrem duas raïzes reais, as EDPS *hiperbólicas* são muito interessantes, pois apresentam duas famílias de curvas características, por exemplo, se na expressão 2.47 tivermos  $B^2 - 4AC > 0$ , estas duas famílias podem ser obtidas através da integração das expressões

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B - \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}, \quad (2.48)$$

e

$$\frac{dy}{dx} = \frac{B + \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A}. \quad (2.49)$$

Para ilustrar esta concepção, é interessante termos a noção destas *características*, pois seu domínio de dependência nos será útil na compreensão da discretização do problema numérico desenvolvido nesta tese, vamos considerar a equação da onda:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (2.50)$$

domínio  $-\infty < x < \infty$ . Adotando como condições iniciais  $\phi(x, 0) = f(x)$  e  $\frac{\partial \phi}{\partial t}(x, 0) = g(x)$ , sendo a velocidade de propagação  $c$ , obteremos uma solução geral do tipo:

$$\phi(x, t) = F_1(x + ct) + F_2(x - ct), \quad (2.51)$$

onde as funções  $F_1$  e  $F_2$  representam ondas que se propagam ao longo das curvas *características*  $x \pm ct = cte$ . Essas curvas características tem inclinação  $\frac{dx}{dt} = \pm \frac{1}{c}$ , indicando que estas ondas se propagam sobre estas duas curvas características com uma velocidade  $\frac{dx}{dt} = \pm c$ .

Podemos observar um exemplo de um pulso se propagando ao longo destas duas características na figura 2.7 a seguir:

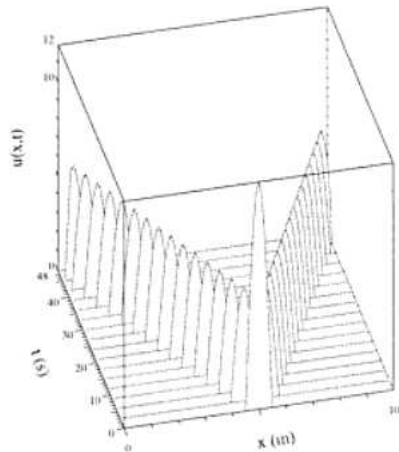


Figura 2.7: Propagação de um pulso ao longo de duas curvas *características*.

**Fonte:** Fortuna 2000[12].

As formas tanto de  $F_1$  quanto de  $F_2$  dependem das condições iniciais e de fronteira adotadas. Segundo Fortuna 2000 [12], em seu texto sobre dinâmica dos fluidos computacionais, se levarmos em consideração as condições auxiliares, é possível mostrar que uma solução para a equação 2.50 é dada pela solução de d'Alembert:

$$\phi(x, t) = \frac{f(x + ct) + f(x - ct)}{2} + \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} g(s) ds. \quad (2.52)$$

onde o primeiro termo ao lado direito da expressão representa a propagação das condições iniciais  $f$  ao longo das curvas *características* e o segundo termo representa o efeito de  $g$  no instante atual  $t$ .

Na expressão 2.52 nota-se que, dentro do domínio de solução,  $\phi(x, t)$  depende somente das condições iniciais no intervalo  $[x - ct, x + ct]$ .

Supondo que as *características* que cruzam o eixo  $x$  em  $x \pm ct$  passem pelo ponto  $(x, t)$ , a região no plano  $xt$  delimitada pelas *características* abaixo do ponto  $(x, t)$  será denominada *domínio de dependência*. Este nome vem do fato que, pela expressão 2.52, a solução no

ponto  $(x, t)$  é influenciada somente por intervalos que ocorram no intervalo  $[x - ct, x + ct]$ . Devido a velocidade de propagação  $c$  ao longo das curvas *características*, os valores de  $\phi$  mais distantes de  $(x, t)$  do que  $x \pm ct$  não se propagam suficientemente rápidos para alcançar o ponto  $(x, t)$ , a ponto de não poder influenciá-lo. Podemos observar isto na figura a seguir:

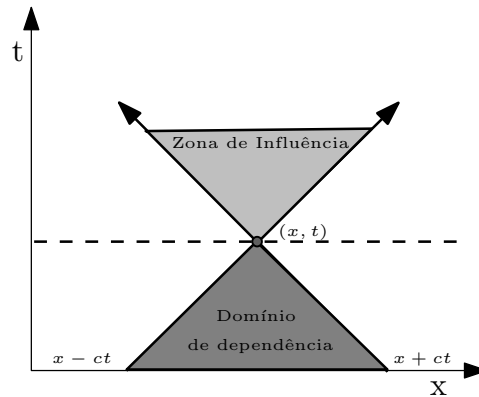


Figura 2.8: Zona de influência em EDPs hiperbólicas.

O ponto  $(x, t)$ , por sua vez influencia a solução  $\phi$  localizada entre ele e as duas curvas *características*, em instantes de tempo posteriores a  $t$  (linha pontilhada). Portanto, esta região é denominada *zona de influência*.

A propriedade fundamental das EDPs hiperbólicas é a limitação do *domínio de dependência* devido a velocidade finita de propagação do sinal ao longo das características. Já nas equações *elípticas* e *parabólicas*, a velocidade de propagação do sinal é supostamente infinita.

Por exemplo, para as *parabólicas* o valor de  $\phi$  é influenciado pelo valor de todos os pontos em todos os tempos anteriores a  $t$ , conforme observamos na figura 2.11.

Nas *elípticas*,  $\phi$  é influenciada por todos os pontos do domínio, conforme observado na figura 2.3.

## 2.3 Metodologia Numérica

A resolução, modelagem, de problemas físicos utilizando o computador, exige que se expressem as equações e também seu domínio de validade, de forma adequada. Isto decorre do fato de que não se pode obter soluções numéricas sobre uma região de domínio contínuo, uma vez que tais regiões possuem infinitos pontos que a compreendem. Portanto, necessita-se que sejam escolhidos alguns pontos deste domínio aonde as soluções serão obtidas. Tal processo é conhecido como discretização, ou seja, a divisão de um região de domínio con-

tínuo em pontos discretos. Como resultados desta subdivisão iremos obter uma malha, compreendendo um conjunto de pontos, onde então se pode computacionalmente obter soluções numéricas.

Após tendo uma malha da região do domínio, as equações a serem resolvidas tem seus termos expressos em função dos valores das incógnitas em pontos discretos adjacentes. Resulta deste procedimento, um conjunto de expressões algébricas. Tais procedimentos serão vistos nas seções a seguir.

### 2.3.1 Aproximações por Diferenças Finitas

Uma Equação de Diferenças Finitas EDF é uma forma de adequar uma Equação Diferencial, para que esta possa ser resolvida numericamente. Isto é, os termos que possuem o operador derivada, presentes na Equação Diferencial, são reescritos como aproximações discretas, conhecidos como *aproximação por diferenças finitas* ADF. Em suma, uma EDF é uma Equação Diferencial discretizada.

De acordo com Fortuna [12], se pode pensar nestas aproximações como o inverso de um processo de determinação do limite. Considere, por exemplo, a definição da derivada de uma função  $f$  contínua:

$$\frac{df}{dx} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \quad (2.53)$$

Desconsiderando o limite, o lado direito da expressão 2.53 pode ser tomado como uma ADF para operador  $\frac{df}{dx}$ . Utilizando-se dois valores de  $f$  separados por uma distância finita  $h$ , a equação 2.53 representará uma aproximação algébrica para a primeira derivada de  $f$ .

Existem várias formas para a obtenção das ADFs, as mais comuns são a expansão em séries de Taylor e interpolação polinomial.

Nesta tese abordaremos a expansão em séries de Taylor, uma vez que o problema numérico a ser resolvido utilizará uma malha de discretização regularmente espaçada e a expansão em séries de Taylor é, segundo [12] e [20], mais econômica computacionalmente. A utilização de interpolação polinomial é mais adequada em problemas onde a discretização não for regular, ou seja o espaçamento entre os pontos do domínio discretizados não forem iguais. Contudo, por que há sistemas de equações a serem resolvidos, o consumo computacional é bem maior.

### 2.3.2 Método de Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas permite obter a solução aproximada de uma Equação Diferencial, em pontos discretos do domínio considerado. Ele a obtém através da adoção de expansões em série de Taylor, substituindo as derivadas parciais da equação, pela razão do incremento com o qual o problema foi aproximado. Por exemplo uma grade regular com pontos espaçados em incrementos de  $\Delta x$  conforme ilustrado na figura 2.9. Para mais dimensões, pode-se aplicar o mesmo procedimento separadamente para cada uma das variáveis em questão.

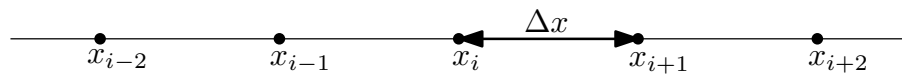


Figura 2.9: Malha regular unidimensional.

Seja uma função qualquer  $C(x)$ , conforme ilustrado na figura 2.10, o valor desta função a uma distância  $\Delta x$ , de um ponto  $x$  qualquer  $C(x + \Delta x)$  pode ser estimado através de uma expansão em série de Taylor em torno de  $x$ :

$$C(x + \Delta x) = C(x) + \Delta x \frac{dC}{dx} \Big|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2C}{dx^2} \Big|_x + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3C}{dx^3} \Big|_x + \dots \quad (2.54)$$

Podemos rearranjar a expressão 2.54 para podermos determinar  $\frac{dC}{dx}$ :

$$\Delta x \frac{dC}{dx} \Big|_x = C(x + \Delta x) - C(x) - \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2C}{dx^2} \Big|_x - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3C}{dx^3} \Big|_x - \dots,$$

dividindo ambos os lados desta expressão por  $\Delta x$  obteremos:

$$\frac{dC}{dx} \Big|_x = \frac{C(x + \Delta x) - C(x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2C}{dx^2} \Big|_x - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3C}{dx^3} \Big|_x - \dots,$$

que pode ser escrita de uma forma mais elegante como:

$$\frac{dC}{dx} \Big|_x = \frac{C(x + \Delta x) - C(x)}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (2.55)$$

O termo:

$$O(\Delta)x = -\frac{\Delta x}{2!} \frac{d^2C}{dx^2} \Big|_x - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{d^3C}{dx^3} \Big|_x - \dots, \quad (2.56)$$

deve ser entendido como termo que representa o erro local de truncamento, que surge pelo

fato de utilizarmos finitos termos da expansão da série de Taylor e pode ser desprezado, conduzindo a forma clássica da aproximação de primeira ordem de diferença finita progressiva:

$$\left. \frac{dC}{dx} \right|_x = \frac{C(x + \Delta x) - C(x)}{\Delta x}. \quad (2.57)$$

Observando 2.57 percebemos que ela nada mais é do que a inclinação do segmento de reta *A* que une  $C(x)$  e  $C(x + \Delta x)$  se traçássemos um gráfico de  $C$  em função de  $x$  conforme ilustrado na figura 2.10.

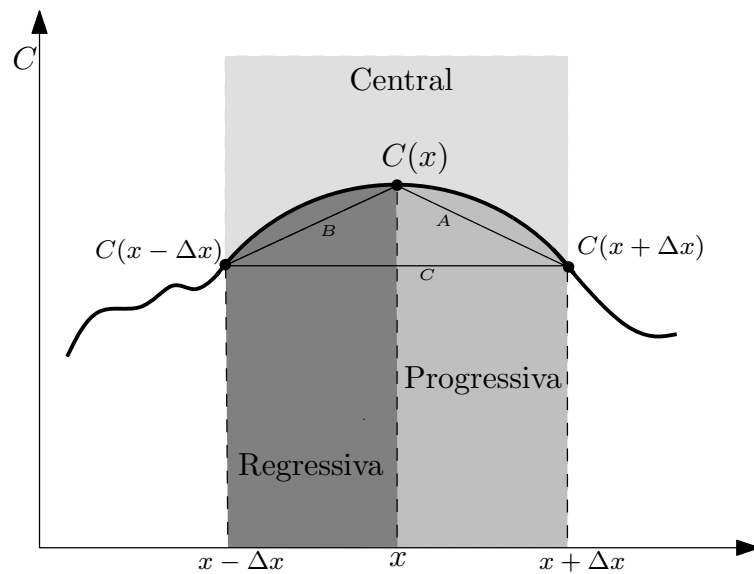


Figura 2.10: Diferença finita regressiva, progressiva e central.

Aplica-se um procedimento análogo, para avaliar o valor de  $C(x)$  a uma distância  $(-\Delta x)$  qualquer de um ponto  $x$ . O valor  $C(x - \Delta x)$  pode ser estimado também através de uma expansão em série de Taylor em torno de  $x$ :

$$C(x - \Delta x) = C(x) - \Delta x \left. \frac{dC}{dx} \right|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2C}{dx^2} \right|_x - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{d^3C}{dx^3} \right|_x + \dots \quad (2.58)$$

Rearranjando a expressão 2.58 para podermos determinar  $\left. \frac{dC}{dx} \right|_x$ :

$$\Delta x \left. \frac{dC}{dx} \right|_x = C(x) - C(x - \Delta x) + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2C}{dx^2} \right|_x - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left. \frac{d^3C}{dx^3} \right|_x + \dots,$$

dividindo ambos os lados desta expressão por  $\Delta x$  :

$$\left. \frac{dC}{dx} \right|_x = \frac{C(x) - C(x - \Delta x)}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2!} \left. \frac{d^2C}{dx^2} \right|_x - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left. \frac{d^3C}{dx^3} \right|_x - \dots,$$

que também pode ser escrita como:

$$\left. \frac{dC}{dx} \right|_x = \frac{C(x) - C(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (2.59)$$

O termo:

$$O(\Delta)x = \frac{\Delta x}{2!} \left. \frac{d^2C}{dx^2} \right|_x - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \left. \frac{d^3C}{dx^3} \right|_x + \dots, \quad (2.60)$$

representa erro local de truncamento, que surge pelo fato de utilizarmos finitos termos da expansão da série de Taylor e pode ser desprezado, conduzindo a forma clássica da aproximação de primeira ordem de diferença finita regressiva:

$$\left. \frac{dC}{dx} \right|_x = \frac{C(x) - C(x - \Delta x)}{\Delta x}, \quad (2.61)$$

que também nada mais é do que a inclinação do segmento de reta  $B$  que une  $C(x - \Delta x)$  e  $C(x)$  se traçássemos um gráfico de  $C$  em função de  $x$  conforme ilustrado na figura 2.10.

Outra aproximação bastante utilizada e, a qual modelo objeto desta tese também utiliza é conhecida como diferença finita centrada, que podemos obter subtraindo 2.58 de 2.54:

$$C(x + \Delta x) - C(x - \Delta x) = 2\Delta x \left. \frac{dC}{dx} \right|_x + O(\Delta x^2), \quad (2.62)$$

que resolvendo para  $\left. \frac{dC}{dx} \right|_x$  e desprezando o termo de erro de truncamento  $O(\Delta x^2)$ :

$$\left. \frac{dC}{dx} \right|_x = \frac{C(x + \Delta x) - C(x - \Delta x)}{2\Delta x}. \quad (2.63)$$

que também nada mais é do que a inclinação do segmento de reta  $C$  que une  $C(x - \Delta)$  e  $C(x + \Delta x)$  se traçássemos um gráfico de  $C$  em função de  $x$  conforme ilustrado na figura 2.10.

A equação de difusão-advectação 3.30 possui termos que exigem uma aproximação de segunda ordem, uma forma te obtermos tal aproximação consiste em somarmos as equações 2.54 e 2.58, considerando até o termo de segunda ordem da expansão:

$$C(x + \Delta x) + C(x - \Delta x) = C(x) + \Delta x \left. \frac{dC}{dx} \right|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2C}{dx^2} \right|_x + C(x) - \Delta x \left. \frac{dC}{dx} \right|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left. \frac{d^2C}{dx^2} \right|_x,$$

somando os termos obtemos:



$$C(x + \Delta x) + C(x - \Delta x) = 2C(x) + 2 \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 C}{dx^2} \Big|_x,$$

escrevendo em termos do termo de segunda ordem:

$$\frac{d^2 C}{dx^2} \Big|_x = \frac{C(x + \Delta x) - 2C(x) + C(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2}, \quad (2.64)$$

A expressão 2.64 é conhecida como aproximação de segunda ordem por diferença centrada e é amplamente utilizada na solução de equações diferenciais *parabólicas* como a de convecção por exemplo.

### 2.3.3 Discretizações

Nesta seção vamos discutir a respeito das características relevantes, das EDPS *parabólicas* e *hiperbólicas*, para a solução de problemas por diferenças finitas. Também os processos de suas discretizações numéricas. As figuras presentes nesta seção são, em grande parte, adaptadas de Hoffmann [20].

Já foi visto, nas seções anteriores, que problemas de propagação são aqueles problemas de valores iniciais e de condições de contorno, em domínio aberto. Quando falamos em domínio aberto, este é em relação a pelo menos uma das variáveis independentes. Estes problemas são governados por EDPS *parabólicas* ou *hiperbólicas*, onde as soluções no domínio de interesse evoluem, a partir do estado inicial, guiadas e modificadas pelas condições de contorno.

A partir da análise das *curvas características* na seção 2.2.2, vimos que problemas governados por EDPS *parabólicas* tem velocidade de propagação de sinal físico infinita  $c = \frac{dx}{dt}$ . Como consequência, a solução em um ponto particular  $P$  em um nível de tempo  $n$  depende da solução em todos os outros pontos do domínio e em todos os níveis de tempo precedentes, inclusive o nível de tempo  $n$ . Da mesma forma, a solução em um ponto particular  $P$  em um nível  $n$  influencia a solução em todos os outros pontos no domínio de soluções e em todos os outros níveis de tempo posteriores.

Estas propriedades gerais das EDPS *parabólicas* são ilustradas na figura a seguir:

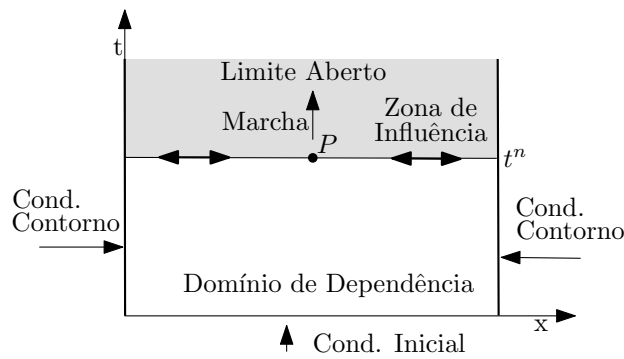


Figura 2.11: Domínio de dependência e zona de influência para EDPS *parabólicas*.

A função da solução numérica das EDPS *parabólicas* é a *marcha*, ou seja, propagar a solução no nível de tempo  $n$  avançando no tempo para o nível de tempo  $n + 1$ , conforme a figura 2.12, onde o domínio físico de dependência das EDPS *parabólicas* é ilustrado.

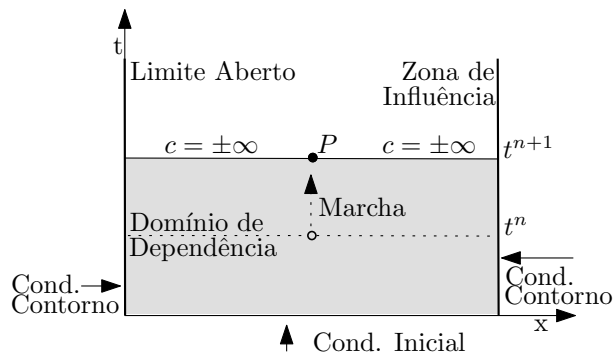


Figura 2.12: Domínio físico de dependência em EDPS *parabólicas*.

Com relação a velocidade de propagação de sinal físico infinita associada com as EDPS *parabólicas*, a solução no ponto  $P$  no nível de tempo  $n + 1$  deve depender da solução em todos os outros pontos no nível de tempo  $n + 1$ . Portanto, requer uma velocidade de propagação de sinal físico infinita  $c_n = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ .

Anteriormente, na seção 2.2.2, vimos que problemas governados por EDPS *hiperbólicas* tem velocidades de propagação de sinal físico finitas  $c = \pm \frac{dx}{dt}$ . Portanto, como consequência, a solução em um particular ponto  $P$  no nível de tempo  $n$  depende da solução somente de um domínio de dependência finito no domínio de soluções em tempos precedentes ao nível de tempo  $n$ . Da mesma maneira, a solução em um ponto particular em um nível de tempo  $n$  influencia a solução somente dentro de uma zona finita de influência no domínio de soluções em tempos posteriores ao nível de tempo  $n$ . Na figura seguinte podemos observar estas características:

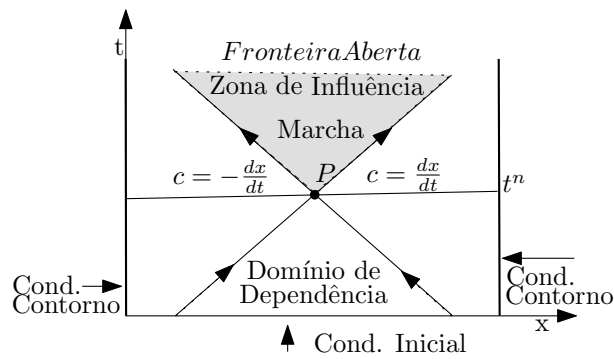


Figura 2.13: Domínio de dependência e zona de influência para EDPS *hiperbólicas*.

O objetivo da solução numérica das EDPS *hiperbólicas* é levar a solução no nível  $n$ , avançando no tempo até o nível de tempo  $n + 1$ , como podemos verificar na figura 2.14, onde o domínio físico de dependência destas EDPS é ilustrado.

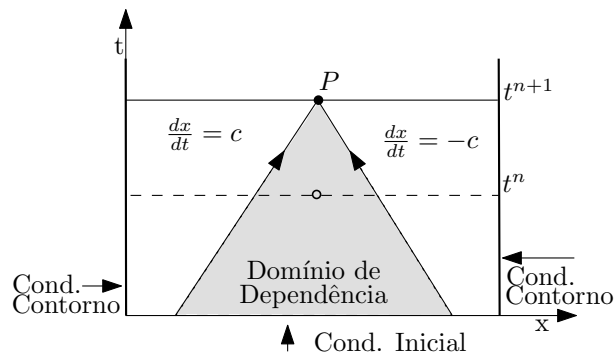


Figura 2.14: Domínio físico de dependência em EDPS *hiperbólicas*.

Em relação a velocidade de propagação do sinal físico finita associada com as EDPS *hiperbólicas*, a solução em um ponto  $P$  no nível de tempo  $n + 1$  não deve depender da solução em qualquer outro ponto no nível de tempo  $n + 1$ . Portanto, elas requerem uma velocidade de propagação de sinal numérica finita como  $c_n = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ .

As figuras 2.11 à 2.14 revelam as principais semelhanças e diferenças entre as EDPS *parabólicas* e *hiperbólicas*. A principal similaridade entre as duas está no fato de que ambas tratam de fenômenos físicos de propagação. Isto implica que ambas requerem métodos que tratem estes deslocamentos (*marching methods*), para obterem soluções numéricas. Já a principal diferença entre os dois tipos, é a velocidade de propagação do sinal físico. Para as EDPS *parabólicas* esta velocidade é infinita e para as EDPS *hiperbólicas* a velocidade é finita.

Métodos de diferenças finitas, nos quais a solução em um ponto  $P$  no nível de tempo  $n + 1$  dependam apenas da solução em pontos vizinhos no nível de tempo  $n$ , possuem uma

velocidade de propagação de sinal numérica  $c_n = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ . Tais métodos de diferenças finitas são chamados *métodos explícitos*, porque a solução em cada ponto é especificada explicitamente em termos da solução conhecida nos pontos vizinhos no nível de tempo  $n$ . Esta situação é ilustrada na figura 2.15, que faz alusão ao domínio físico de dependência para as EDPS *hiperbólicas*. A velocidade de propagação de sinal numérica  $c_n = \frac{\Delta x}{\Delta t}$  é finita.

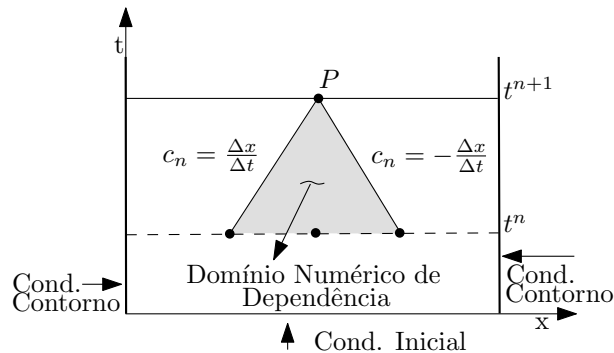


Figura 2.15: Domínio numérico de dependência em *métodos explícitos*.

Já os métodos de diferenças finitas nos quais a solução em um ponto  $P$  no nível de tempo  $n + 1$  dependam da solução nos pontos vizinhos no nível de tempo  $n + 1$  tem velocidade de propagação de sinal numérica infinita  $c_n = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ . Tais métodos são chamados *métodos implícitos*, porque a solução em cada ponto é especificada implicitamente em termos da solução desconhecida em pontos vizinhos no nível de tempo  $n + 1$ . Esta situação é ilustrada na figura 2.16, que também nos relembra o domínio físico de dependência das EDPS *parabólicas*. Aqui a velocidade de propagação de sinal numérica  $c_n = \frac{\Delta x}{\Delta t}$  é infinita.

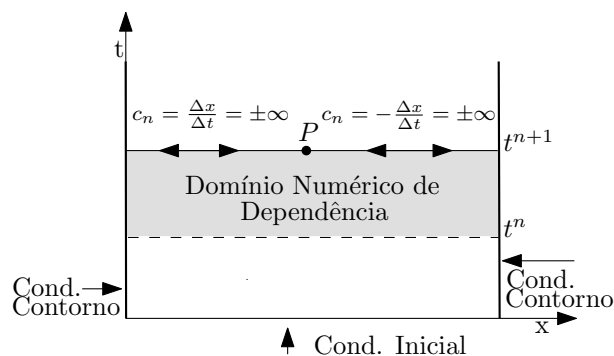


Figura 2.16: Domínio numérico de dependência em *métodos implícitos*.

As semelhanças e diferenças entre a marcha dos métodos *explícitos* e *implícitos*, são os ilustrados nas figura 10.5 e 10.6. A principal semelhança é que ambas levam à solução numérica, avançando de um nível de tempo para o próximo.

Nestes métodos a principal diferença é que a velocidade de propagação de sinal numérica para os métodos *explícitos* é finita, enquanto que para os *implícitos* ela é infinita.

Segundo Hoffman [20] e Fortuna [12], por que não há sistema de equações a serem resolvidos, os *métodos explícitos* são computacionalmente mais rápidos do que os *métodos implícitos*. Logo, *métodos explícitos* podem ser considerados superiores aos *métodos implícitos*. Contudo, a velocidade de propagação de sinal numérica finita nos *métodos explícitos*, não modela a velocidade de propagação de sinal físico infinita associada com as EDPs *parabólicas*, enquanto que a velocidade de propagação de sinal numérica infinita dos *métodos implícitos* modelam corretamente a velocidade de propagação de sinal físico infinita das EDPs *parabólicas*. Portanto, *métodos implícitos* parecem ser bem adequados para resolver EDPs *parabólicas*, e *métodos explícitos* parecem inadequados para resolver tais categorias de EDPs.

A velocidade de propagação de sinal numérica dos *métodos explícitos* corretamente modelam a velocidade de propagação de sinal físico finita associada com as EDPs *hiperbólicas*, enquanto a velocidade de propagação de sinal numérica infinita dos *métodos implícitos* não modelam adequadamente a velocidade de propagação de sinal físico finita das EDPs *hiperbólicas*. Assim, *métodos explícitos* parecem ser bem adequados para resolver EDPs *hiperbólicas*, e *métodos implícitos* parecem não ser adequados para resolver estas categorias de EDPs.

Segundo Hoffman [20], embora nos últimos tempos se tenha obtido algum sucesso utilizando *métodos implícitos* na solução de EDPs *hiperbólicas*, os *métodos explícitos* refletem melhor, quer dizer mais apuradamente, a física dos problemas. Além disto, a maioria dos métodos numéricos para resolução de EDPs são *métodos explícitos*.

A seguir, vamos exemplificar o processo de discretização, utilizando *métodos explícitos*, das duas categorias de EDPs de interesse nesta tese, as EDPs *parabólicas* e EDPs *hiperbólicas*.

### **Discretização das EDPs *hiperbólicas***

Considerando a equação hiperbólica, por exemplo a equação da advecção, em que a velocidade de advecção seja  $v > 0$  e constante:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (2.65)$$

Admitindo que as condições iniciais sejam  $u(x, 0) = f(x)$ . A solução para este tipo de

problema será uma função do tipo  $u(x, t) = f(x - vt)$  para  $t > 0$ . As *curvas características* são análogas às ilustradas na figura 2.6, onde cada curva possui uma equação  $x - vt = cte$ . Ao longo destas curvas características, os valores de  $u(x, t)$  que satisfazem a equação 2.65 são constantes.

Aplicando o método de Euler explícito à 2.65, no qual o termo advectivo (à direita) é discretizado através da aproximação por diferenças finitas centrais, e o termo da esquerda através de aproximação por diferenças finitas progressivas respectivamente conforme as equação 2.57 e 2.63 vistas na seção 2.3.2, definimos uma discretização para 2.65 como:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -v \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}. \quad (2.66)$$

Rearranjando em termos de  $u_i^{n+1}$  obtemos:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{v \Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n). \quad (2.67)$$

O estêncil desta discretização pode ser representado conforme ilustra a figura 2.17 a seguir, adaptada de Andrade *et. al* [2].

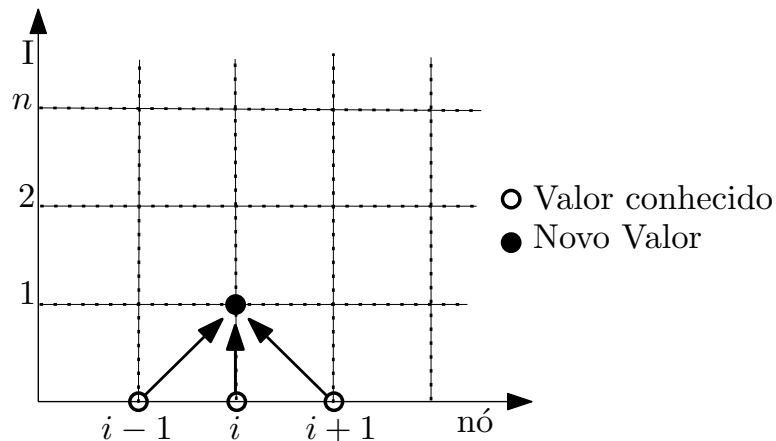


Figura 2.17: Estêncil da discretização de EDPs *hiperbólicas*.

Observando a figura 2.17, percebemos que a discretização utilizada só permite calcularmos  $u_i^{n+1}$  nos pontos internos do domínio computacional. Para se poder calcular a aproximação  $u_i^{n+1}$  nas fronteiras do domínio, precisamos lançar mão de algumas condições auxiliares.

De acordo com Fortuna [12] e Hoffman [20], estas condições auxiliares podem ser satisfeitas utilizando-se de uma discretização do tipo *upwind* (do inglês, significa na direção de onde vem o escoamento, ou seja contra o vento). Nesta discretização, representamos a

derivada espacial, como uma aproximação dependente da direção de propagação das *curvas características*, que no caso da expressão 2.65, é o sinal da velocidade  $v$ . Estas aproximações são do tipo apresentadas nas equações 2.57 e 2.61, respectivamente aproximações por diferenças progressivas e regressivas, vistas na seção 2.3.2:

$$v \frac{\partial u}{\partial x} \approx v \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} \quad \text{se } v < 0. \quad (2.68)$$

$$v \frac{\partial u}{\partial x} \approx v \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} \quad \text{se } v \geq 0. \quad (2.69)$$

Utilizando as expressões 2.69 e 2.68, podemos expressar a discretização da equação 2.65 nas fronteiras do domínio como:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - v \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_i^n - u_{i-1}^n) \quad \text{se } v > 0. \quad (2.70)$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - v \frac{\Delta t}{\Delta x} (u_{i+1}^n - u_i^n) \quad \text{se } v < 0. \quad (2.71)$$

As discretizações 2.70 e 2.71 permitem calcular numericamente os valores de  $u_i^{n+1}$  nas fronteiras do domínio computacional através das quais a quantidade  $u$  é transportada.

A estas expressões, deve ser levado em conta o critério de estabilidade:

$$v \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (2.72)$$

conhecido na literatura como *condição CFL* (Courant-Friedrichs-Lewy). Este critério decorre da velocidade de propagação de sinal numérico finita das EDPS *hiperbólicas* no domínio computacional.

### **Discretização das EDPS parabólicas**

Como já falamos anteriormente, a obtenção de uma EDF consiste em aproximar as derivadas presentes na EDP por ADFs. Observando por exemplo, a equação da difusão 2.77, que faz parte da categoria das EDPS *parabólicas*, percebemos derivadas de segunda ordem. Decorre disto a exigência de substituir tais derivadas por uma ADF também de segunda ordem. Esta ADF pode ser aquela da expressão 2.64 conforme vimos na seção 2.3.2.

Exceto o fato da existência de derivada de segunda ordem, o processo de discretização

das EDPS *parabólicas* será semelhante ao da discretização das EDPS *hiperbólicas*, porém observando uma pequena diferença no critério de estabilidade. Mostraremos este critério na seção 2.3.4 a seguir, quando analisarmos a questão de estabilidade das discretizações.

### 2.3.4 Limitações do processo numérico

Conforme viemos falando até aqui, a solução numérica de equações diferenciais parciais consiste em representá-las algebricamente na forma de equações de diferenças finitas. Estas, uma vez resolvidas, resultam numa solução aproximada para o problema cuja equação diferencial parcial descreve. Contudo, essas soluções não são exatas devido, principalmente, aos erros inerentes ao processo de discretizações das EDPS, erros de arredondamento nos cálculos executados pelo computador e às condições auxiliares numericamente mal aproximadas (Richtmyer, 1967 *apud.* [14], Haltiner, 1971 [14], Fortuna, 2000 [12]).

Seguindo a apresentação de Fortuna [12], apresenta-se a seguir um conjunto de considerações, a respeito das aproximações, a serem levadas em conta durante a modelagem numérica, composto por *erro local de truncamento* (ELT), *consistência*, *convergência* e *estabilidade*.

#### Erro Local de Truncamento

Erros Locais de Truncamento (ELT) são os mais comuns durante o processo de discretização. Pois, eles surgem do fato de escolhermos apenas um número finito de termos na expansão de uma função em séries de Taylor.

A principal característica do ELT é permitir uma medida exata da diferença entre o valor exato da derivada da função analítica e o valor de sua aproximação. Além disto, ele permite observar como esta diferença varia no procedimento de refinamento da malha, ou seja, quando diminuimos o espaçamento da diferença de uma dada dimensão.

De acordo com Arfken [3], do Teorema de Existência e Unicidade da soluções das equações diferenciais ordinárias, dado um problema de valor inicial:  $y' = f(x, y)$  e uma solução  $y(x_0) = y_0$ , se  $f(x, y)$  e também  $\frac{\partial f(x, y)}{\partial y}$  forem definidas e contínuas num intervalo  $|x - x_0| < h$ ,  $|y - y_0| < h$ . Então existe um  $\delta > 0$ ;  $0 < \delta < h$  tal que no intervalo  $|x - x_0| < \delta$  **existe** solução única  $y(x)$  da equação  $y' = f(x, y)$  que satisfaz a equação  $y(x_0) = y_0$ .

Com base nisto, Fortuna [12] cita que também as derivadas das séries de Taylor de ordem  $N$  contínuas em um intervalo  $[a, b]$  deve existir um  $M > 0$  tal que:



$$\left| \frac{\partial^j f}{\partial x^j} \right| \leq M, \quad 1 \leq j < N. \quad (2.73)$$

Considerando  $0 < \Delta x < 1$ , supõem-se que o termo dominante do ELT será o primeiro, ou seja, aquele com menor potência de  $\Delta x$ . Por exemplo, considerando o termo do ELT como sendo o que exerce a maior influência sobre a solução numérica, teremos:

$$|\text{ELT}| \leq M \left[ \frac{(\Delta x)}{2!} + \frac{(\Delta x)^2}{3!} + \dots \right] = M \Delta x \left[ \frac{1}{2!} + (\Delta x)^3 + \dots \right] = M \Delta x S(\Delta x) \leq M P \Delta x, \quad (2.74)$$

em que  $P > 0$  é o maior valor em módulo da função  $S$  no intervalo aberto  $(0, 1)$ . Definindo  $K = MP$ , podemos escrever:

$$|\text{ELT}| \leq K \Delta x \quad (2.75)$$

A expressão 2.75 para o limite superior do ELT sugere que esse erro decresce linearmente com a redução do espaçamento  $\Delta x$ . Considerando uma aproximação da primeira derivada de  $f$  pela expressão 3.9, com espaçamento  $\delta x_0$ . Por 2.75, o  $\text{ELT}_0 \leq K_0 \Delta x_0$ .

Modificando o espaçamento  $\Delta x$ , por exemplo, à metade do espaçamento anterior  $\Delta x_1 = \frac{\Delta x_0}{2}$  e calculando o ELT para a primeira derivada obteremos:

$$|\text{ELT}_1| \leq K_1 \Delta x_1 \leq K_1 \frac{\Delta x_0}{2} \leq \frac{|\text{ELT}_0|}{2} \quad (2.76)$$

Disto, podemos observar que o erro na aproximação é reduzido linearmente a proporção que reduzimos o valor do espaçamento  $\Delta x$ .

As consequências da existência do ELT são os fenômenos de dispersão e difusão artificiais, decorrentes dos termos dominantes do ELT. Pois, tais termos alteram o comportamento original de uma dada EDP ao qual esteja relacionado, sendo, por exemplo, difusivos nos casos de derivada de ordem *par* ou dispersivos no caso de derivada de ordem *ímpar*, Fortuna[12].

Além dos erros de aproximações, ainda devemos levar em consideração, na limitação em modelagem numérica, um conjunto de condições sob as quais as condições de uma aproximação numérica é representativa da solução real de uma EDP.

## Consistência

Pode-se dizer que uma discretização é consistente com a EDP que ela aproxima, quando ao refinarmos a malha o valor da aproximação da derivada tende ao valor da derivada contínua da EDP. Em outras palavras, o ELT da discretização deve tender a zero quando  $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ .

Considerando, por exemplo, uma EDP *parabólica* como a equação da difusão genérica:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = K \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \quad (2.77)$$

onde  $\phi$  é a quantidade sendo difundida e  $K$  um coeficiente de difusividade. Podemos expressá-la na forma de uma ADFS como:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + K(\Delta t) \frac{\phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n}{(\Delta x)^2} \quad (2.78)$$

O processo para verificar a consistência desta aproximação, ou seja, verificar se a discretização 2.78 é consistente com a equação 2.77, consiste em fazermos a expansão dos termos discretizados em torno de  $x_i, t_n$ :

$$\phi_{i\pm 1}^n = \phi_i^n \pm (\Delta x) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i^n \pm \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \Big|_i^n + O(\Delta x)^4 \quad (2.79)$$

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n \pm (\Delta t) \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \Big|_i^n + O(\Delta t)^3. \quad (2.80)$$

Substituindo 2.79 e 2.80 na ADF 2.78 e escrevendo em termos de  $\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n$  obteremos:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_i^n - \left\{ \left( \frac{\Delta t}{2!} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \Big|_i^n + O[(\Delta t)^2, \Delta x^2] \right\}. \quad (2.81)$$

Claramente observamos em 2.81 que quando  $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$  o ELT (conjunto de termos entre chaves à direita de 2.81) também tende a zero. Como consequência, a discretização 2.78 é consistente com a equação 2.77.

## Estabilidade

A estabilidade de um método numérico está associada ao comportamento dos erros ou perturbações na solução da EDP.

Por exemplo, quando houver alguma perturbação e esta começar a ser amplificada, a cada etapa de cálculo, fazendo com que o módulo dos valores da solução cresçam sem limites, dizemos que o método **não é estável**.

Em métodos que tratam de fenômenos transientes, garantir a estabilidade é uma garantia de que a solução numérica seja limitada.

A fonte de fatores que afetam a estabilidade de uma solução, ou seja, erros e perturbações, são a escolha de condições iniciais e de fronteira que não seja adequadamente apropriadas para o problema sendo tratado, ou seja, condições aproximadas de forma incorreta e acúmulo de erros de arredondamento feitos pelo computador durante os cálculos.

Fortuna [12] salienta que o primeiro destes fatores pode ser evitado através da correta discretização das condições auxiliares, já o segundo não pode ser evitado, contudo, pode ser controlado. Para isto, sugere que sempre sejam seguidos os critérios de estabilidade dos métodos numéricos, pois, estes critérios em geral garantem que o método permaneça estável. Permanecer estável significa que os erros de arredondamento não vão crescer ilimitadamente durante os passos de cálculo.

Ao se tratar problemas transientes, métodos *explícitos* apresentam um limite máximo de  $\Delta t$  que pode ser utilizado, geralmente em função de outras variáveis presentes na equação. Caso  $\Delta t$  atinja valores superiores a este limite, o método irá gerar soluções instáveis.

Por exemplo, considerando a ADFS dada anteriormente por 2.78 reescrita na forma:

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \underbrace{K \left( \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right)}_S \left[ \phi_{i-1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i+1}^n \right] + O(\Delta t, \Delta x^2), \quad (2.82)$$

para que o método *explícito* representado por 2.82 seja estável, o termo grifado por  $S$  deve estabelecer o seguinte critério:

$$S = K \left( \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) \leq \frac{1}{2}. \quad (2.83)$$

De acordo com Fortuna [12], o critério 2.83 deve ser seguido a risca, para que não haja acúmulo de erros de arredondamento capaz de invalidar a solução numérica.

## Convergência

Segundo Haltiner [14], uma solução através de ADFs é dita convergente se esta solução se aproxima da solução da EDP na medida em que os incrementos das diferenças finitas, no espaço e no tempo, se aproximam de zero em um domínio de integração. Ressalta ainda que problemas de convergência são usualmente difíceis de se investigar, porque a expressão para o erro de discretização envolve derivadas para as quais os limites superiores e inferiores não são disponíveis.

Fortuna (2000) relaciona convergência e consistência como sendo a consistência uma condição necessária para a convergência. Se isso ocorre, o valor da solução aproximada tende ao valor da solução geral da EDP.

### 2.3.5 Esquema de Lax-Wendroff

Este esquema consiste em obter a EDF a partir da EDP original através da expansão em Séries de Taylor até termos de segunda ordem em  $\Delta t$  inclusive, da variável dependente em torno do ponto  $(i\Delta x, n\Delta t)$ :

$$u(x, t + \Delta t) = u(x, t) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + O(\Delta t)^3. \quad (2.84)$$

O termo  $\frac{\partial u}{\partial t}$  pode ser determinado diretamente da expressão 2.65, já que

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} = -v \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (2.85)$$

Então o termo  $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$  pode ser determinado derivando-se os dois membros da expressão 2.85 em relação a  $t$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right) = -v \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right). \quad (2.86)$$

Trocando a ordem das derivadas do termo à direita da expressão 2.86 obtemos:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -v \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial t} \right) = -v \frac{\partial}{\partial x} \left( -v \frac{\partial u}{\partial x} \right) = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2.87)$$

Substituindo as aproximações 2.85 e 2.87 na expansão 2.84, teremos:

$$u(x, t + \Delta t) = u(x, t) + \Delta t \left( -v \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \left( v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right). \quad (2.88)$$

Finalmente, as derivadas que aparecem em 2.88 são aproximadas por diferenças centrais de segunda ordem, dando origem a EDF:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - v \Delta t \left( \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) + \frac{v^2 (\Delta t)^2}{2!} \left( \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right). \quad (2.89)$$

Em função do número de Courant  $C_n$ , a expressão 2.89 pode ser escrita como:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{C_n}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{(C_n)^2}{2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n). \quad (2.90)$$

## 2.4 Histórico da Análise Objetiva

O problema de se relacionar valores esparsos a uma descrição organizada, como uma grade, já era conhecido desde o final da década de 40. Panofsky [45] é considerado como um dos pioneiros em sugerir um método de análise conhecida como *Análise Objetiva*. Esta análise consiste no processo de transformar dados de observações em pontos irregularmente espaçados em dados em pontos regularmente arranjados na forma de grade [9].

Durante praticamente toda a década de 50, várias implementações foram efetuadas para se tentar evoluir neste tipo de análise, porém, uma de suas melhores técnicas era o método de ajuste polinomial por mínimos quadrados, mas, este tinha a tendência de desenvolver alguns tipos de instabilidades em algumas áreas. Muitos esforços foram feitos para contornar este problema, até que ao final da década foi formado uma unidade conjunta de previsão numérica de tempo (JNWP) que, após extensivas tentativas de uso deste método, muda os procedimentos deste tipo de análise, seguindo métodos descritos por Bergthórsson e Döös *apud* [9].

Estas mudanças foram feitas basicamente na metodologia de preparação dos dados, como coleta e remoção de erros, suavização e a utilização de uma interpolação através de médias ponderadas. Uma descrição clara deste procedimento pode ser encontrada no trabalho de Cressman (1959) [9].

Na metade da década de 60, Barnes [5] em seu trabalho apresenta o desenvolvimento de um esquema de interpolação por média ponderada convergente, para obter mais detalhes na análise de dados aleatoriamente espalhados. Nos anos anteriores, muitos estudos haviam

sido feitos para encontrar uma boa técnica de interpolação para esquemas de análise objetiva, de maneira que mais detalhes fossem representados por esta análise. Até então, o melhor tipo de esquema, quer dizer, o mais bem sucedido, havia sido o esquema de ajuste de superfícies. Este esquema consistia em ajustar uma superfície geométrica aos dados conhecidos e calcular os valores determinados pela superfície, em quaisquer outros pontos de interesse. Especialmente pontos de grade.

Muitos outros autores como (Dellert, Pfeffer *et. al*, Penn, Kunkel e Mount (1963) *apud* [5]) basearam seus trabalhos neste esquema; Na opinião destes, este método apresentava três principais desvantagens:

1. Os cálculos eram complicados e consumiam muito tempo de máquina para serem completados;
2. Os dados aos quais se ajustavam as superfícies eram escolhidos de maneira artificial (por permitirem melhores resultados);
3. O efeito de se utilizar dados errados podiam ser catastróficos, uma vez que todos tinham o mesmo peso para obter a forma geral da superfície.

Para minimizar os efeitos indesejáveis, uma nova proposta surgiu na época, um processo de suavização foi recomendado, empregando o método de ajuste de mínimos quadrados das superfícies aos dados, onde a influência de cada dado tivesse um peso proporcional a sua distância em relação ao ponto de grade.

Este método foi considerado como uma combinação entre o método de ajuste de superfície [5] e o método de interpolação por médias ponderadas proposta por Cressman [9].

O método de médias ponderadas determinava o valor da variável em um ponto de grade, como sendo a soma de valores ponderados (com uma certa importância) de cada dado individual. Ou seja, quanto mais próximo um ponto estivesse do ponto de grade, maior seria a influência de seu valor.

A técnica de médias ponderadas, também já vinha paralelamente sendo utilizada, porém, a maior desvantagem de tal esquema era sua tendência em desuavisar demais todas as pequenas variações no campo, fossem causadas tanto por erros de dados, quanto fossem causadas por distúrbios da atmosfera.

No trabalho de Barnes [5], ele descreveu uma técnica que recuperava os detalhes perdidos durante a aplicação do esquema de médias ponderadas. O fator peso usado em sua

análise objetiva foi desenvolvido da premissa fundamental de que uma distribuição bidimensional de uma variável atmosférica poderia ser representada por um número infinito de ondas harmônicas independentes, ou seja, uma representação integral de Fourier.

Na sua forma corrente, o fator de ponderação estava explicitamente relacionado à densidade de observações, que de forma final, dava a obtenção de resolução passível em qualquer análise escalar. Devido à dependência da densidade, aplicações de tal esquema eram restritos à regiões onde a distribuição de dados fosse razoavelmente uniforme, ou seja, a distância entre as estações de observação não se desviasse muito da média.

Na metade da década de 80, os esquemas mais notáveis ainda eram os adotados por Barnes e Cressman. Em 1985 Hibbard e Wylie [18] apresentam um método similar, cujos resultados são muito próximos ao de Barnes e Cressman, porém, permitindo um tempo de computação muito menor.

Este esquema está em uso até os dias de hoje, empregado no McIDAS<sup>2</sup>.

Nos métodos de Barnes (1964) e Cressman (1959), se quiséssemos interpolar NS pontos de dados observados, em NG pontos de grade, o tempo de computação seria proporcional a NS\*NG. O novo método proposto custaria um tempo proporcional a NS+NG, que seria executado cerca de 30 vezes mais rápido que o Método de Barnes [5] no McIDAS quando houvesse por exemplo, 1000 observações e 1500 pontos de grade [18].

Este método consistia em escolher, para o peso a ser usado no esquema de médias ponderadas, uma função de uma classe restrita de tal modo que não fosse necessário calcular os produtos entre os pesos e os dados para cada par de ponto de grade e o ponto de observação. Para tal, eles aproveitavam do somatório e assim emulavam a técnica do filtro passa-baixa de Barnes [5] através da combinação das operações nas observações. A função que Hibbard e Wylie [18] utilizaram foi um tipo de exponencial de meio-passo, que no caso unidimensional pode ser expressa por:

$$W(x - x_i) = \begin{cases} e^{-\left(\frac{x-x_i}{r}\right)} & \text{se } x_i \leq x \\ 0 & \text{se } x_i > x \end{cases}$$

---

<sup>2</sup>Do inglês: *Man-Computer Interactive Data Access System (McIDAS)*, sistema de acesso de dados de interação homem-computador, é uma ferramenta pioneira de previsão de tempo, sendo uma coleção de programas e bibliotecas de usuários para visualização de dados geofísicos. Desenvolvida nos anos 70, pelo centro de ciências e engenharia espaciais (SSEC) da universidade de Madison em Winsconsin (EUA), é usada continuamente até os dias de hoje. Reunindo as mais diversas fontes de informações como de satélites, estações, modelos numéricos e outros, é utilizada por vários setores como universidades e centros de pesquisas ao redor do mundo, agência aeroespacial americana (NASA), Centro de Previsão de Tempestades (SPC) e alguns setores comerciais como empresas aéreas e de navegação. Considerada como uma ferramenta de sinergia que integra numerosos tipos de dados em um único sistema. Fonte: <http://www.ssec.wisc.edu/mcidas>

Onde  $r$  é uma constante que determina o peso da função ou suavização espacial do dado.

O ponto chave do esquema de Barnes [5] consistia em dividir a expressão acima em duas partes, dois somatórios, sendo este o segredo de sua velocidade.

Este método de Hibbard e Wylie [18] se aproximava muito bem do método proposto por Barnes onde havia dados. A única situação onde o método diferia bastante, eram em áreas onde haviam grande ausência de dados e as informações tinham que ser interpoladas sobre longas distâncias. Tais diferenças surgiam porque não se pode perfeitamente aproximar uma exponencial de distância quadrática, como a proposta por Barnes [5], em uma soma de exponenciais lineares, ou seja, a comparação entre os resultados eram muito bons para pequenas distâncias, mas, se desviavam muito quando as distâncias eram muito grandes. Nestes casos, no método de Hibbard e Wylie [18], eles atribuíam um peso levemente maior aos dados extrapolados por causa desta aproximação. Nas áreas aonde não existiam dados, na realidade não havia informação na análise uma vez que a física da variável não era considerada.

Por estas razões, Hibbard e Wylie [18] sustentaram que seu esquema de análise era mais preciso que o esquema de Barnes [5] e Cressman [9] e poderia substituí-los.



## 3 *O Modelo ZIMORA*

Neste capítulo é apresentada a metodologia utilizada para o desenvolvimento do modelo numérico para a equação de difusão-advecção. Este modelo resolve, pelo método de diferenças finitas, a equação de conservação da massa após o procedimento de média de Reynolds. O modelo numérico tem a vantagem de resolver com grande resolução espacial e temporal o campo de concentração. Como um campo de vento realístico é usado como dados externos ao modelo, é necessário adotar um esquema de interpolação de grades de baixa resolução, da ordem de quilômetros, para resoluções finas, da ordem de metros. O modelo também possibilita incorporar coeficientes de transportes fisicamente aceitáveis. Dados obtidos em experimentos de campo são utilizados para testar e validar o modelo.

A seguir descrevemos cada uma das etapas executadas e os resultados dos testes executados em cada uma destas.

### 3.1 **Dedução da Equação Diferencial de Difusão-Advecção**

As equações básicas que descrevem a dinâmica atmosférica são, em geral, equações de conservação de massa e equação termodinâmica. Na maioria dos tratamentos matemáticos da difusão a partir de fontes, a equação diferencial que tem sido ponto de partida, é uma generalização da equação clássica para transferência de energia, na forma de calor, por condução nos sólidos e é essencialmente uma descrição da conservação de massa do material em suspensão (Slade, 1968).

Considerando uma certa grandeza escalar  $C$  qualquer, escrevemos uma equação de conservação por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}C) = S + D. \quad (3.1)$$

onde  $\vec{V}$  é o campo de vento;  $S$  é o termo de fonte e/ou sumidouro e  $D$  é o termo de difusão molecular. Assumindo que não haja fonte nem sumidouro do escalar  $C$ , podemos fazer o termo que os representa  $S = 0$ . Estando interessados apenas no caráter de difusão turbulenta,

desprezamos também o termo de difusão molecular  $D = 0$ .

Utilizando a identidade matemática:

$$\nabla \cdot (\vec{A}\xi) = \xi \nabla \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \nabla \xi, \quad (3.2)$$

substituímos o segundo termo da expressão 3.1 por 3.2:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + C \nabla \cdot \vec{V} + \vec{V} \cdot \nabla C = 0. \quad (3.3)$$

Se considerarmos a atmosfera como sendo um fluido incompressível, o divergente de seu campo de velocidades será nulo, portanto o termo  $C \nabla \cdot \vec{V} = 0$ . Assim, teremos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla C = 0. \quad (3.4)$$

O operador matemático  $\nabla$  (nabla) é explicitamente escrito como:

$$\nabla = \left( \frac{\partial}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial}{\partial z} \hat{k} \right). \quad (3.5)$$

Nas investigações realísticas da atmosfera, o campo de velocidades é tridimensional, assim escrevemos  $\vec{V}$  como sendo uma soma de suas componentes em cada direção do espaço euclidiano:

$$\vec{V} = (u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}). \quad (3.6)$$

Utilizando 3.6 e 3.5, reescrevemos a equação 3.4 como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}) \cdot \left( \frac{\partial C}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial C}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial C}{\partial z} \hat{k} \right). \quad (3.7)$$

Vamos efetuar as multiplicações de 3.7 termo a termo:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} \hat{i} \cdot \hat{i} + u \frac{\partial C}{\partial y} \hat{i} \cdot \hat{j} + u \frac{\partial C}{\partial z} \hat{i} \cdot \hat{k} + \\ & + v \frac{\partial C}{\partial x} \hat{j} \cdot \hat{i} + v \frac{\partial C}{\partial y} \hat{j} \cdot \hat{j} + v \frac{\partial C}{\partial z} \hat{j} \cdot \hat{k} + \\ & + w \frac{\partial C}{\partial x} \hat{k} \cdot \hat{i} + w \frac{\partial C}{\partial y} \hat{k} \cdot \hat{j} + w \frac{\partial C}{\partial z} \hat{k} \cdot \hat{k} = 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

O produto interno entre os versores ortonormais  $(\hat{i}, \hat{j}, \hat{k})$  é nulo toda vez que a operação envolver um par não colinear, caso contrário o produto interno valerá 1, portanto:

$$\begin{aligned}\hat{i} \cdot \hat{i} &= 1; & \hat{j} \cdot \hat{i} &= 0; & \hat{k} \cdot \hat{i} &= 0; \\ \hat{i} \cdot \hat{j} &= 0; & \hat{j} \cdot \hat{j} &= 1; & \hat{k} \cdot \hat{j} &= 0; \\ \hat{i} \cdot \hat{k} &= 0; & \hat{j} \cdot \hat{k} &= 0; & \hat{k} \cdot \hat{k} &= 1.\end{aligned}$$

Anulando os termos em 3.8 nos quais os produtos ortogonais sejam nulos, obteremos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = 0. \quad (3.9)$$

Como estamos resolvendo um campo turbulento, substituiremos as grandezas  $C$  e o campo de vento conforme a expressão 2.26, obtendo:

$$\begin{aligned}C &= \bar{C} + C' \\ u &= \bar{u} + u' \\ v &= \bar{v} + v' \\ w &= \bar{w} + w' .\end{aligned}$$

Substituindo as expressões anteriores em 3.9, teremos:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial C'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial C'}{\partial x} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + u' \frac{\partial C'}{\partial x} + \\ + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial C'}{\partial y} + v' \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + v' \frac{\partial C'}{\partial y} + \\ + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \bar{w} \frac{\partial C'}{\partial z} + w' \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + w' \frac{\partial C'}{\partial z} = 0.\end{aligned} \quad (3.10)$$

Aplicando o operador Média de Reynolds em cada termo de 3.10, conforme 2.27, obtemos:

$$\begin{aligned}\overline{\frac{\partial \bar{C}}{\partial t}} + \overline{\frac{\partial C'}{\partial t}} + \overline{\bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x}} + \overline{\bar{u} \frac{\partial C'}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial C'}{\partial x}} + \\ + \overline{\bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y}} + \overline{\bar{v} \frac{\partial C'}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial \bar{C}}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial C'}{\partial y}} + \\ + \overline{\bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z}} + \overline{\bar{w} \frac{\partial C'}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial \bar{C}}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial C'}{\partial z}} = 0.\end{aligned} \quad (3.11)$$

Usando as propriedades (i-iv) da Média de Reynolds conforme seção 2.1.3 e rearranjando

os termos, a equação 3.11 se resume à:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \overline{u' \frac{\partial C'}{\partial x}} + \overline{v' \frac{\partial C'}{\partial y}} + \overline{w' \frac{\partial C'}{\partial z}} = 0. \quad (3.12)$$

Como assumimos a atmosfera tendo um caráter de fluido incompressível, vamos resolver analiticamente a expressão matemática do divergente do campo de vento.

Sendo nulo o divergente do campo de velocidades ( $\nabla \cdot \vec{V} = 0$ ), então:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (3.13)$$

aplicando a decomposição de Reynolds conforme 2.26 a cada uma das componentes do campo de vento, obtemos:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0, \quad (3.14)$$

aplicando o operador Média de Reynolds à expressão 3.14, temos:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \underbrace{\frac{\partial u'}{\partial x}}_I + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \underbrace{\frac{\partial v'}{\partial y}}_{II} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \underbrace{\frac{\partial w'}{\partial z}}_{III} = 0, \quad (3.15)$$

os termos (*I*, *II* e *III*) da expressão 3.15, de acordo com a propriedade (i) das propriedades da Média de Reynolds, são nulos ( $\overline{a'} = 0$ ). Anulando estes termos e aplicando as outras propriedades em 3.15, obtemos:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = 0. \quad (3.16)$$

Com o resultado de 3.16 e observando a expressão 3.14, diretamente concluímos que:

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0. \quad (3.17)$$

Pode-se multiplicar  $C'$  qualquer à 3.17 sem alterar sua igualdade, assim

$$C' \left( \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} \right) = 0, \quad (3.18)$$

resolvendo o produto termo a termo e aplicando o operador Média de Reynolds resulta em:

$$\overline{C' \frac{\partial u'}{\partial x}} + \overline{C' \frac{\partial v'}{\partial y}} + \overline{C' \frac{\partial w'}{\partial z}} = 0. \quad (3.19)$$

Da mesma maneira que multiplicamos  $C'$  à 3.17, podemos adicionar 3.19 ao lado esquerdo de 3.12 sem alterar sua igualdade, portanto:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \underbrace{\overline{u' \frac{\partial C'}{\partial x}} + \overline{C' \frac{\partial u'}{\partial x}}}_I + \underbrace{\overline{v' \frac{\partial C'}{\partial y}} + \overline{C' \frac{\partial v'}{\partial y}}}_II + \underbrace{\overline{w' \frac{\partial C'}{\partial z}} + \overline{C' \frac{\partial w'}{\partial z}}}_III = 0. \quad (3.20)$$

A propriedade associativa do operador derivada estabelece que a derivada do produto é igual ao produto das derivadas. Por exemplo, sejam  $f$  e  $g$  duas funções quaisquer, temos:

$$\frac{\partial (f(t) \cdot g(t))}{\partial t} = f(t) \frac{\partial g(t)}{\partial t} + g(t) \frac{\partial f(t)}{\partial t}. \quad (3.21)$$

Tomando mão da técnica matemática de 3.21, percebemos que os termos (*I*, *II* e *III*) da expressão 3.20 são análogos aos termos à direita de 3.21. Levando em conta também que a soma da média é igual a média da soma, podemos escrevê-los como:

$$\overline{u' \frac{\partial C'}{\partial x}} + \overline{C' \frac{\partial u'}{\partial x}} = \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial x}, \quad (3.22)$$

$$\overline{v' \frac{\partial C'}{\partial y}} + \overline{C' \frac{\partial v'}{\partial y}} = \frac{\partial \overline{v' C'}}{\partial y}, \quad (3.23)$$

$$\overline{w' \frac{\partial C'}{\partial z}} + \overline{C' \frac{\partial w'}{\partial z}} = \frac{\partial \overline{w' C'}}{\partial z}. \quad (3.24)$$

Substituindo os termos (*I*, *II* e *III*) em 3.20 pelos termos do lado direito das equações 3.22, 3.23 e 3.24, chegamos à expressão de difusão-advecção em termos dos fluxos turbulentos na ausência de fonte/sumidouro e difusão molecular:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v' C'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w' C'}}{\partial z} = 0. \quad (3.25)$$

Na seção 2.1.4, vimos que a proporcionalidade entre o fluxo turbulento e o gradiente do campo médio é expressa por um coeficiente  $K$ , a menos de um sinal negativo (2.25). Portanto, vamos escrever os fluxos turbulentos da concentração média em cada uma das direções do campo médio de velocidade do vento e expressar um coeficiente para cada direção espacial.

Assim, temos:

$$\overline{u'C'} = -K_x \frac{\partial \overline{C}}{\partial x}, \quad (3.26)$$

$$\overline{v'C'} = -K_y \frac{\partial \overline{C}}{\partial y}, \quad (3.27)$$

$$\overline{w'C'} = -K_z \frac{\partial \overline{C}}{\partial z}. \quad (3.28)$$

Substituindo os respectivos operandos do operador derivada nos três últimos termos do lado esquerdo de 3.25 respectivamente pelos termos da direita de 3.26, 3.27 e 3.28, temos:

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( -K_x \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( -K_y \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( -K_z \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} \right) = 0. \quad (3.29)$$

Novamente, tomando mão da propriedade associativa do operador derivada conforme 3.21, aplicando-o ao três últimos termos à esquerda de 3.29 e considerando o termo de fonte  $S$ , temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \overline{u} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} + \overline{v} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} + \overline{w} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} - \frac{\partial K_x}{\partial x} \frac{\partial \overline{C}}{\partial x} - K_x \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x^2} + \\ - \frac{\partial K_y}{\partial y} \frac{\partial \overline{C}}{\partial y} - K_y \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial y^2} - \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial \overline{C}}{\partial z} - K_z \frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial z^2} = S. \end{aligned} \quad (3.30)$$

A expressão 3.30 é a equação de difusão-advecção tridimensional independente do tempo em meio com difusividade não homogênea e com existência de fonte.

## 3.2 Discretização da Equação de Difusão-Advecção

Utilizamos o método de diferenças finitas, onde as derivadas, presentes na expressão 3.30, são aproximadas utilizando uma expansão em série de Taylor. Como resultado, obtemos uma equação algébrica expressa em termos dos valores das incógnitas da função em alguns pontos de grade específicos. A partir destes valores, resolvemos estas equações aplicando as condições iniciais e de contorno.

A utilização do método de diferenças finitas tem grande vantagem econômica em relação a outros métodos devido a sua simplicidade nas operações envolvidas. De maneira

geral, este método tem se mostrado bastante robusto para representar de forma suficientemente adequada a equação governante. A principal deficiência deste método consiste em sua aplicação em problemas que contenham domínio físico com formas geométricas intrincados, gerando, conseqüentemente dificuldades para o estabelecimento de uma malha a ser utilizada para a discretização (Wendland, 2003). No nosso modelo, estas deficiências são suprimidas ao estabelecermos uma malha geométrica simples em forma de grade.

Utilizando os quocientes de diferenças finitas centrais, tanto para a primeira quanto para a segunda ordem (expressões 2.63 e 2.64, respectivamente), aproximamos as derivadas em cada termo da equação de 3.30, obtendo a equação discretizada para iterativamente poder ser resolvida computacionalmente.

Definindo uma notação para variáveis de concentração, fonte e coeficiente de difusividade, como:

$$\begin{aligned} C(t, x, y, z) &= C_{i,j,k}^n \\ S(t, x, y, z) &= S_{i,j,k}^n \\ K(x, y, z) &= K_{i,j,k}. \end{aligned} \tag{3.31}$$

onde  $n$  significa a iteração de  $C(t, x, y, z)$  no tempo  $t$  e  $x, y$  e  $z$  significam as iterações espaciais em cada uma das direções do espaço tridimensional cartesiano, cada termo de 3.30 pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} &= \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t}, \\ \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} &= \frac{C_{i+1,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n}{2\Delta x}, \\ \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} &= \frac{C_{i,j+1,k}^n - C_{i,j-1,k}^n}{2\Delta y}, \\ \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} &= \frac{C_{i,j,k+1}^n - C_{i,j,k-1}^n}{2\Delta z}, \\ \frac{\partial K_x}{\partial x} &= \frac{K_{i+1,j,k} - K_{i-1,j,k}}{2\Delta x}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial K_y}{\partial y} &= \frac{K_{i,j+1,k} - K_{i,j-1,k}}{2\Delta y}, \\
\frac{\partial K_z}{\partial z} &= \frac{K_{i,j,k+1} - K_{i,j,k-1}}{2\Delta z}, \\
\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} &= \frac{C_{i+1,j,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2}, \\
\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} &= \frac{C_{i,j+1,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j-1,k}^n}{\Delta y^2}, \\
\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} &= \frac{C_{i,j,k+1}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j,k-1}^n}{\Delta z^2}.
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Fazendo uso dos termos acima, vamos montar 3.30 novamente:

$$\begin{aligned}
S_{i,j,k}^n &= \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \bar{u} \frac{C_{i+1,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n}{2\Delta x} + \bar{v} \frac{C_{i,j+1,k}^n - C_{i,j-1,k}^n}{2\Delta y} + \bar{w} \frac{C_{i,j,k+1}^n - C_{i,j,k-1}^n}{2\Delta z} + \\
&- \left[ \left( \frac{K_{i+1,j,k} - K_{i-1,j,k}}{2\Delta x} \right) \left( \frac{C_{i+1,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n}{2\Delta x} \right) \right] - \left[ K_x \left( \frac{C_{i+1,j,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i-1,j,k}^n}{\Delta x^2} \right) \right] + \\
&- \left[ \left( \frac{K_{i,j+1,k} - K_{i,j-1,k}}{2\Delta y} \right) \left( \frac{C_{i,j+1,k}^n - C_{i,j-1,k}^n}{2\Delta y} \right) \right] - \left[ K_y \left( \frac{C_{i,j+1,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j-1,k}^n}{\Delta y^2} \right) \right] + \\
&- \left[ \left( \frac{K_{i,j,k+1} - K_{i,j,k-1}}{2\Delta z} \right) \left( \frac{C_{i,j,k+1}^n - C_{i,j,k-1}^n}{2\Delta z} \right) \right] - \left[ K_z \left( \frac{C_{i,j,k+1}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j,k-1}^n}{\Delta z^2} \right) \right].
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Multiplicando ambos os lados de 3.33 por  $\Delta t$ , evidenciando os termos  $2\Delta x$ ,  $2\Delta y$  e  $2\Delta z$  nos termos 5º, 6º, 8º, 9º, 11º e 12º do lado direito de 3.33 e escrevendo em termos de  $C_{i,j,k}^{n+1}$ , chegamos a forma final para a ser resolvida computacionalmente:

$$\begin{aligned}
C_{i,j,k}^{n+1} &= C_{i,j,k}^n + S_{i,j,k}^n + \\
&- \frac{1}{2} \bar{u} \frac{\Delta t}{\Delta x} (C_{i+1,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n) - \frac{1}{2} \bar{v} \frac{\Delta t}{\Delta y} (C_{i,j+1,k}^n - C_{i,j-1,k}^n) - \frac{1}{2} \bar{w} \frac{\Delta t}{\Delta z} (C_{i,j,k+1}^n - C_{i,j,k-1}^n) + \\
&+ \frac{1}{4} \frac{\Delta t}{\Delta x} (K_{i+1,j,k} - K_{i-1,j,k}) (C_{i+1,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n) +
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{4} \frac{\Delta t}{\Delta y} (K_{i,j+1,k} - K_{i,j-1,k}) (C_{i,j+1,k}^n - C_{i,j-1,k}^n) + \\
& + \frac{1}{4} \frac{\Delta t}{\Delta z} (K_{i,j,k+1} - K_{i,j,k-1}) (C_{i,j,k+1}^n - C_{i,j,k-1}^n) + \\
& + K_x \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (C_{i+1,j,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i-1,j,k}^n) + \\
& + K_y \frac{\Delta t}{\Delta y^2} (C_{i,j+1,k}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j-1,k}^n) + \\
& + K_z \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (C_{i,j,k+1}^n - 2C_{i,j,k}^n + C_{i,j,k-1}^n). \tag{3.34}
\end{aligned}$$

### 3.2.1 Condições iniciais e de contorno e definição da fonte

A solução de equações diferenciais parciais geralmente possui uma família de possíveis soluções. Contudo, como estamos tratando de um problema que reflete um fenômeno físico de dispersão, torna-se necessário considerarmos algumas condições auxiliares que ajudem a caracterizar o problema sendo modelado da forma mais realística possível, tais condições são chamadas de condições iniciais e de contorno.

O modelo **ZIMORA** consiste em um simulador computacional que tenta aproximar a evolução temporal da concentração de uma grandeza escalar qualquer. Logo, ele trata de um problema fisicamente transiente onde calcula, a partir de informações desta grandeza inicial (por exemplo  $\bar{C}(t_0, x_i, y_i, z_i)$ , em um instante inicial  $t_0$ ), os valores da mesma em um tempo posterior qualquer. O sucesso na resolução de problemas transientes como este, depende de como as soluções iniciais e de contorno foram propostas.

Para resolvermos a equação 3.30 de nosso modelo precisamos definir tais condições iniciais:

- i. A concentração em todos os pontos da grade no espaço tridimensional tende a zero sempre que o tempo após a liberação da grandeza  $C$  tende ao infinito:

$$\bar{C} \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad t \rightarrow \infty; \quad \forall \quad x, y, z \in (-\infty, \infty);$$

- ii. Exceto no ponto onde se localiza a fonte  $C(t, x_s, y_s, z_s)$ , a concentração em todos os outros pontos da grade no espaço tridimensional tende a zero quando o tempo após a

liberação da grandeza  $C$  tende a zero:

$$\bar{C} \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad t \rightarrow 0; \quad \forall \begin{cases} x & \text{se} \quad x \neq x_s \\ y & \text{se} \quad y \neq y_s \\ z & \text{se} \quad z \neq z_s \end{cases}$$

iii. A massa total da grandeza  $C(t, x, y, z)$  presente deve ser igual a eficiência da fonte  $S(t, x, y, z)$ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{C}(t, x, y, z) dt dx dy dz = S(t, x, y, z);$$

Uma solução aceitável, que segue os itens i, ii e iii acima, para este tipo de equação pode ser uma função gaussiana do tipo:

$$\bar{C}(t, x, y, z) = \frac{S(t, x, y, z)}{\sqrt[3]{4\pi t} \sqrt{K_x K_y K_z}} e^{-\frac{1}{4t} \left( \frac{x^2}{K_x} + \frac{y^2}{K_y} + \frac{z^2}{K_z} \right)}; \quad (3.35)$$

A integração temporal da solução de fonte pontual instantânea resulta em uma solução fonte pontual contínua, enquanto a integração espacial da solução resulta em soluções para fontes volumétricas instantâneas tipo *puff* (Slade, 1968; Pasquill, 1974; Hanna *et al.*, 1982 **apud** [34]);

iv As condições de contorno (cc) devem ser abertas.

Para satisfazer as condições do item iv, devemos redefinir alguns dos termos discretizados nas expressões 3.32:

cc.1 Limite inferior para a componente de dimensão  $x$ ,  $x = 0$ :

$$\begin{aligned} C_{i-1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i+1,j,k}^n & \text{se} \quad i = 0 \\ C_{i,j-1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j+1,k}^n & \text{se} \quad j = 0 \\ C_{i,j+1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j-1,k}^n & \text{se} \quad j = j_{max} \\ C_{i,j,k-1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k+1}^n & \text{se} \quad k = 0 \\ C_{i,j,k+1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k-1}^n & \text{se} \quad k = k_{max} \end{aligned}$$

cc.2 Limite inferior para a componente de dimensão y,  $y = 0$ :

$$\begin{aligned}
 C_{i,j-1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j+1,k}^n && \text{se } j = 0 \\
 C_{i-1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i+1,j,k}^n && \text{se } i = 0 \\
 C_{i+1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i-1,j,k}^n && \text{se } i = i_{max} \\
 C_{i,j,k-1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k+1}^n && \text{se } k = 0 \\
 C_{i,j,k+1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k-1}^n && \text{se } k = k_{max}
 \end{aligned}$$

cc.3 Limite inferior para a componente de dimensão z,  $z = 0$ :

$$\begin{aligned}
 C_{i,j,k-1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k+1}^n && \text{se } k = 0 \\
 C_{i-1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i+1,j,k}^n && \text{se } i = 0 \\
 C_{i+1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i-1,j,k}^n && \text{se } i = i_{max} \\
 C_{i,j-1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j+1,k}^n && \text{se } j = 0 \\
 C_{i,j+1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j-1,k}^n && \text{se } j = j_{max}
 \end{aligned}$$

cc.4 Limite superior para a componente de dimensão x,  $x = x_{max}$ :

$$\begin{aligned}
 C_{i+1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i-1,j,k}^n && \text{se } i = i_{max} \\
 C_{i,j-1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j+1,k}^n && \text{se } j = 0 \\
 C_{i,j+1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j-1,k}^n && \text{se } j = j_{max} \\
 C_{i,j,k-1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k+1}^n && \text{se } k = 0 \\
 C_{i,j,k+1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k-1}^n && \text{se } k = k_{max}
 \end{aligned}$$

cc.5 Limite superior para a componente de dimensão y,  $y = y_{max}$ :

$$\begin{aligned}
 C_{i,j+1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j-1,k}^n && \text{se } j = j_{max} \\
 C_{i-1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i+1,j,k}^n && \text{se } i = 0 \\
 C_{i+1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i-1,j,k}^n && \text{se } i = i_{max} \\
 C_{i,j,k-1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k+1}^n && \text{se } k = 0 \\
 C_{i,j,k+1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k-1}^n && \text{se } k = k_{max}
 \end{aligned}$$

cc.6 Limite superior para a componente de dimensão z,  $z = z_{max}$ :

$$\begin{aligned}
 C_{i,j,k+1}^n &\Leftarrow C_{i,j,k-1}^n && \text{se } k = k_{max} \\
 C_{i-1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i+1,j,k}^n && \text{se } i = 0 \\
 C_{i+1,j,k}^n &\Leftarrow C_{i-1,j,k}^n && \text{se } i = i_{max} \\
 C_{i,j-1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j+1,k}^n && \text{se } j = 0 \\
 C_{i,j+1,k}^n &\Leftarrow C_{i,j-1,k}^n && \text{se } j = j_{max}
 \end{aligned}$$

cc.7 Para todos os demais ( $0 < x \leq x_{max}$ ;  $0 < y \leq y_{max}$ ;  $0 < z \leq z_{max}$ ), pontos de grade no espaço tridimensional, os termos discretizados permanecem como definidos no conjunto de equações 3.32.

Para cada uma das condições de contorno (cc.1 à cc.7), o modelo **ZIMORA** utiliza uma forma da equação 3.34, sendo seus termos discretizados substituídos pelos respectivos termos descritos nestas condições de contorno.

### 3.3 Implementação Computacional

A implementação computacional foi feita utilizando a linguagem de programação *Fortran 95*. Após termos feito a discretização da equação de difusão-advectação, realizamos a implementação e testes de resolução numérica em cada termo da equação separadamente. Tendo estes termos individuais sido testados, implementamos a adição de cada termo na equação e novamente repetimos os testes a cada termo adicionado, desde o unidimensional até a inclusão do campo realístico de vento.

Primeiro, implementamos, em uma dimensão, a equação de *difusão pura*, ou seja, a equação considerando apenas o termo difusivo, cuja figura a seguir mostra o resultado deste teste.

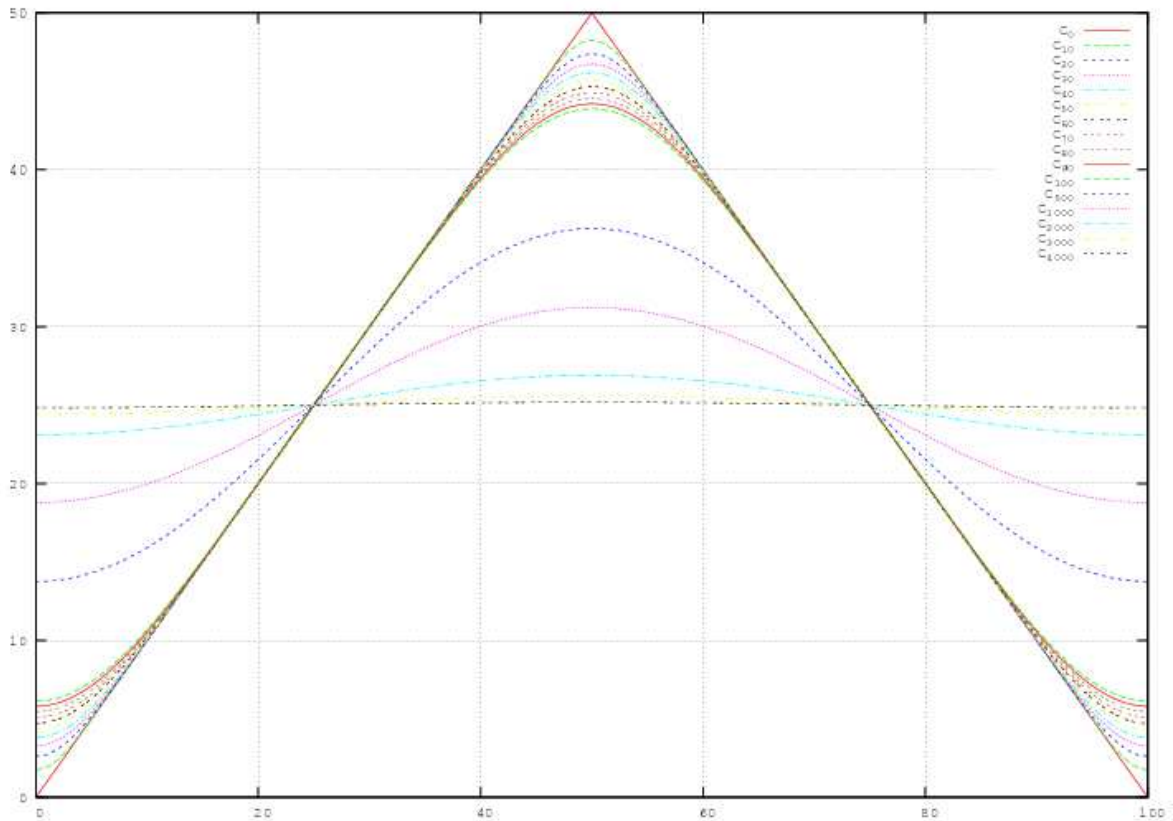


Figura 3.1: Teste de Difusão unidimensional. O perfil de concentração (eixo vertical) vai se difundindo no espaço (eixo horizontal) até atingir um ponto de equilíbrio onde a quantidade genérica em questão encontra-se homogeneizada sobre o domínio. As linhas representam passos de iteração.

O segundo passo, foi a implementação do termo de transporte, utilizando discretização de primeira ordem para uma função gaussiana unidimensional e sem a utilização de condições auxiliares de contorno. A figura a seguir mostra o resultado:

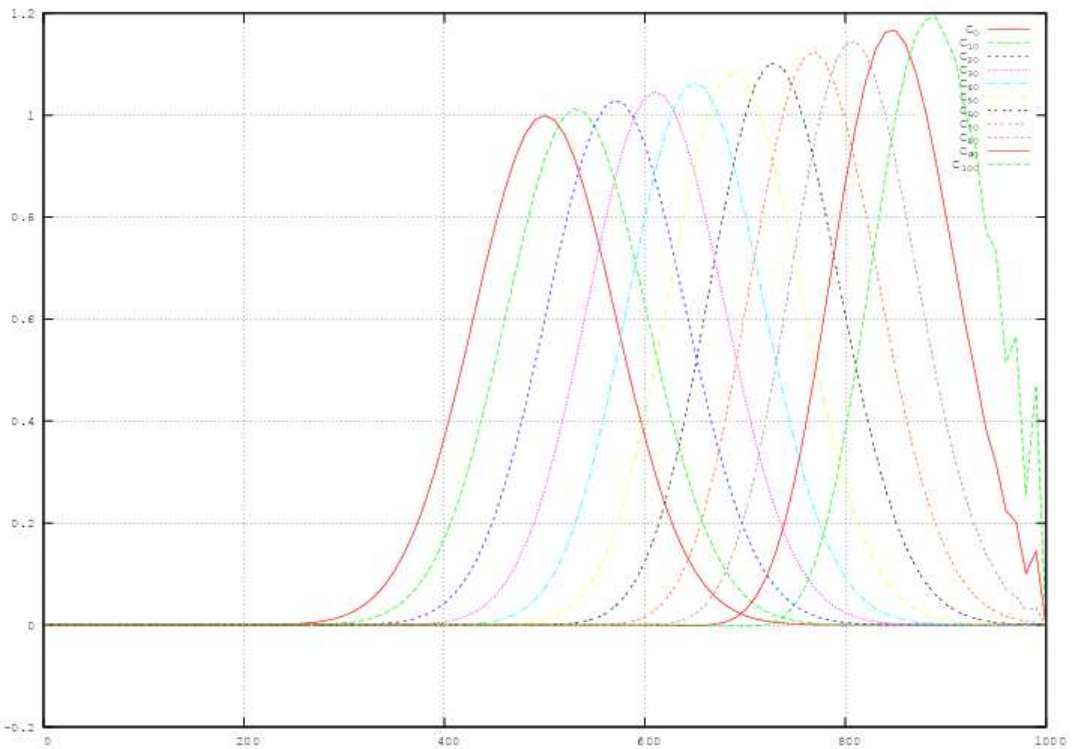


Figura 3.2: Teste de transporte advectivo (concentração - eixo vertical e tempo eixo-horizantal) unidimensional utilizando discretização de primeira ordem para uma função gaussiana unidimensional e sem a utilização de condições auxiliares de contorno.

Percebemos, na figura 3.2, que a discretização de primeira ordem gera instabilidade na solução numérica e que a ausência de condições auxiliares de contorno gera instabilidades no limite do domínio, como podemos observar no comportamento da solução à direita do gráfico.

Para solucionar este tipo de problema, aplicamos a aproximação pelo método de Lax-Wendroff (conforme subseção 2.3.5), que é um método que apresenta convergência, consistência e é condicionalmente estável. A figura a seguir mostra o resultado deste teste.

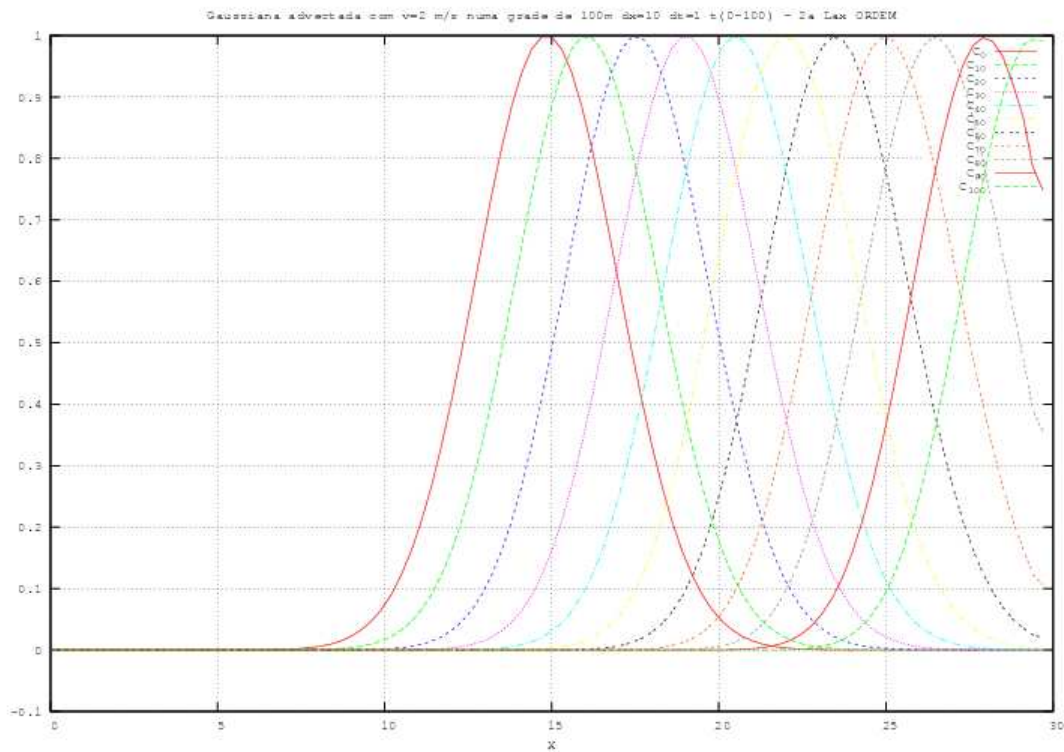


Figura 3.3: Teste de transporte unidimensional utilizando método de Lax-Wendroff e condições de contorno.

A partir destes testes, partimos para a generalização da implementação em duas dimensões. Na figura a seguir apresentamos os resultados destas implementações, utilizando uma distribuição gaussiana como função a ser testada.

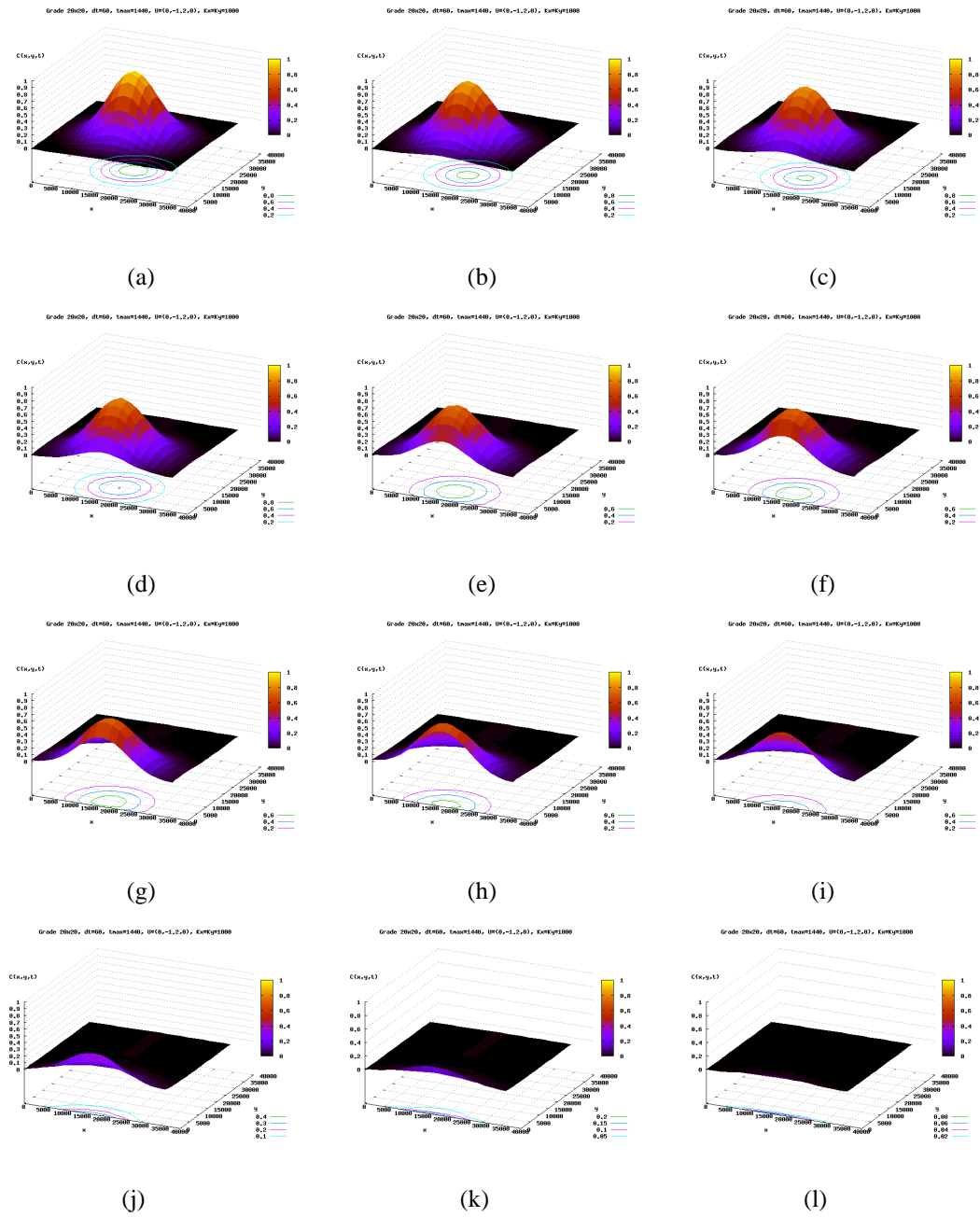


Figura 3.4: Testes de simulação de transporte puramente advectivo 2D utilizando uma distribuição gaussiana como função teste.

Como próximo passo, testamos a *difusão pura*, ou seja a equação com apenas os termos de difusão em cada uma das duas dimensões. Observamos o resultado deste teste na figura a seguir:



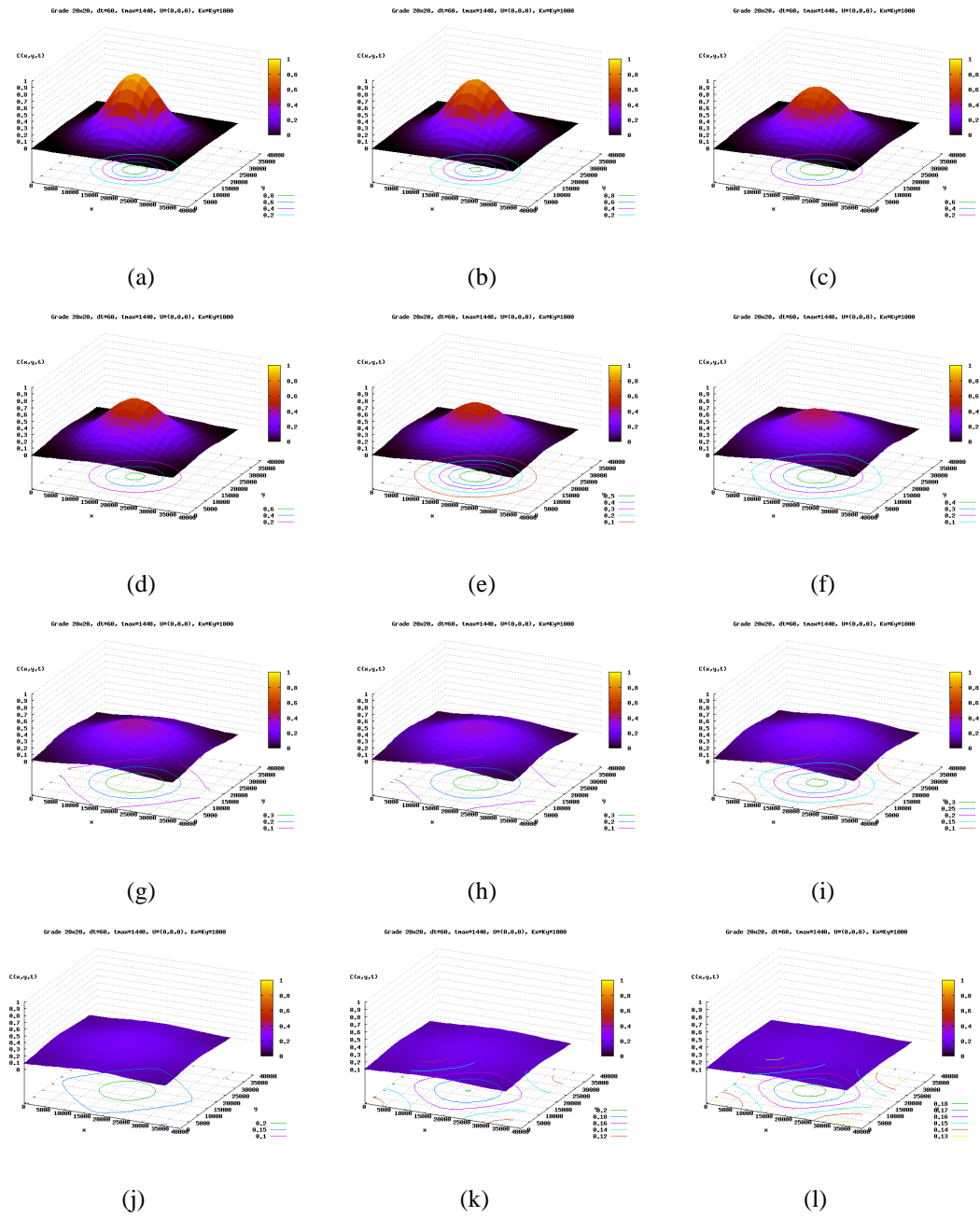


Figura 3.5: Testes de simulação de transporte puramente difusivo 2D utilizando uma distribuição gaussiana como função teste.

Nas figuras 3.4 e 3.5 podemos observar que nossa implementação através da discretização das equações de transporte e difusão tiveram o comportamento esperado, ou seja, a função de distribuição foi transportada ao longo do domínio mostrado na primeira figura e apenas redistribuída no domínio mostrado na segunda.

Como próximo teste, utilizamos a equação de *difusão pura* e posteriormente a equação de transporte para testar o comportamento da conservação de massa no domínio. As figuras a seguir mostram os resultados obtidos com este teste:

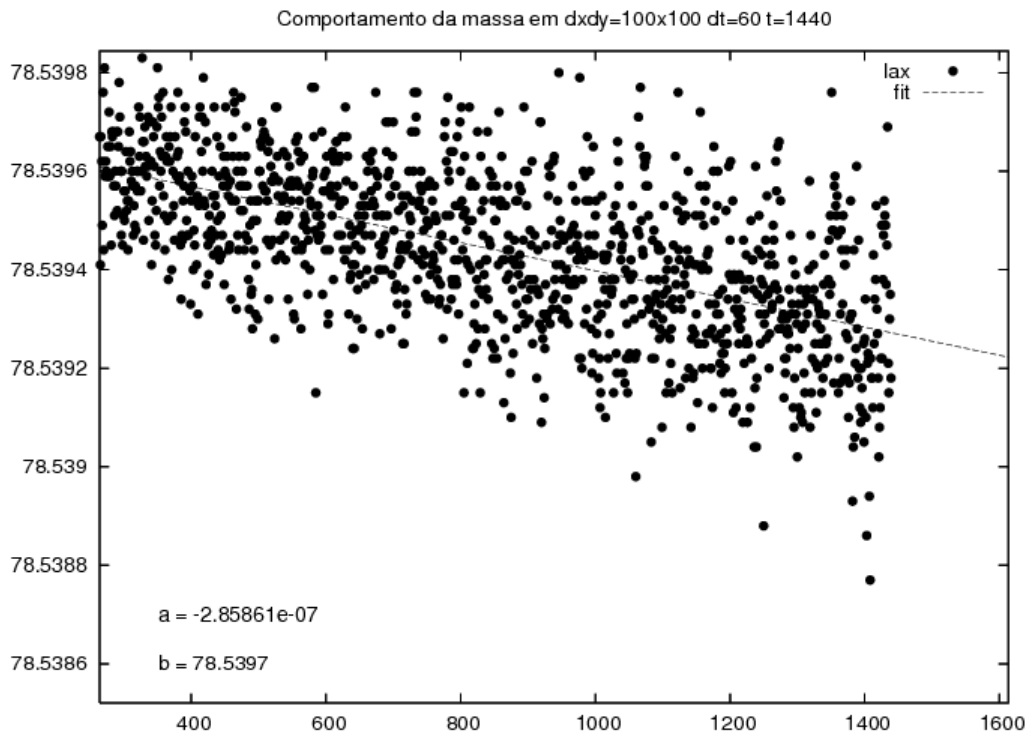


Figura 3.6: Teste de comportamento da massa (eixo vertical) em função do tempo (eixo horizontal) com difusão pura 2D.

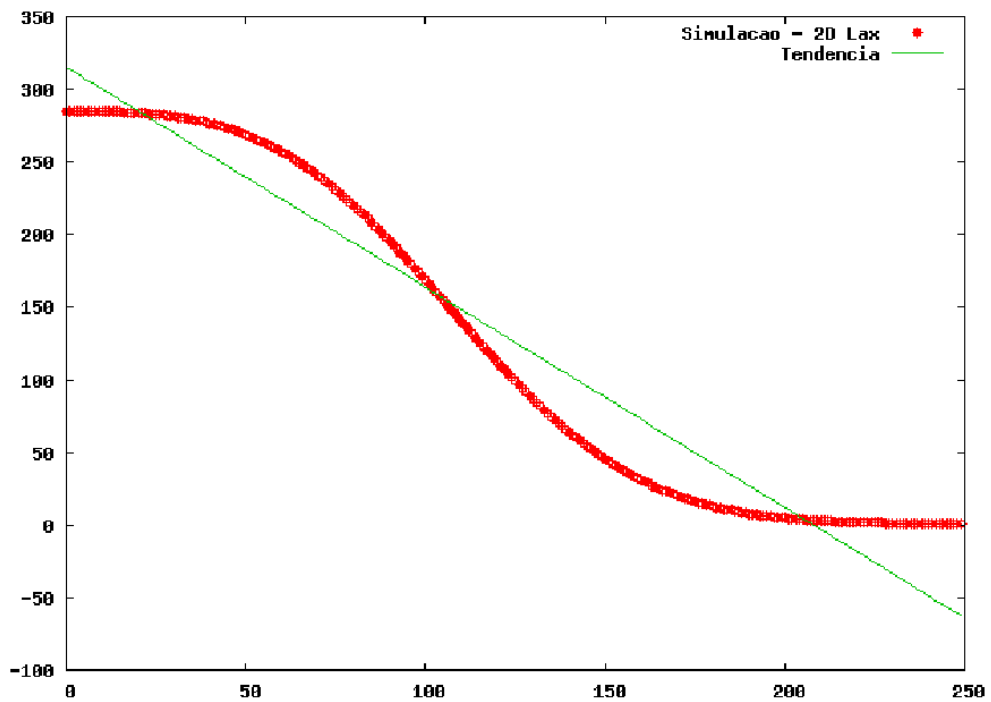


Figura 3.7: Teste de comportamento da massa (eixo vertical) em função do tempo (eixo horizontal) com transporte 2D.

Observando a figura 3.6, percebemos que a implementação dos discretizações efetuadas resultam em um bom método, pois, a quantidade total de massa no domínio teve um decréscimo da ordem de  $10^{-4}$  dentro do período de simulação de 24 horas. Embora o ideal esperado para difusão pura fosse apenas a redistribuição da massa em cada ponto do domínio, é aceitável que haja um decréscimo, pois na implementação estamos utilizando aproximações por diferenças finitas, ou seja, utilizando apenas alguns termos da expansão em série de Taylor. Na figura 3.7, o comportamento também foi o esperado, ao passo que a distribuição é transportada para fora do domínio a massa total do domínio tende a zero até ser totalmente advectadas para fora do mesmo.

Nosso próximo procedimento foi implementar e testar a equação em três dimensões. Nesta etapa da implementação, utilizamos uma equação com termos de transporte e difusão e também introduzimos um termo de fonte com emissão contínua. Para o transporte, implementamos um valor distinto para cada componente de vento em cada plano vertical. Nosso objetivo com este teste é observar se a implementação em três dimensões resulta em um transporte diferente em cada plano de acordo com os valores de cada componente de vento escolhidas para cada um deles. As figuras a seguir mostram os resultados deste teste.

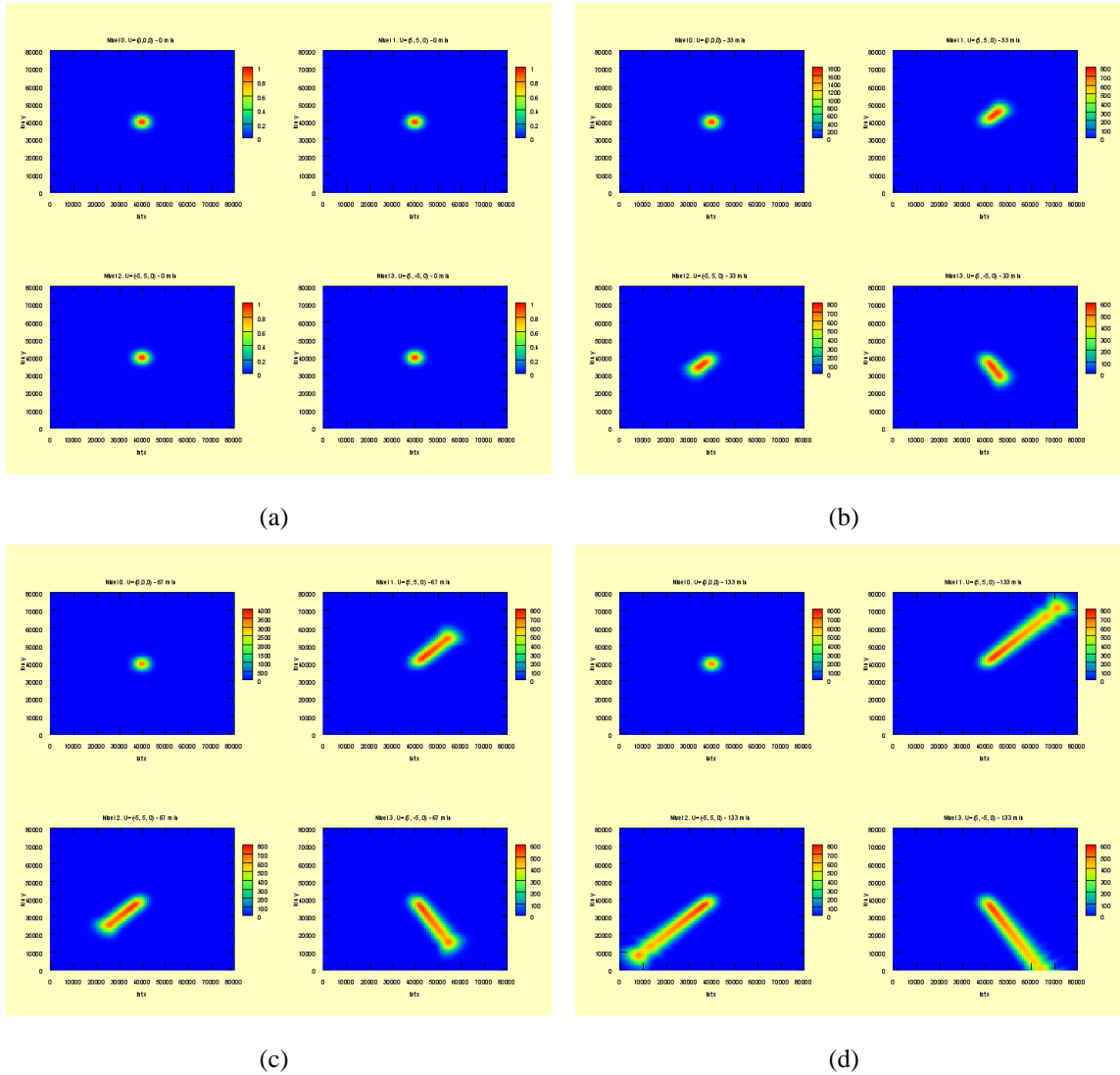


Figura 3.8: Testes de simulação transporte 3D

Nas figuras 3.8(a) até 3.8(d), observamos que a implementação tridimensional resultou no comportamento esperado. Na subfigura 3.8(a) temos uma emissão (contínua) de uma quantidade genérica em quatro níveis de altura no tempo inicial e as subfiguras seguintes 3.8(b) até 3.8(d), representam tempos posteriores da simulação. Cada uma destas subfiguras mostram (da esquerda para a direita e de cima para baixo) o comportamento da dispersão utilizando distintos e controlados valores para o vento em cada nível, sendo sempre o primeiro nível com campo de vento nulo. Como dito antes, criamos estas condições (forçadamente e irrealis) para analisar se a implementação do modelo executa corretamente, ou seja, não haver transporte no primeiro nível e ter transporte em cada nível de acordo com o sentido do transporte especificado artificialmente.

Nossa próxima etapa é a implementação do campo realístico de vento, que será discutido em detalhes na seção 3.5 por se tratar de uma metodologia que exigiu um estudo na

concepção de *Análise Objetiva* buscando um método para implementar o acoplamento dos dados (vento) de um modelo regional de previsão de tempo ao **ZIMORA**.

### 3.4 Parametrização da Camada Limite Planetária

Para a estimativa dos coeficientes de difusividade que aparecem nas equações numéricas (por exemplo, a expressão 3.34), foi utilizada a parametrização da camada limite proposta por Moraes [41]. Esta parametrização está baseada na suposições de Hanna [15] de que a eficiência da mistura do ar é completamente determinada pelas propriedades do espectro de velocidade vertical e que os parâmetros  $\sigma_w$  e  $\kappa_m$  são suficientes para descrever este espectro.

Então, da análise dimensional, o coeficiente de difusividade turbulenta vertical  $K_z$  pode ser escrito como:

$$K_z = c_1 \sigma_w \kappa_m^{-1}, \quad (3.36)$$

onde  $c_1$  é uma constante igual 0,09.

A partir de medidas tomadas na camada superficial e utilizando hipóteses de escala local, foi obtido, para o coeficiente de difusividade turbulenta em toda a camada limite seguindo expressões para regimes estáveis e convectivos:

$$K_z = c_1 z u_* (1 - z)^{\alpha_1/2} \frac{1 + (z/L)(1 - z/h)^{\alpha_2 - 1,5\alpha_1}}{0,27 + 0,50(z/L)(1 - z/h)^{\alpha_2 - 1,5\alpha_1}}, \quad (3.37)$$

$$K_z = 0,5z w_* (1 - z/z_i). \quad (3.38)$$

Os coeficientes de difusividade turbulenta laterais são estimados como  $0,1w_*z_i$  em condições instáveis e como  $2K_{mz}$  em condições neutras e estáveis, onde  $K_{mz}$  é o valor máximo de  $K_z$ .

### 3.5 Esquema de interpolação para o campo de vento

A qualidade dos resultados obtidos com modelos de dispersão atmosférica depende tanto da complexidade do modelo quanto da certeza dos dados de entrada, onde esta última pode ser aprimorada através da assimilação de dados de medidas quando disponíveis. Contudo, justamente as principais deficiências atuais que ainda têm sido observadas, na maioria

dos MDA, são as imprecisas estimativas da taxa de emissão de material pela fonte e a entrada de dados meteorológicos para a inicialização destes modelos. Outras deficiências não menos importantes, relacionadas à complexidade do MDA, consistem nas metodologias e limitações computacionais aplicadas às técnicas de resolução destes modelos [24].

Com relação a estas deficiências, a metodologia aqui desenvolvida procura até certo ponto minimizá-las, pelo menos no problema de entrada de dados, através do acoplamento de dados meteorológicos.

Esta metodologia consiste em uma técnica para redução de escala da saída de dados de modelos numéricos regionais de previsão de tempo, que consideramos neste caso como pré-processador meteorológico (PPM). Para tanto, o processo matemático de média ponderada é apropriado. Utilizando-se de argumentos heurísticos e procedimentos matemáticos, construímos um sistema de pesos multicamadas simples, para serem utilizados neste processo de média e para aumentar a baixa resolução da saída de dados do PPM, resultando em dados meteorológicos de alta resolução que podem ser acoplados como dados de entrada em modelos de dispersão Eulerianos.

O MDA que desenvolvemos executa sua simulação de dispersão atmosférica com uma resolução espacial maior do que a disponível pelo seu PPM. Então, tornou-se necessário desenvolver um esquema para aumentar a resolução espacial dos dados de entrada. Para tanto, desenvolvemos um esquema multiníveis baseado em médias ponderadas apropriadas para utilizar no MDA, aumentando a baixa resolução do PPM em qualquer resolução espacial múltipla necessária.

Partindo da idéia de *Análise Objetiva*, conforme visto na seção 2.4, a concepção dos métodos de Cressmann [9] e as propostas de Hibbard [18] funcionam muito bem quando aplicadas nos casos em que as observações estão irregularmente espaçadas, porém, no caso de observações regularmente espaçadas (advindas de PPM), estes métodos não são tão efetivos, pois há um custo computacional desnecessários. Além disto, as aproximações subestimam certos valores quando aplicados em interpolação de quatro pontos como, este caso.

O método que propomos é muito semelhante, apenas difere na concepção da expressão que será utilizado como peso na interpolação com médias ponderadas.

Para concebermos esta expressão, por simplicidade vamos considerar apenas dois pontos A e B, representando dois valores conhecidos de uma quantidade escalar qualquer, espaçados por uma distância D entre eles, representando um baixa resolução. Queremos aumentar esta resolução por um fator d. Nós poderemos resolver qualquer novo ponto entre eles utilizando a técnica de médias ponderadas, atribuindo a A e B pesos específicos em cada novo

subintervalo (D/d) na nova escala entre A e B.

A expressão matemática para média ponderada é dada por:

$$\bar{x}_n = \frac{\sum_{i=1}^m x_i w_i}{\sum_{i=1}^m w_i}, \quad (3.39)$$

onde  $x_i$  é a entidade geradora (valor de A ou B),  $m$  é o número de pontos com valores conhecidos (dois neste exemplo, A e B), sendo interpolados e  $w_i$  é o peso associado a cada intervalo onde desejamos resolver.

Para determinar os pesos de A e B, do exemplo acima, precisamos definir duas hipóteses:

1. Do ponto de vista de A, seu peso deverá contribuir ao máximo em sua própria posição, e contribuir ao mínimo na posição do ponto B;
2. Do ponto de vista de B, a regra é a mesma, sua contribuição será máxima em sua própria posição e mínima na posição do ponto A.

Com estas suposições, poderemos formular uma expressão matemática obedecendo tais suposições e que tenha um papel de função peso, tanto aos pesos de A como de B, de tal maneira que não afete os valores de A e B em suas próprias posições e permita a interpolação entre qualquer ponto entre eles.

Generalizando para quatro valores conhecidos, que a partir de agora chamaremos observações,  $U_A$ ,  $U_B$ ,  $U_C$  e  $U_D$ , igualmente espaçados como na figura 3.10. Nós podemos expressar estes pesos como:

$$H_{i,j}^{U_A} = \left( \frac{p - \max(i, j)}{\delta g} \right), \quad (3.40)$$

$$H_{i,j}^{U_D} = 1 - \left( \frac{p - \min(i, j)}{\delta g} \right), \quad (3.41)$$

$$H_{i,j}^{U_B} = H_{p+1-i,j}^{U_D}, \quad (3.42)$$

$$H_{i,j}^{U_C} = H_{j,i}^{U_B}, \quad (3.43)$$

Nas equações 3.40-3.41 os índices  $i, j$  representam o nó da grade com a nova escala de resolução que estamos construindo,  $\delta g$  é o fator de escala espacial que estamos reduzindo da

grade inicial,  $p = \delta g + 1$  e  $H$  representa a função peso para seu respectivo ponto conhecido, denotado pelo sobrescrito em cada novo nó da grade.

Este conjunto de equações, ao serem iterados nos índices  $i, j$ , se tornarão matrizes cujos elementos farão o papel dos  $W_i$  na equação 3.39 que pode ser generalizada para duas dimensões como:

$$\bar{Z}_{i,j} = \frac{\sum_{k=1}^m U_k H_{i,j}^{U_k}}{\sum_{k=1}^m H_{i,j}^{U_k}}. \quad (3.44)$$

Na equação 3.44, o índice  $k$  representa cada ponto com valores observados  $U_A, U_B, U_C$  e  $U_D$  e resolvido para  $i, j$  na faixa de  $p = 1$  a  $p = \delta g + 1$ , nós conseguimos uma matriz  $\tilde{Z}_{5 \times 5}$  que representa os novos nós para a resolução desejada.

O fluxograma da figura 3.9 representa de forma esquemática a entrada de dados oriundos do PPM BRAMS e seus passos no processamento de assimilação e construção de uma nova grade com alta resolução.

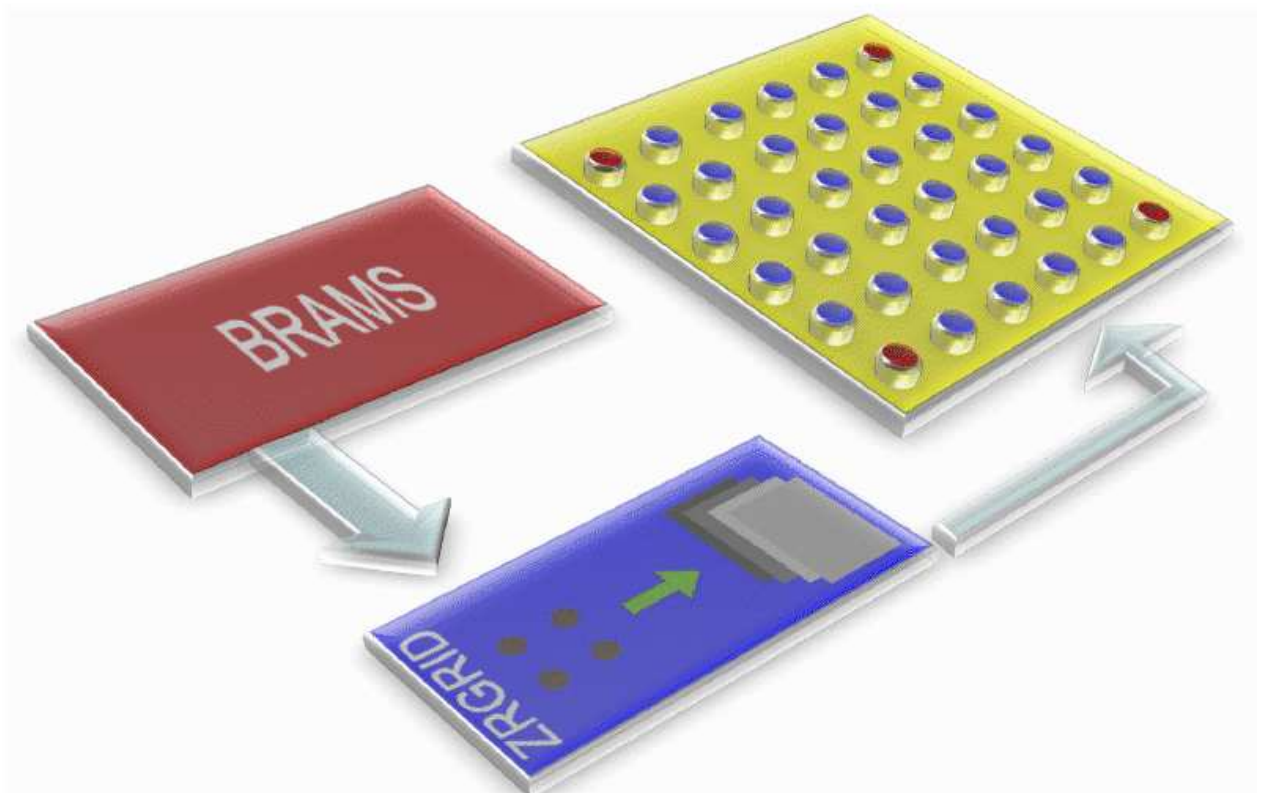


Figura 3.9: Fluxograma do módulo de redução de escala do **ZIMORA**.



De uma maneira prática, podemos utilizar um exemplo: O MDA acopla o campo de vento, obtido da saída do PPM, com resolução espacial de 20 km. Então, através do método descrito, ele aumenta esta resolução aplicando uma redução de escala para 5 km. A figura 3.10 mostra uma parcela de uma grade aonde o MDA efetua suas simulações. Os quatro pontos pretos simbolizam os valores observados (obtidos do PPM) e os pontos em cinza representam os valores estimados para a nova resolução espacial obtidos através de nosso esquema de interpolação.

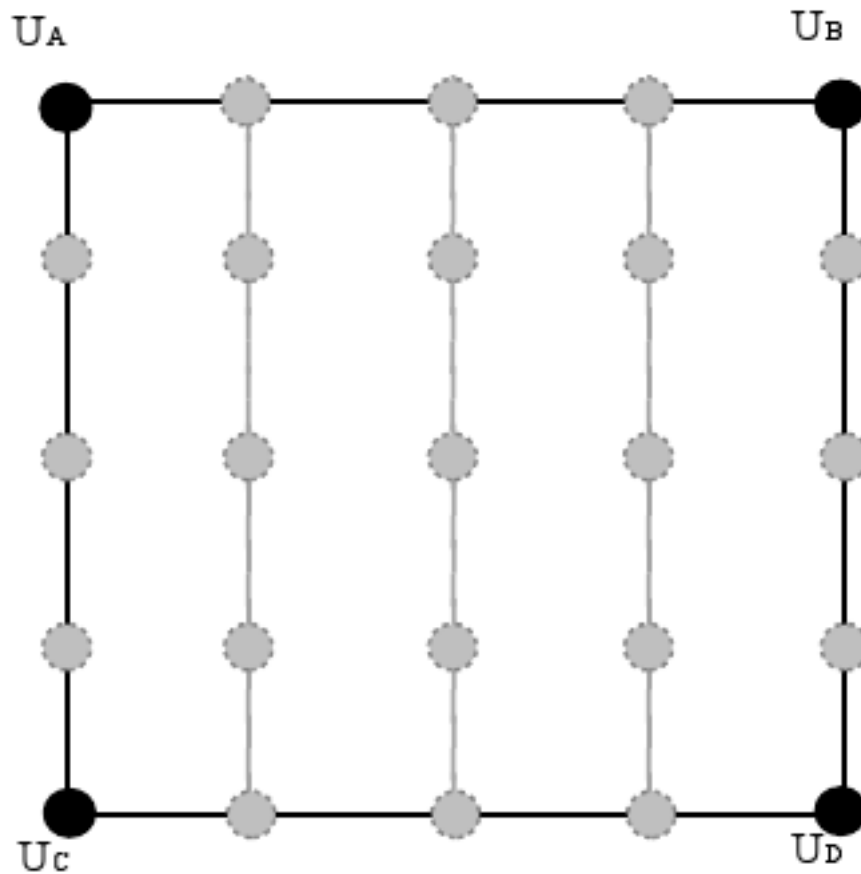


Figura 3.10: Exemplo de uma grade bidimensional com quatro nós de valores conhecidos (preto) e nós que precisam ser apropriadamente interpolados para se obter seus valores (cinza) em uma resolução maior .

Tendo a figura 3.10 como exemplo do esquema de entrada de dados no MDA acoplado um campo de velocidade do vento de um modelo numérico de previsão de tempo PPM como observações, podemos demonstrar um exemplo prático: Sejam os pontos em preto simbolizando as observações  $U_A = 3.629$ ,  $U_B = 3.630$ ,  $U_C = 4.025$  e  $U_D = 3.994$  representando a velocidade do vento em  $m/s$  em uma resolução espacial de 20 Km. Para resolver os pontos (cinza) com uma nova resolução de grade espacial de 5 km, o MDA primeiramente deve

encontrar o fator de redução de escala para sua assimilação:

$$\delta g = \frac{20km}{5km} = 4.$$

Aplicando este valor nas equações 3.40-3.41 e iterando  $i, j$  de  $p = 1$  a  $p = \delta g + 1$ , ele obterá  $p - 1$  matrizes  $\tilde{H}_{p \times p}$  que chamaremos de camada e cujos valores são mostrados nas tabelas a seguir:

Calculando a primeira camada com os pesos para a observação  $U_A$  em cada novo ponto de grade, obteremos os seguintes valores da tabela 3.1:

Tabela 3.1: Valores para a primeira camada de pesos  $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_A}$

1.000	0.750	0.500	0.250	0.000
0.750	0.750	0.500	0.250	0.000
0.500	0.500	0.500	0.250	0.000
0.250	0.250	0.250	0.250	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Calculando a segunda camada com os pesos para a observação  $U_B$  em cada novo ponto de grade, obteremos os seguintes valores da tabela 3.2:

Tabela 3.2: Valores para a segunda camada de pesos  $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_B}$

0.000	0.250	0.500	0.750	1.000
0.000	0.250	0.500	0.750	0.750
0.000	0.250	0.500	0.500	0.500
0.000	0.250	0.250	0.250	0.250
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Calculando a terceira camada com os pesos para a observação  $U_C$  em cada novo ponto de grade, obteremos os seguintes valores da tabela 3.3:

Tabela 3.3: Valores para a terceira camada de pesos  $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_C}$

0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.250	0.250	0.250	0.250	0.000
0.500	0.500	0.500	0.250	0.000
0.750	0.750	0.500	0.250	0.000
1.000	0.750	0.500	0.250	0.000

Finalmente calculando a quarta camada com os pesos para a observação  $U_D$  em cada novo ponto de grade, obteremos os seguintes valores da tabela 3.4:

Tabela 3.4: Valores para a quarta camada de pesos  $\tilde{H}_{5 \times 5}^{U_D}$

0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.250	0.250	0.250	0.250
0.000	0.250	0.500	0.500	0.500
0.000	0.250	0.500	0.750	0.750
0.000	0.250	0.500	0.750	1.000

Utilizando estas camadas dentro da equação 3.44, sendo  $k$  relativo a cada observação  $U_A, U_B, U_C$  e  $U_D$ , iterando  $i, j$  de  $p = 1$  a  $p = \delta g + 1$ , será obtida a camada representada pela matriz  $\tilde{Z}_{5 \times 5}$ , cujos elementos serão os novos valores para os nós com resolução espacial de 5 km mostrados nas tabela a seguir:

Tabela 3.5: Valores finais da grade do MDA com o campo de velocidades do vento com alta resolução interpolado pelo esquema de multi camadas de medias ponderadas. camada  $\tilde{Z}_{5 \times 5}$

3.629	3.629	3.630	3.630	3.630
3.728	3.756	3.756	3.757	3.721
3.827	3.822	3.820	3.817	3.812
3.926	3.888	3.883	3.878	3.903
4.025	4.017	4.010	4.002	3.994

O mesmo procedimento é aplicado, repetido, até o último ponto de grade do PPM, sempre em grupos de quatro observações. A generalização pode ser aplicada na vertical, mudando apenas a resolução espacial tanto no PPM quanto na grade do MDA, tal que no final do processo ele terá construído uma grade com hipercélulas de volume 5km x 5km x 100m.

Nas figuras seguintes, podemos observar o efeito desta metodologia em uma simulação teste.

Nas figuras (3.11, 3.13, 3.15, 3.17 e 3.19), que representam alguns testes de simulação, utilizamos um campo de vento de baixa resolução (20 km) exatamente como se encontra hoje a saída operacional do modelo regional de previsão numérica da UFSM.

Em termos de comparação, as figuras (3.12, 3.14, 3.16, 3.18 e 3.20) mostram as mesmas

simulações. Nestas, aplicamos a metodologia descrita para aumentar a resolução para 5 km; junto a forma da pluma, estão representados os vetores indicando a magnitude e direção do vento a cada simulação. Com esta representação podemos observar a boa concordância de deslocamento da pluma na simulação.

Em ambos os casos, as densidades nas isoregiões são referentes a uma emissão genérica, por isto sem unidade de escala, exceto o campo de vento que tem sua escala indicada pela seta no canto inferior direito. O objetivo destas figuras é apenas mostrar a forma e comportamento da movimentação da pluma em função do campo de vento ao decorrer do tempo a cada simulação .

Observamos em todos os casos, que a aplicação e utilização do esquema proposto, suaviza significativamente a forma da pluma de concentração. Esta suavização se deve à maior resolução, obtida através da assimilação sobre os dados do campo de vento e coeficientes de difusividades do PPM (BRAMS).

Este esquema permite que as equações, empregadas na resolução dos processos de transporte, tenham suas aproximações mais apuradas, conseqüentemente melhorando a qualidade e confiabilidade da simulação.

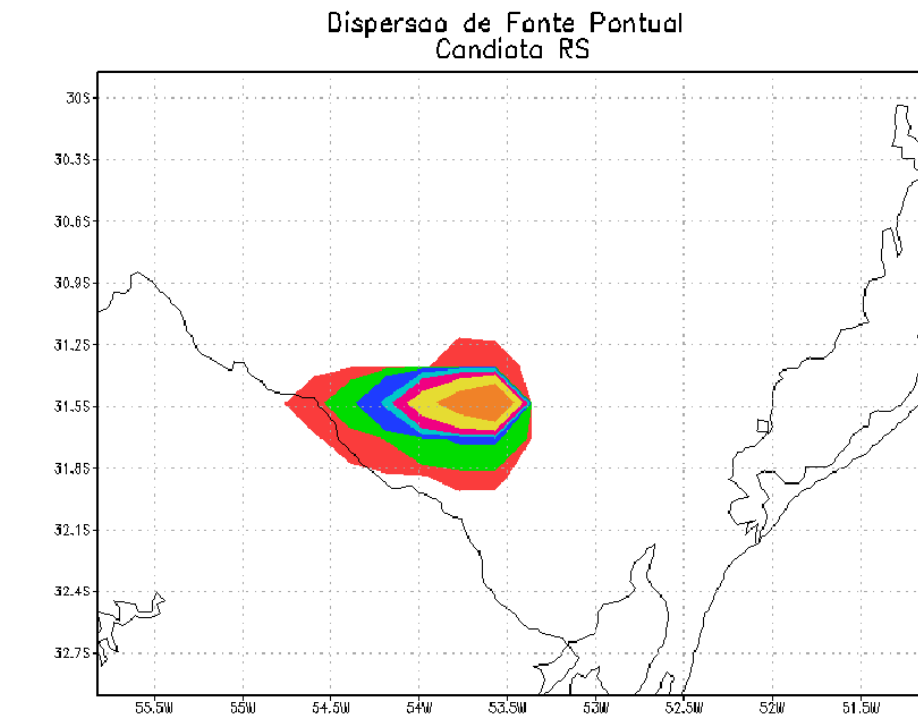


Figura 3.11: Simulação de 1h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações

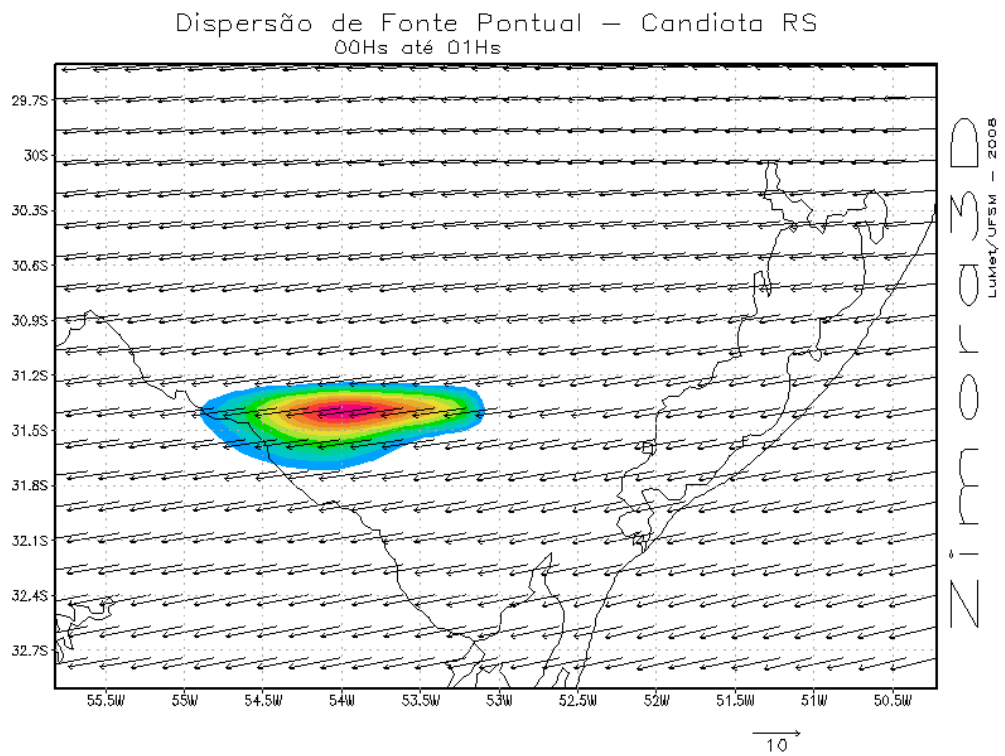


Figura 3.12: Simulação de 1h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas.

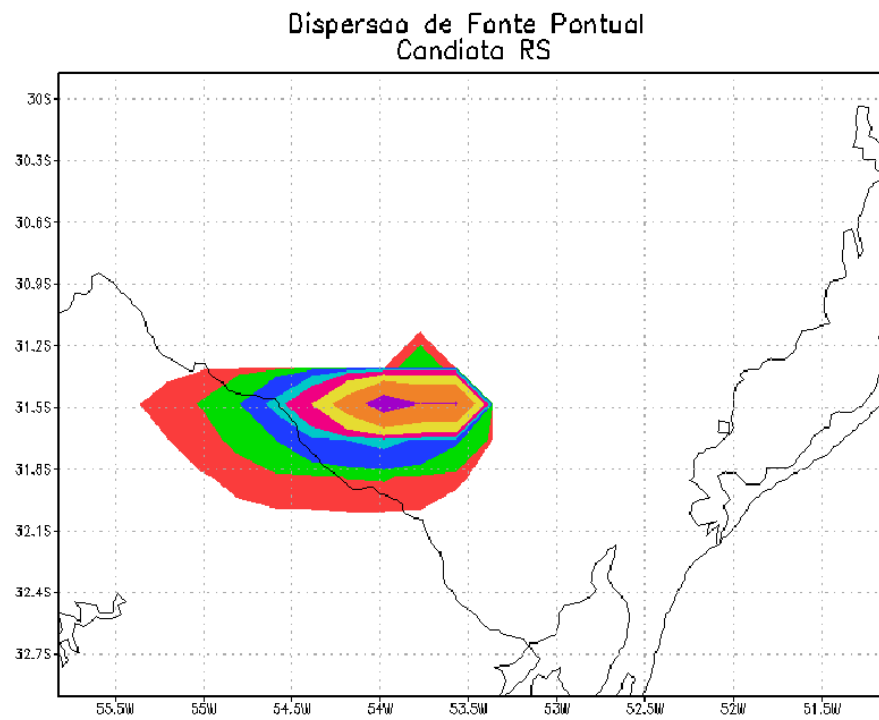


Figura 3.13: Simulação de 2h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações.

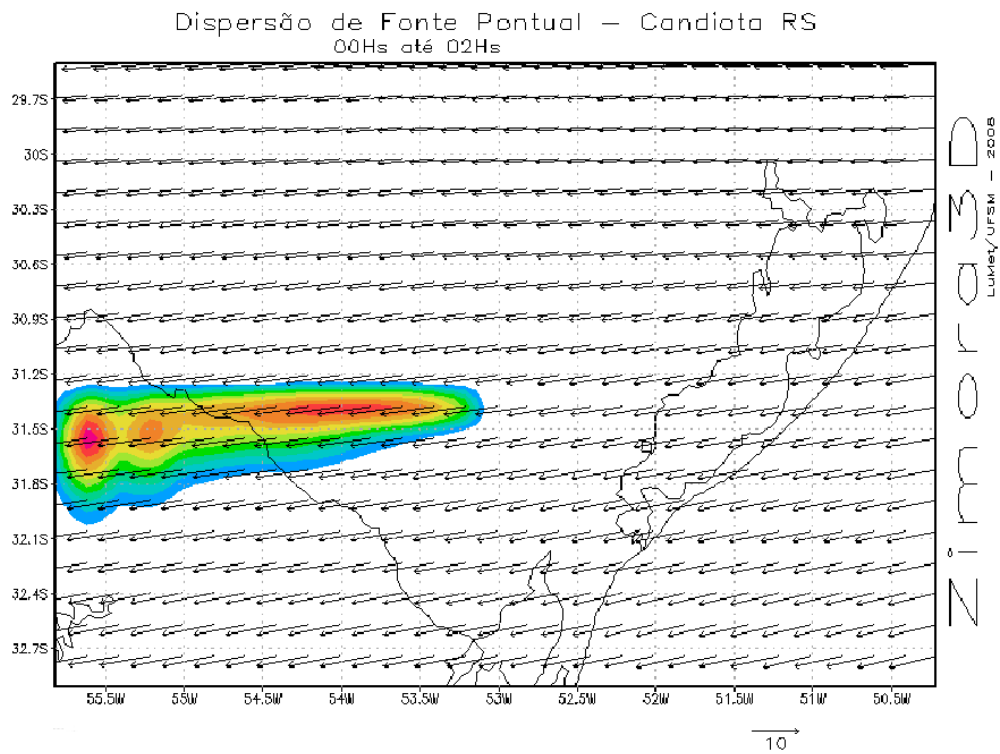


Figura 3.14: Simulação de 2h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas.

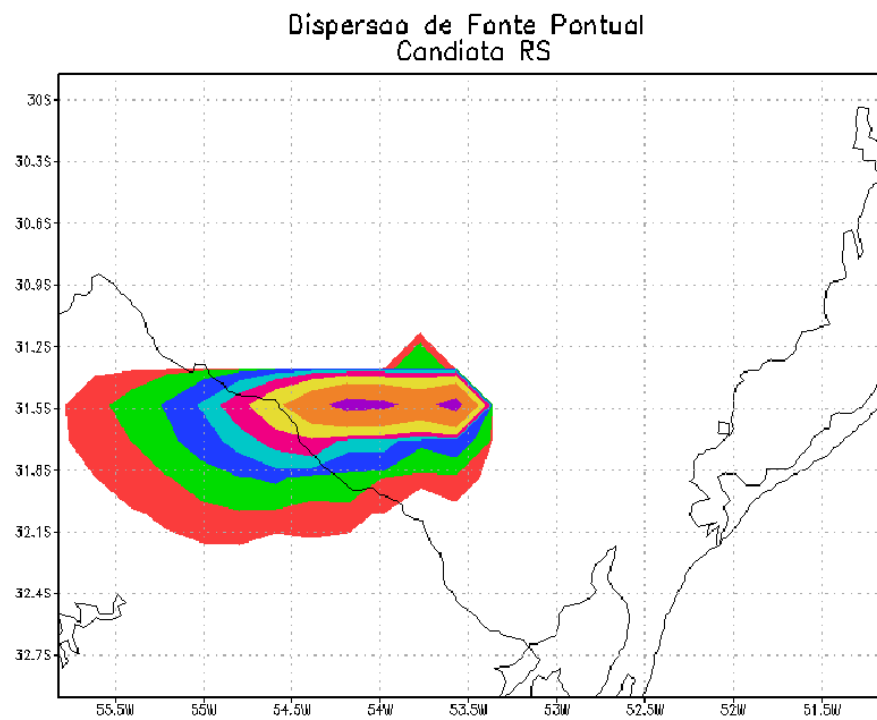


Figura 3.15: Simulação de 3h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações.

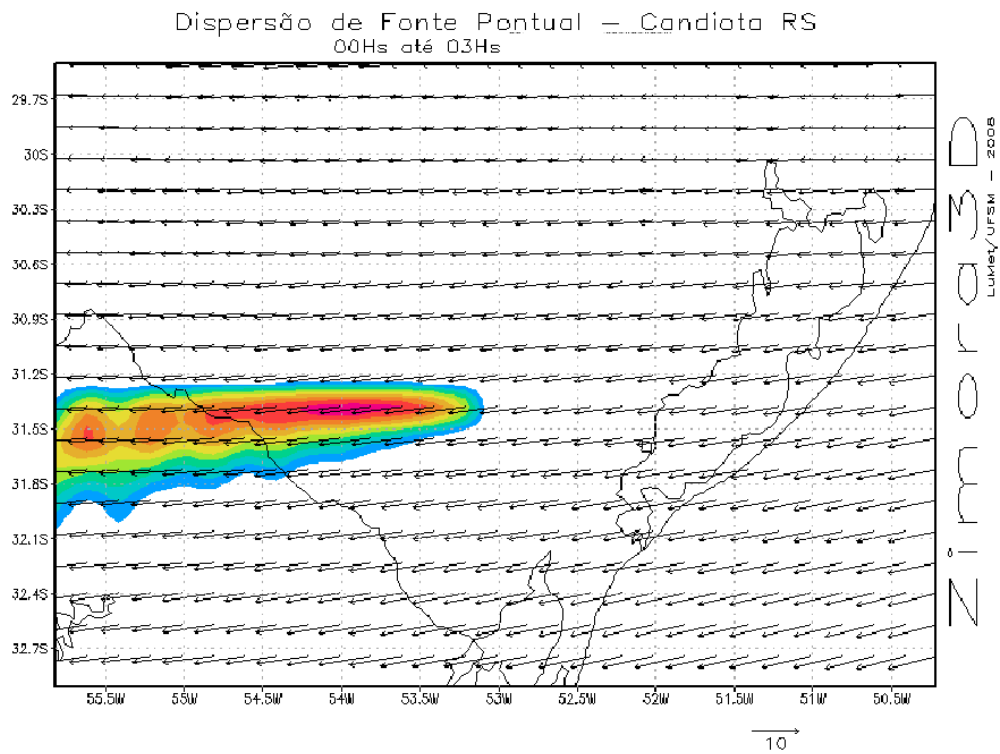


Figura 3.16: Simulação de 3h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas.

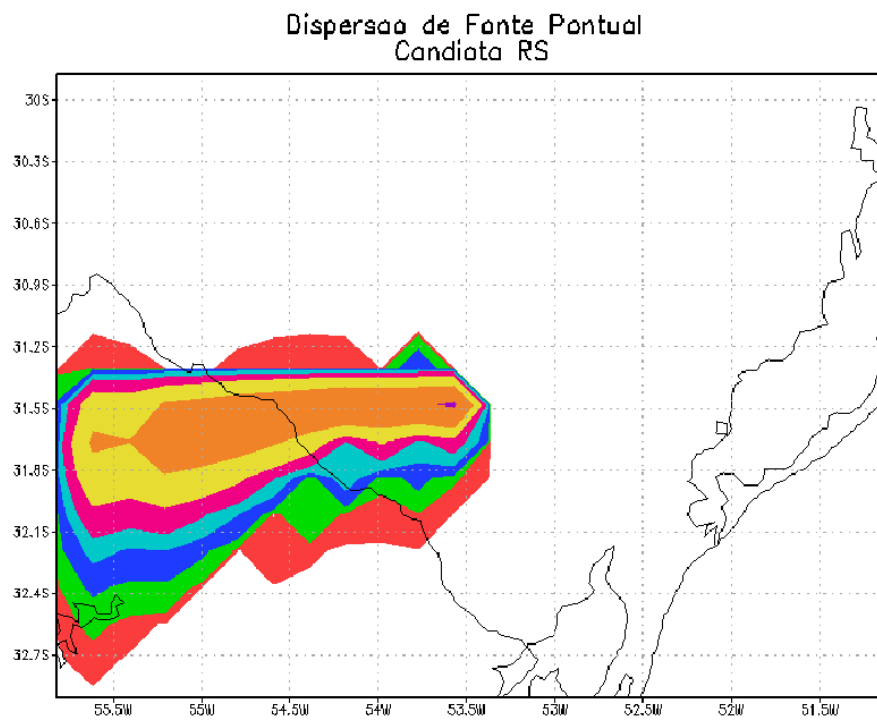


Figura 3.17: Simulação de 6h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações.

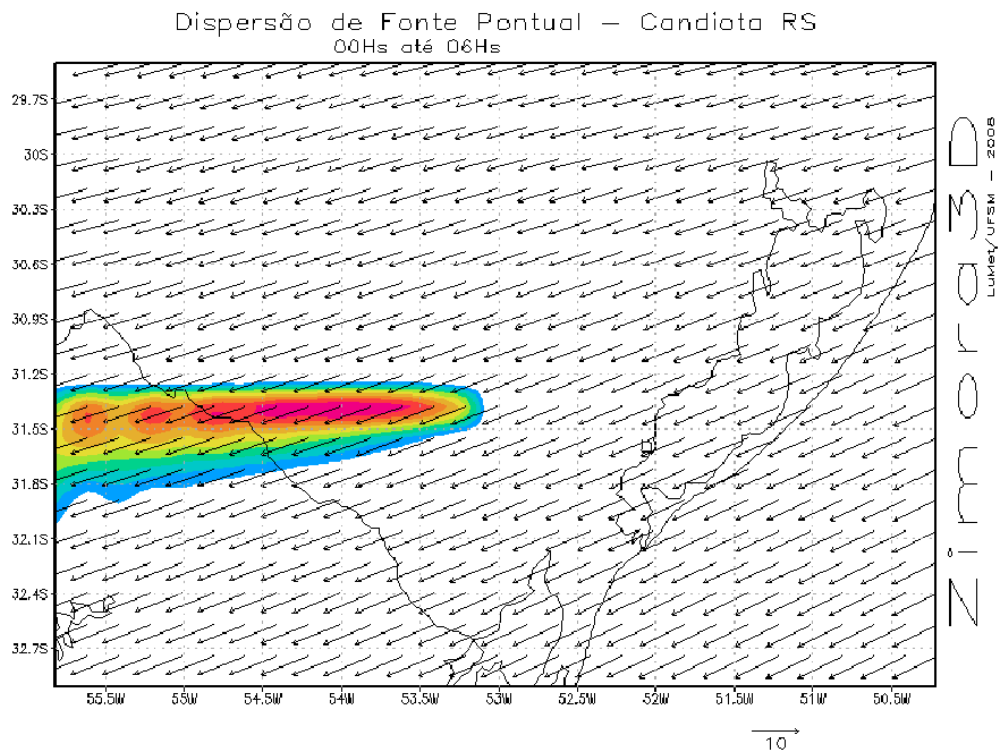


Figura 3.18: Simulação de 6h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas.

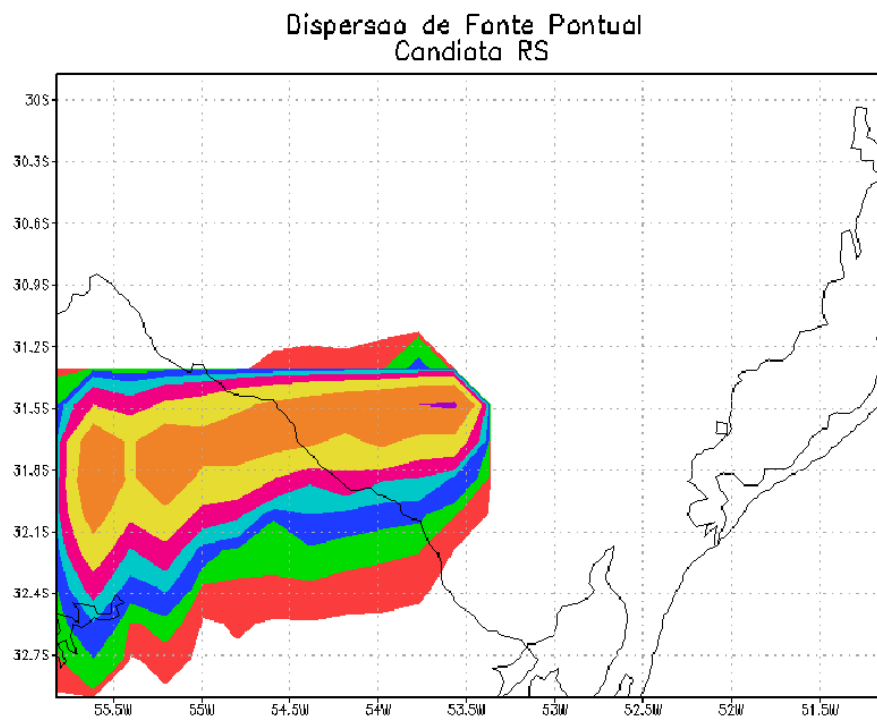


Figura 3.19: Simulação de 7h do dia 08/10/2008, primeiras aproximações.



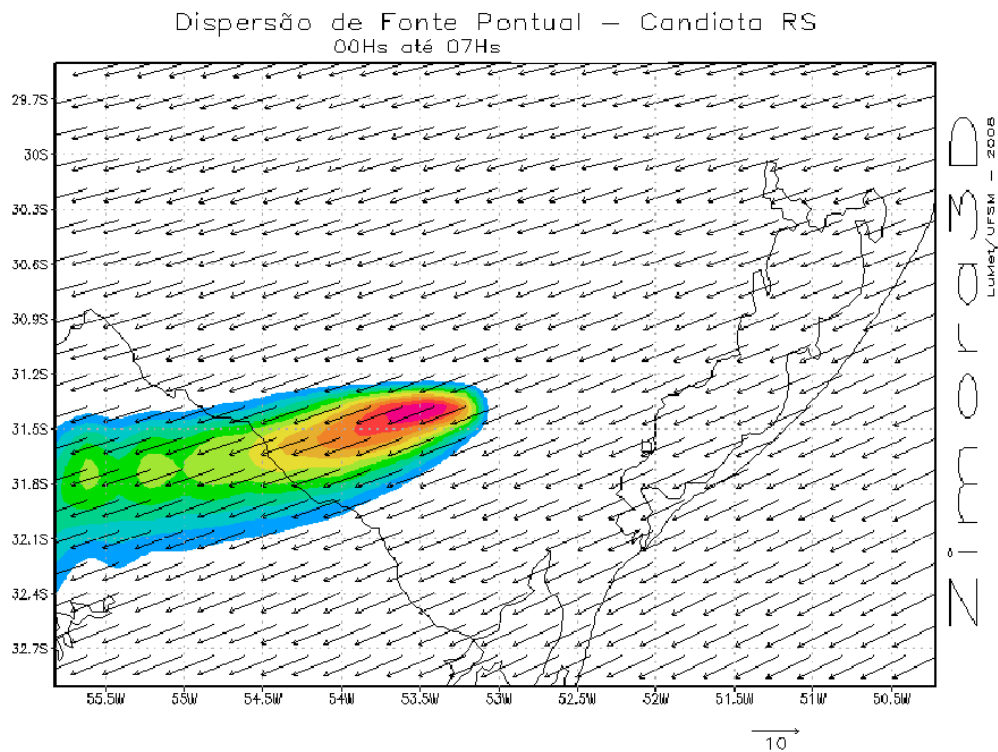


Figura 3.20: Simulação de 7h do dia 08/10/2008 utilizando esquema de multicamadas de médias ponderadas.

### 3.6 Fonte dos dados e Procedimento de validação

No desenvolvimento do **ZIMORA** foram utilizados dois tipos de fonte de dados. Para estimativa dos coeficientes de difusividade e também sua validação foram utilizados dados coletados em campanha experimental. Para o campo de vento, dados de pós-processamento de modelos numéricos regionais de previsão de tempo. O modelo numérico dinâmico usado como fonte de dados, considerado como pré-processador meteorológico (PPM), foi uma versão brasileira do *Regional Atmospheric Modelling System* (CSU-RAMS) desenvolvido pela *Colorado State University* (USA) e adaptado para as condições brasileiras, conhecido como BRAMS, mais informações sobre este modelo encontram-se no apêndice C.

Em uma breve descrição sobre o sítio experimental de onde se originaram os dados utilizados, citamos o experimento conduzido na primavera de 2007 [55] próximo à usina termelétrica Presidente Médici (UTPM) no município de Candiota, no sul do Brasil próxima à fronteira com o Uruguai. Em Candiota localiza-se o maior complexo termoelétrico a carvão operado pela Companhia de Geração Térmica de Energia Elétrica (**CGTEE**). Atualmente, encontra-se em funcionamento a Usina Presidente Médici - Candiota II com 446

MW de potência instalada. A curto prazo, está previsto um aumento da capacidade (mais de 350 MW) (Candiota III) e a instalação da Usina Termoelétrica Seival, de 500 MW, de responsabilidade da Companhia de Pesquisa e Lavra Mineral (**COPELMI**). Esta Companhia, juntamente com a Companhia Riograndense de Mineração (**CRM**), detém as concessões de lavra de carvão mineral na região de estudo. Além disso, existe a previsão da instalação de outra termoelétrica (entre 400 e 600 MW de potência) através da *Shandon Mining Group* (China) e da **CRM** (Comunicação pessoal, 2001). Nesta área, encontra-se ainda a maior reserva carbonífera brasileira (jazida Grande Candiota) com aproximadamente 12 bilhões de toneladas, representando cerca de 38% das reservas de carvão do Brasil.

Esta usina termelétrica pode ser considerada como um "laboratório ideal", já que ela é a maior fonte de emissão em uma grande área e está localizada em uma região de topografia praticamente plana. A chaminé da usina termelétrica possui 150 metros de altura e a taxa de emissão, por exemplo, de  $SO_2$ , é continuamente monitorada. Além de outros, o objetivo da campanha foi coletar um conjunto compreensivo de dados de difusão e dispersão meteorológicos para serem utilizados para avaliar modelos numéricos de dispersão. Este sítio está localizado nas coordenadas (31,40 S 53,70 O) a 250 metros acima do nível do mar e têm sido utilizado em um grande número de experimentos relacionados à pesquisa sobre camada limite planetária. Mais detalhes sob o ponto de vista micrometeorológico pode ser encontrado em Moraes (2000).

Dentre os dados experimentais, que compreenderam um conjunto de medidas de velocidade do vento, direção do vento, dados turbulentos, temperatura, umidade, pressão, radiação solar e sondagens da estrutura da camada limite através de medidas de balão cativo, foram utilizados os dados turbulentos de campo de vento coletados em alta frequência (10Hz) para calcular os parâmetros micrometeorológicos  $u_*$ ,  $w_*$  e  $L$ . Para a estimativa da rapidez do vento, direção do vento e temperatura do ar, foram utilizados os dados coletados em baixa frequência (1Hz). As sondagens verticais utilizando balão cativo, efetuadas a cada 2 horas, forneceram informações a respeito da evolução da altura da camada limite planetária. Os dados de concentração de  $SO_2$  ao nível da superfície foram tomados à 6,8 quilômetros ao sul da fonte, compreendendo conjuntos de dados de 3 em 3 horas.

O procedimento para avaliar a performance do modelo **ZIMORA** é feito a partir da análise estatísticas dos dados de concentração. Isto é conduzido com base em um conjunto e índices estatísticos disponíveis na literatura [16]. Este tipo de análise server para quantificar as diferenças entre as concentrações simuladas pelo modelo numérico e as observadas experimentalmente. A seguir mostramos cada um destes índices.

Erro quadrático médio normalizado:

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_s)^2}}{\overline{C_o C_s}} \quad (3.45)$$

onde  $C_o$  é a concentração observada e  $C_s$  é a concentração obtida da simulação. Este índice indica o erro quadrático médio da concentração simulada em relação a observada experimentalmente. Varia entre ( $0 < NMSE < 1$ ) e quanto mais próximo de zero, menor é este erro.

Desvio fracional:

$$FB = \frac{2(\overline{C_o} - \overline{C_s})}{(\overline{C_o} + \overline{C_s})}. \quad (3.46)$$

Este índice indica a tendência do modelo em superestimar ou subestimar as concentrações observadas experimentalmente. Sua variação é entre ( $-2 < FB < 2$ ), e revela se a concentrações médias simuladas superestimam ( $FB < 0$ ) ou subestimam ( $FB > 0$ ) as concentrações médias observadas. Quando  $FB$  tende a zero,  $C_s$  tende a  $C_o$ .

Desvio fracional padrão:

$$FS = \frac{2(\overline{\sigma_o} - \overline{\sigma_s})}{(\overline{\sigma_o} + \overline{\sigma_s})}, \quad (3.47)$$

onde  $\sigma_o$  é o desvio padrão das concentrações observadas experimentalmente e  $\sigma_s$  é o desvio padrão das concentrações simuladas. Varia entre ( $-2 < FS < 2$ ) e indica se a dispersão simulada em torno da concentração média é superestimada ou subestimada. Se  $\sigma_o < \sigma_s$ , o poluente simulado está mais disperso que o observado e vice-versa. Contudo, esse parâmetro deve ser analisado com restrições, pois podem existir casos onde  $C_o \neq C_s$  e  $\sigma_o = \sigma_s$ .

Coefficiente de correlação:

$$R = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_s - \overline{C_s})}}{\sigma_o \sigma_s}. \quad (3.48)$$

Este índice descreve o grau de associação ou concordância entre as concentrações simuladas e experimentais. A variação deste índice é ( $-1 < R < 1$ ). Quanto maior a qualidade do ajuste linear, mais próximo de  $+1$  ou  $-1$  estará o valor de  $R$ . Não havendo uma relação linear entre as concentrações, tem-se  $R = 0$ . Se  $C_s = C_o$ , significa que as concentrações simuladas estão perfeitamente relacionadas às concentrações observadas. No entanto este parâmetro

deve ser analisado com cautela, pois existem casos em que  $C_s \neq C_o$  e  $R = \pm 1$ .

Fator de 2:

$$FA2 = \frac{1}{2} < \frac{C_o}{C_s} < 2. \quad (3.49)$$

O índice *FA2* descreve o percentual valores que se encontram dentro de um erro de até 100%. Varia entre ( $0 < FA2 < 1$ ) e quanto mais próximos de 1, melhores estão os resultados.

De maneira geral, a respeito dos índices estatísticos descritos nas expressões 3.45, 3.46, 3.47, 3.48 e 3.49, podemos dizer que os resultados serão melhores quanto mais próximos de zero forem os valores de NMSE, FB e FS e, ainda, quanto mais próximos de 1 (um) forem os valores de R e FA2.

## 4 Resultados e discussões

Neste capítulo o desempenho do ZIMORA é apresentado. A comparação entre valores previstos pelo modelo e aquelas amostradas em estações de qualidade do ar é feita para verificar a capacidade do modelo em prognosticar a concentração de contaminantes emitidos na atmosfera.

O procedimento de validação aqui descrito pode ser sumarizado no esquema abaixo.

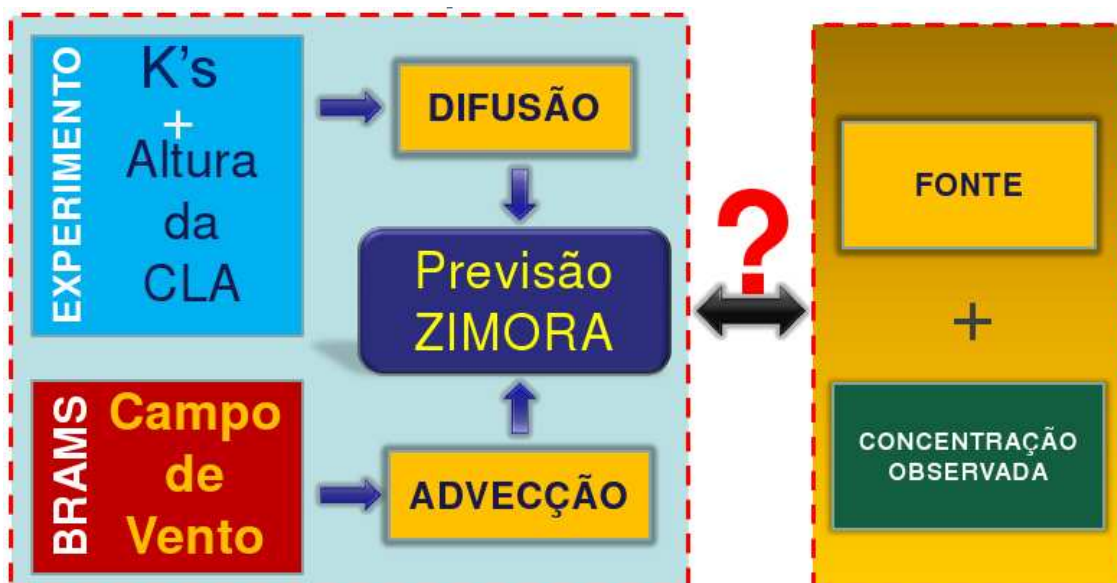


Figura 4.1: Esquema de validação do ZIMORA.

A caixa com borda pontilhada à esquerda contém os passos que foram seguidos para que o modelo numérico gere um campo de concentração fictício, através da entrada de dados de observações de campo para determinar a altura da CLA, os coeficientes de difusividade e o campo de vento de um modelo numérico de previsão de tempo. A caixa pontilhada à direita indica os dados de entrada para validação do modelo. Na descrição desta metodologia vamos iniciar pela caixa da direita.

As concentrações usadas para testar e validar o modelo são as concentrações superficiais (microgramas por metro cúbico) de dióxido de enxofre ( $SO_2$ ) emitidos pela Usina

Termoelétrica Presidente Médici, localizada no sul do estado do Rio Grande do Sul. Esta usina emite, continuamente, este poluente a uma taxa constante de, aproximadamente, 1000 gramas por segundo. Este poluente é lançado na atmosfera por uma chaminé de 150 metros de altura, que possui um diâmetro de 5 metros, a uma velocidade de 20 m/s e com uma temperatura de 430 Kelvin. O poluente é amostrado em duas estações automáticas de monitoramento de qualidade do ar instaladas a sudoeste da fonte (estação Três Lagoas - 3L) e a oeste da fonte (estação Candiota - Can). Três Lagoas situa-se, em linha reta, a uma distância de 12 quilômetros da Térmica enquanto a estação Candiota está, em linha reta, a uma distância de 2 quilômetros. O poluente é amostrado continuamente e a concentração registrada é a concentração acumulada em intervalos de 3 horas. Então, para efeito de comparação, as concentrações do ZIMORA são integradas em um período também de 3 horas.

A fotografia a seguir (figura 4.2), assim como a figura 4.3 extraída do Google Earth ilustram a fonte e a localização das estações de monitoramento.



Figura 4.2: Usina termelétrica presidente Médici - Vista do aeroporto, Candiota - RS



Figura 4.3: Imagen Google da região das estações, Candiota - RS. **Fonte:Google Earth**

A comparação entre os dados coletados nestas estações com os previstos pelo modelo foi efetuada para um total de oito dias do ano de 2007. Neste período um experimento micrometeorológico foi realizado na região em que a UTPM se localiza. O objetivo deste experimento foi determinar as características da CLP de modo a possibilitar a sua representação, de modo realista, em modelos de dispersão.

Neste experimento medidas de turbulência foram feitas com sensores de alta frequência de amostragem assim como o uso de balão cativo também foi adotado. Das medidas de turbulência buscou-se uma parametrização física dos coeficientes turbulentos de transporte, aqueles contidos na equação 3.30, por exemplo. Das sondagens atmosféricas buscou-se determinar a evolução diária da altura da Camada Limite. Uma descrição dos métodos experimentais, sensores, etc., pode ser encontrada em [1] [41] [55].

Embora o experimento meteorológico tenha se desenrolado por um período de 45 dias apenas 8 dias foram selecionados para comparação por motivos nem sempre óbvios. Apenas nestes oito dias as sondagens atmosféricas foram feitas ininterruptamente a intervalos de 2 horas. Também, durante estes dias não houve a ocorrência de chuva e os dados de turbulência foram registrados sem nenhuma falha.

Outro dado de entrada requerido pelo modelo é o campo de vento. Velocidade e direção do vento, em diferentes pontos de grade, foram determinados com o Brazilian Regional Atmospheric Modelling System (BRAMS). Este modelo, uma versão adaptada do RAMS [61] rodou em um cluster de 16 processadores para os dias selecionados. Uma descrição simplificada do BRAMS está em anexo no Apêndice (C) nesta tese e uma documentação completa em [48] e [61].

Nas seções seguintes os resultados desta comparação são apresentados e discutidos.

Inicialmente foi feito uma análise da direção do vento, em intervalos de 30 minutos, de uma estação meteorológica de superfície instalada em Três Lagoas. Esta análise foi, posteriormente, comparada com a direção do campo de vento previsto pelo BRAMS. Isto é necessário para determinar se o vento predominante transportou o poluente para os pontos de amostragem. Em seguida, a comparação direta modelo/observação é efetuada. Finalmente, os índices estatísticos padrões são calculados.

No Apêndice (A) desta tese encontra-se os gráficos da evolução horária do campo de concentração superficial estimado pelo ZIMORA e no Apêndice (B) uma ampliação dos mesmos sobre a área das estações.

## **4.1 Análise da Direção do Transporte do Poluente**

As figuras seguintes apresentam a direção média do vento, em superfície, conforme determinado de um anemômetro R M Young (Campbell, Inc.) que registrava valores a cada segundo.



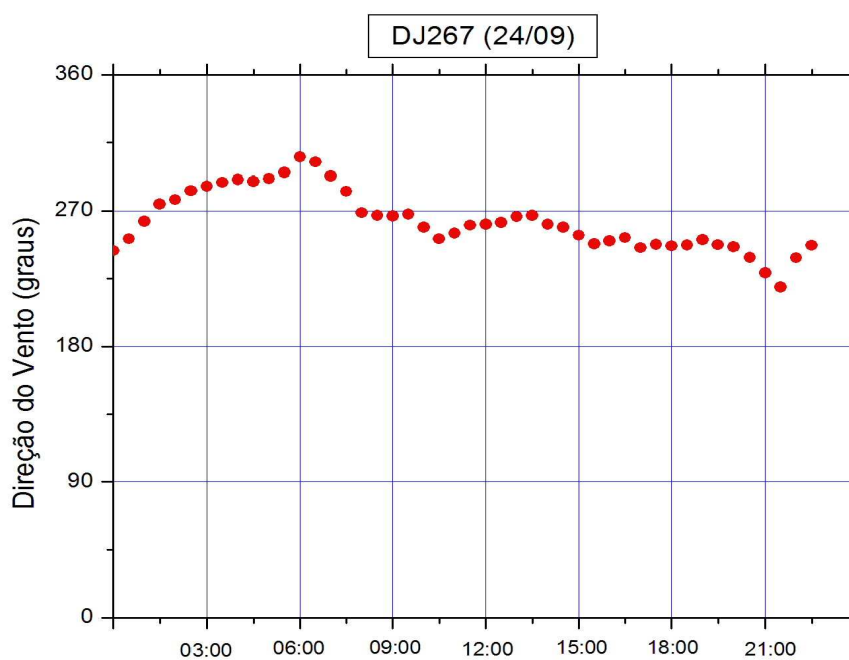


Figura 4.4: Direção do vento dia DJ267 (24/09/2007) medido na Estação 3L.

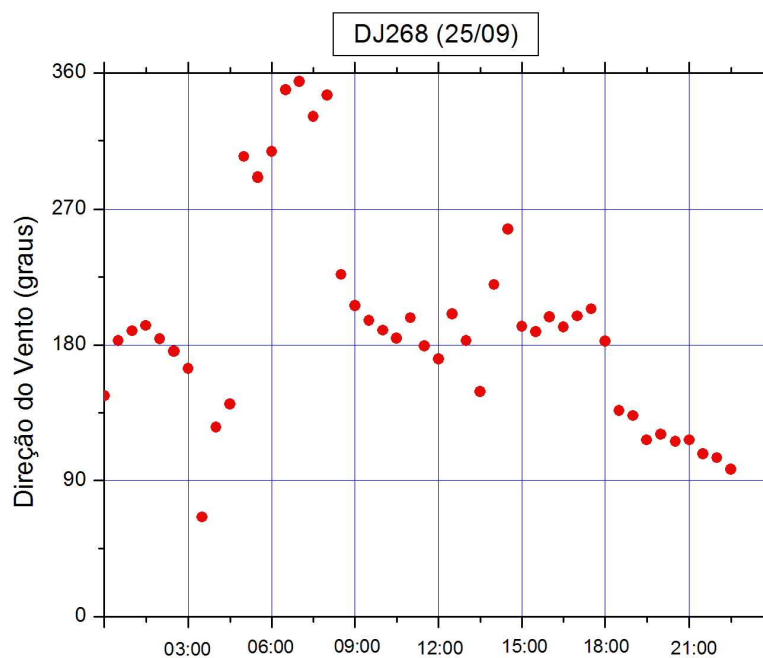


Figura 4.5: Direção do vento dia DJ268 (25/09/2007) medido na Estação 3L.

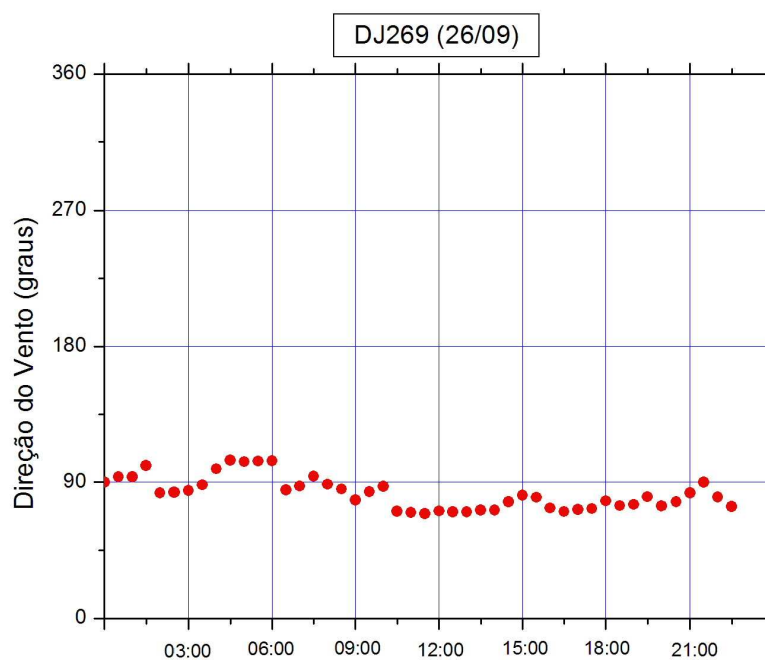


Figura 4.6: Direção do vento dia DJ269 (26/09/2007) medido na Estação 3L.

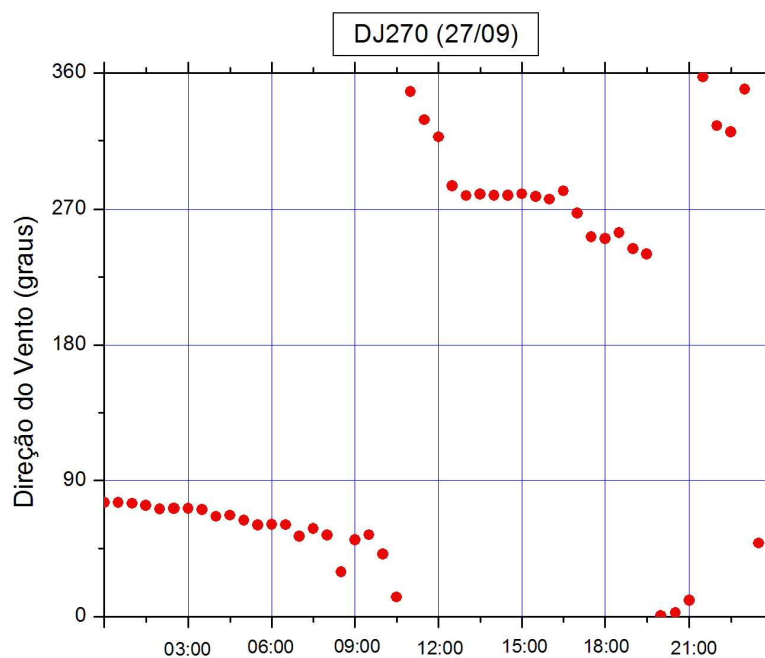


Figura 4.7: Direção do vento dia DJ270 (27/09/2007) medido na Estação 3L.



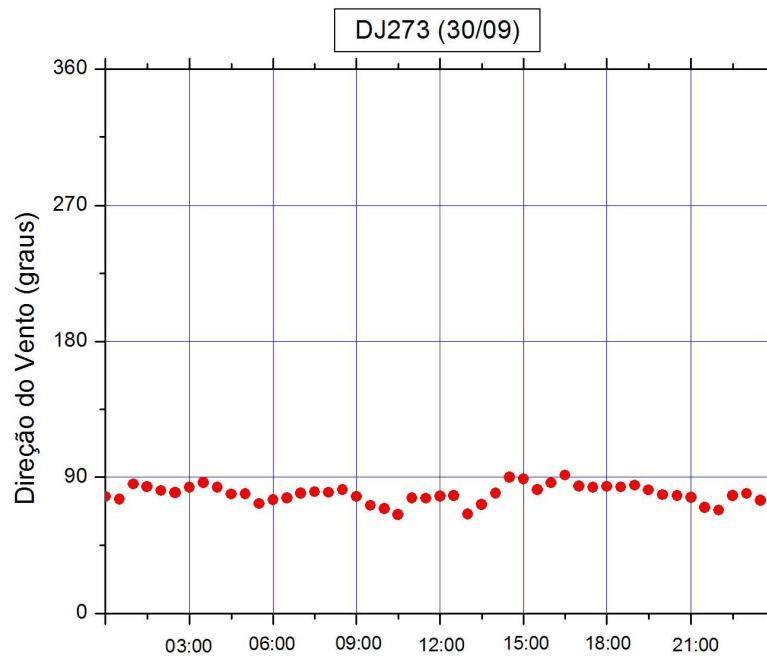


Figura 4.10: Direção do vento dia DJ273 (30/09/2007) medido na Estação 3L.

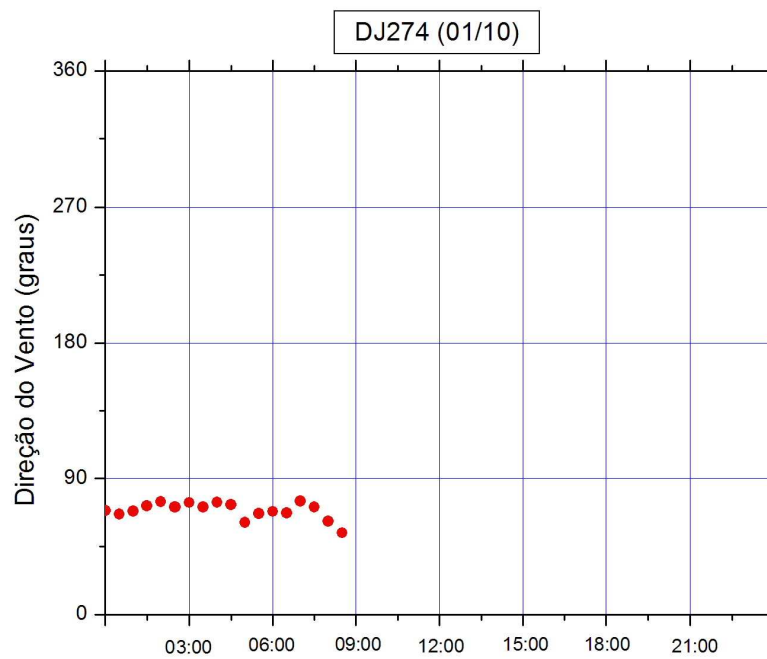


Figura 4.11: Direção do vento dia DJ274 (01/10/2007) medido na Estação 3L.

## 4.2 Validação do Modelo

No dia 24 de setembro (DJ267) o vento em superfície foi da direção oeste e sudoeste, coincidindo, na maior parte do tempo com a circulação do BRAMS. Neste caso, o campo de concentração do modelo não pode ser comparado com as concentrações observadas uma vez que o poluente não é levado para os pontos onde se localizam os receptores.

No dia 25 de setembro (DJ268) o vento em superfície foi na maior parte do tempo da direção sul. No final da manhã, entre as 06:00 e 09:00 ele teve uma componente de norte e, entre as 21:00 e 24:00 uma componente de sudeste. O modelo mostra continuamente uma mudança da direção do vento do quadrante sudoeste, no início da noite, para sudeste, no final do dia. Assim, tanto as observações pontuais como a circulação prevista pelo modelo levam o poluente para quadrantes que não são cobertos pelos pontos de coleta de contaminantes. Novamente, para este dia, não é possível comparar modelo/observação.

No dia 26 de setembro (DJ269), o vento observado em superfície é de leste durante a noite e, levemente nordeste no restante do dia. O modelo de mesosescala, de modo geral, também apresenta uma circulação deste padrão. Assim, para este dia é possível fazer uma comparação entre as concentrações previstas pelo ZIMORA com aquelas coletadas pela estação de monitoramento localizada em Três Lagoas (31). A figura, a seguir, apresenta tal comparação.

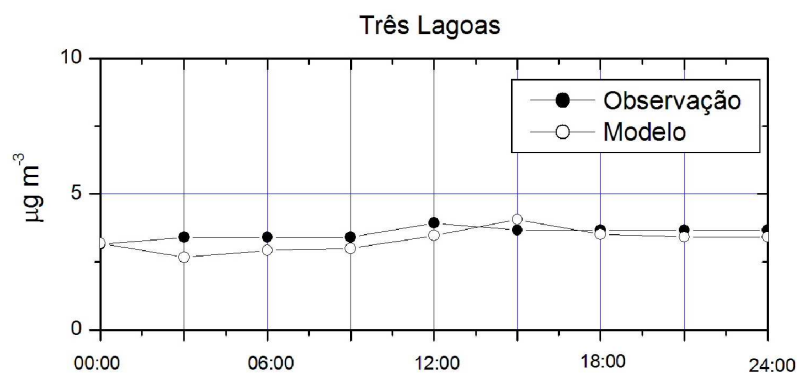


Figura 4.12: Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ269 (26/09/2007) na Estação 3L.

No dia 27 de setembro (DJ270), conforme observado pela estação de superfície, o vento soprou do quadrante nordeste apenas no período entre 00:00 e 09:00, enquanto o BRAMS mostra que o vento foi desta direção entre 00:00 e 14:00. A comparação entre valores previstos pelo modelo com os observados na estação Três Lagoas (31) está mostrado na figura abaixo. Nota-se que o modelo subestima a concentração observada, as 09:00 e 12:00.

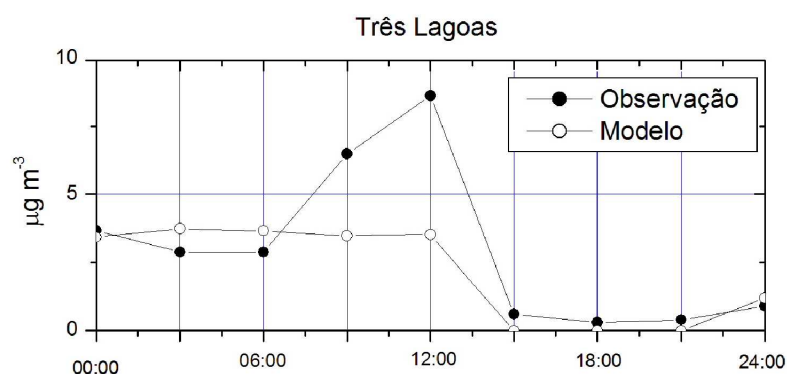


Figura 4.13: Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ270 (27/09/2007) na Estação 3L.

Em 28 de setembro o vento soprou da direção nordeste apenas no final do dia, conforme observação da estação de superfície. No modelo, entretanto, o campo de vento é sempre em uma direção que não transporta o poluente para a estação de monitoramento. Assim, o modelo prevê para todas as horas do dia uma concentração nula em Três Lagoas (3L) e, neste caso, a comparação modelo/observação não há como ser feita.

No dia 29 o vento em superfície soprou de nordeste durante a noite e início da manhã mudando para leste e sudeste na tarde e início da noite e, no final do dia voltou ao quadrante nordeste. Entretanto, a circulação indicada pelo modelo de mesoescala é de que o vento foi ao longo de todo o dia de leste e sudeste. Assim, este dia em particular permite comparar as concentrações modeladas com aquelas registradas na estação de monitoramento de Candiota. A figura abaixo dispõe tal comparação.

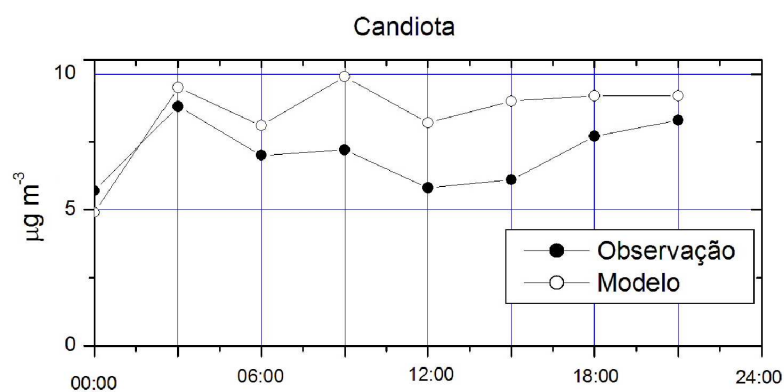


Figura 4.14: Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ272 (29/09/2007) na Estação Candiota.

No último dia do mês de setembro tanto o vento em superfície observado quanto modelado indicam vento vindo de nordeste e, assim, novamente pode-se analisar a habilidade do modelo em descrever as concentrações na estação Três Lagoas(3L).



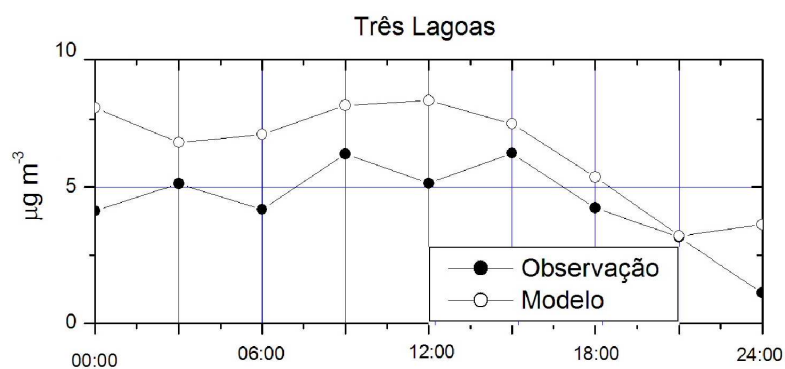


Figura 4.15: Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ273 (30/09/2007) na Estação 3L.

No último dia do experimento, 01/10, o vento em superfície foi monitorado até o início da manhã quando os sensores foram retirados da torre. Neste período o vento foi da direção nordeste. O modelo, por sua vez, foi rodado para o período de 24 horas. No intervalo em que se dispõe de dados de superfície há uma forte correlação entre o BRAMS e o vento em superfície. Por este motivo resolveu-se usar todo o ciclo diurno para efetuar a comparação, que está mostrada na figura abaixo.

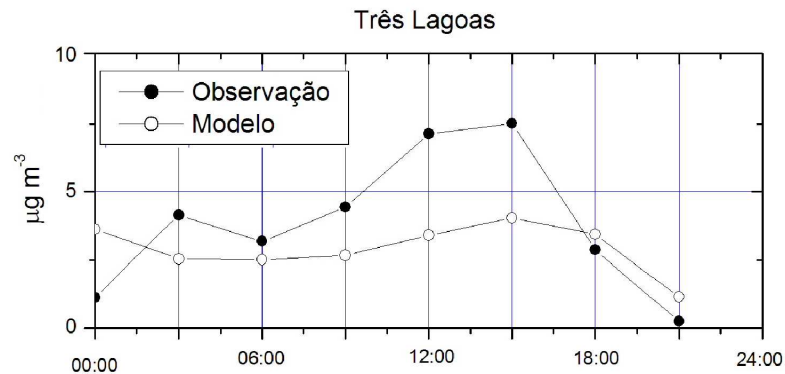


Figura 4.16: Comparação entre concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados no dia DJ274 (01/10/2007) na Estação 3L.

Apresentamos a seguir uma representação gráfica de dados bivariados, em que cada par de dados  $x_i, y_i$  é representado por um ponto coordenado  $x_i, y_i$ , num sistema cartesiano através de um diagrama de pontos. Este tipo de representação permite realçar algumas propriedades entre os dados, ou seja, o diagrama de pontos também chamado de diagrama de dispersão, é utilizado para estudar a possível relação entre duas variáveis. Em geral, este diagrama é usado para se verificar uma possível relação de causa e efeito. Isto não prova que uma variável afeta a outra, mas torna claro se a relação existe e em que intensidade. O diagrama de dispersão é construído de forma que o eixo horizontal represente os valores medidos de uma variável e o eixo vertical represente as medições da segunda variável. No nosso caso ele indicará o desempenho dos dados modelados (eixo vertical) em relação aos dados observados experimentalmente (eixo horizontal).

Assim, a capacidade do modelo Zimora em descrever a concentração observada na estação Três Lagoas [3L] (estrela cheia) e na estação Aeroporto [Can] (estrela vazada), para os dias usados na intercomparação, está mostrada na figura 4.17 a seguir.

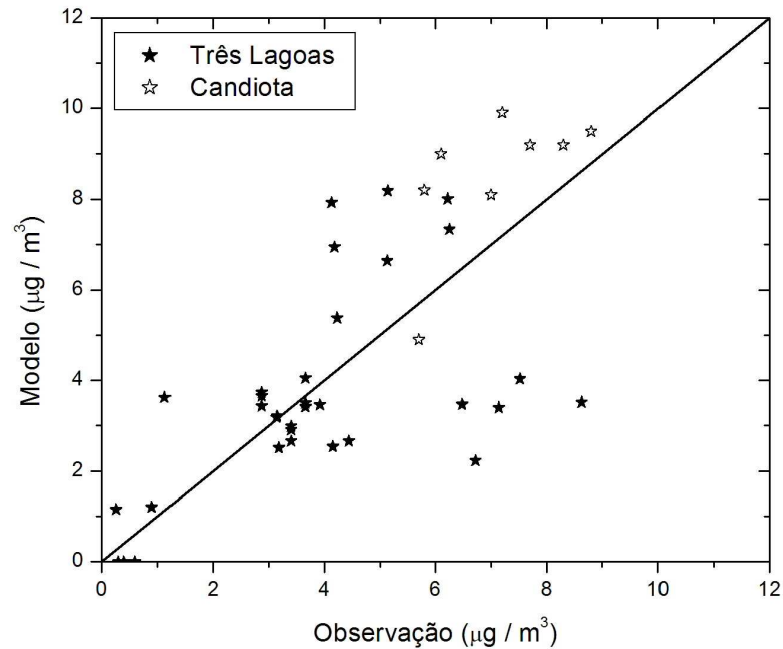


Figura 4.17: Diagrama de espalhamento entre as concentrações previstas pelo Modelo Zimora e os dados observados.

Na figura 4.17 é apresentado um diagrama de dispersão entre as concentrações observadas experimentalmente e as previstas pelo modelo. A reta sólida indica qual seria o comportamento teórico se a associação entre as duas concentrações fosse perfeita, ou seja, se o valor de concentração observada fosse o mesmo da prevista pelo modelo. A reta é referência para avaliar o comportamento do modelo. Aqueles valores em que o modelo superestima as concentrações observadas estão acima da reta e os outros, em que o modelo subestima os valores experimentais, estão abaixo da reta.

Percebemos, ainda na figura 4.17, que para valores de concentração inferiores a  $2\mu\text{g}/\text{m}^3$  o modelo superestima as concentrações para o sítio Três Lagoas (3L); as melhores correlações ocorrem para a faixa de  $2 - 4\mu\text{g}/\text{m}^3$  para o sítio 3L; para a faixa entre  $4 - 6\mu\text{g}/\text{m}^3$  o modelo superestima os valores de concentrações para o sítio 3L; nota-se que acima de  $6\mu\text{g}/\text{m}^3$ , o modelo apresenta uma tendência em subestimar as concentrações para o sítio 3L e superestimar os valores para o sítio Candiota. De forma geral, o diagrama apresenta uma correlação positiva entre os dados, ou seja, ao passo que um aumenta o outro também aumenta.

Apresentamos na tabela 4.1 os valores dos índices estatísticos da comparação entre os valores modelados e observados experimentalmente.

Tabela 4.1: Resultados do índices estatísticos.

Índice	NMSE	FB	FS	R	FA2
Valor	0,139	0,05	0,25	0,8	5

Conforme apresentado na seção 3.6, a análise dos índices estatísticos mostrados na tabela 4.1 resulta que:

- *NMSE* está próximo de zero, indicando que o erro quadrático médio entre as concentrações simuladas e observadas são pequenos;
- *FB* maior do que zero, o erro fracional indica que as concentrações previstas pelo modelo foram superestimadas. Contudo, esta superestimativa não é tão pronunciada, uma vez que seu valor ficou próximo de zero;
- *FS* ficou próximo de zero, indicando que a dispersão das concentrações previstas pelo zimora em torno da concentração média foram levemente superestimadas, ou seja o modelo apresenta maior dispersão em relação aos dados observados experimentalmente;
- *R* mostra uma correlação positiva entre os dados observados e previstos mostrando ainda que o grau de associação entre estas duas variáveis quantitativas  $R = 0,6$  pode ser considerado bom;
- O valor obtido para *FA2* indica que a maioria dos valores de concentração preditos encontram-se dentro de um fator de 2 das concentrações observadas experimentalmente.

### 4.3 Discussão

A comparação entre os resultados das simulações do ZIMORA com as concentrações registradas pelas estações da rede de monitoramento deve ser feita considerando possíveis fontes de erro e de incertezas. Dentre estas fontes, três principais devem ser consideradas: erro e incerteza nas concentrações observadas; incerteza na concentração modelada para aqueles pontos específicos; erros e incertezas por causa da Física do Modelo.

A primeira, nós assumimos que são mínimas, pois, nos dias que antecederam o experimento as estações de qualidade do ar passaram por um processo de manutenção e calibração.

A segunda, que consideramos como incerteza, é a maneira como a qual a concentração modelada, para efeitos de comparação, foi obtida. Recordemos que o ZIMORA estima as concentrações superficiais em pontos de grade igualmente espaçados. A localização das estações de Três Lagoas e Candiota não coincidem com os pontos de grade. Assim, as concentrações do ZIMORA, para estes locais foram estimadas como a média aritmética dos quatro pontos de grade que envolvem a localização das estações. Este procedimento de média só seria apropriado se a distância das estações aos quatro vértices fosse exatamente igual. E isto não é o caso. Um procedimento de média apropriado seria aquele que ponderasse a distância do ponto de observação aos vértices do quadrado. Este procedimento não é simples. Em uma rotina numérica não há como implementar tal processo uma vez que os pontos de observação podem não ser fixos. Este não é o caso para as estações da CGTEE. Entretanto, como pretende-se que o ZIMORA seja mais do que um modelo desenvolvido para uma fonte particular se escolheu não dedicar tempo neste processo. Por outro lado, como as concentrações nos pontos de grade que envolvem as estações variam por menos de 10%, em todos os casos, assume-se que esta incerteza é a que está inserida nas concentrações modeladas para as coordenadas que correspondem as das estações de monitoramento.

A terceira fonte de erro e incerteza requer uma discussão mais cuidadosa. Não será muita pretensão pensar que um modelo matemático é capaz de reproduzir os aspectos de alta complexidade da natureza e que estão envolvidos na dispersão turbulenta de poluentes? A resposta a esta pergunta pode ser tão complexa quanto o próprio problema. Assim, a deixamos de lado e consideramos sim que um modelo, com uma boa física, pode ser capaz de reproduzir, pelo menos, os aspectos médios deste problema. A questão imediatamente seguinte então é: será que o ZIMORA inclui toda a física relevante, e que já é de conhecimento, no seu desenvolvimento?

A Física do Transporte de contaminantes deve considerar uma representação adequada do campo de vento, do campo de turbulência, da evolução temporal da altura da camada limite assim como dos dados da fonte.

O ZIMORA, por ser um modelo que pode rodar com alta resolução espacial, necessita interpolar o campo de vento tri-dimensional de um modelo de circulação atmosférica. Especificamente, nesta tese a interpolação foi feita de uma escala de 20 quilômetros, do BRAMS, para 2 quilômetros. Uma comparação feita entre o vento advindo do modelo de mesoescala com o vento em superfície da estação Três Lagoas indica uma boa capacidade do BRAMS em descrever o campo de vento para este ponto em particular. Por outro lado, o GruMA (Grupo de Modelagem Atmosférica de Santa Maria) executa rotineiramente a validação das previsões do tempo feitas pelo Laboratório. O campo de vento é uma das va-

riáveis analisadas e as previsões indicam, na grande maioria das vezes, uma boa descrição das observações. Assim, aceita-se que os processos advectivos estão bem representados no ZIMORA.

A descrição dos processos de turbulência, que no modelo estão incluídas através dos coeficientes difusivos, é uma das questões ainda em aberto da Física. Os coeficientes de transporte turbulento surgem nas equações após o procedimento de separar as grandezas em uma parte média e uma parte turbulenta, usar as regras de Reynolds e escrever as equações para as grandezas médias. A suposição de que os fluxos turbulentos podem ser descritos como proporcionais aos gradientes das “concentrações” é que origina os coeficientes. A dimensão destes coeficientes é  $L^2 T^{-1}$ . Uma interpretação apropriada deles, para o caso de um poluente, é de uma velocidade areal, isto é, de quanto a área da pluma de poluentes aumenta no intervalo de tempo. Usualmente estes coeficientes são, parametrizados como o produto de uma velocidade característica por uma escala de comprimento apropriada. Esta é a base do coeficiente adotado nesta tese. Por outro lado, uma ferramenta mais conveniente é derivar estes coeficientes de difusão através de primeiros princípios como, por exemplo, a Teoria Estatística de Taylor. Degrazia *et al* (2000)[11] usaram esta ferramenta para obter  $K$ 's que possuem implicitamente uma variação temporal e são válidos para todas as classes de estabilidade atmosférica. Entretanto, por problema de adequação computacional, tais coeficientes não foram incluídos nesta versão do ZIMORA. Na limitação dos  $K$ 's adotados na atual versão, encontra-se um dos limites do modelo.

Finalmente, e talvez mais importante, é enfatizar que o modelo não leva em conta efeitos de empuxo. O fato de considerar que o poluente é lançado na atmosfera com uma temperatura que é igual a temperatura da vizinhança é uma dos fatores de erro e limitação na física do ZIMORA. Quando desconsiderado o efeito de empuxo, é equivalente a assumir que a altura efetiva de abandono do poluente na atmosfera é inferior a altura real. De um modo simples, a altura efetiva pode ser calculada como  $H_{ef} = H_s + H_{emp}$ , onde  $H_s$  é a altura da fonte e  $H_{emp}$  a ascensão, na atmosfera, do poluente devido a diferença entre a sua temperatura e a temperatura da vizinhança. O ZIMORA não inclui  $H_{emp}$ .

Entretanto, ao compararmos as concentrações superficiais temos de considerar quais os fatores que fazem com que o poluente seja transportado para o solo. Em uma camada noturna, com forte resfriamento radiativo e uma forte inversão térmica, a altura da camada limite pode ser inferior a altura  $H_s$ . Neste caso, para as concentrações superficiais não é relevante a inclusão na  $H_{emp}$  no cálculo de  $H_{ef}$ , pois o poluente será impedido de chegar ao solo. A figura 4.18 a seguir ilustra tal situação.



Figura 4.18: Abstração da Camada Limite Noturna onde a pluma de poluente não toca o solo.

Em uma camada diurna, por outro lado, a posição em que o poluente tocará ao solo depende, também, da intensidade da mistura turbulenta, da velocidade do vento e da razão entre a altura da fonte e a altura da camada limite.

## 5 *Conclusões*

Nesta tese, foi apresentado o desenvolvimento de um modelo para obter uma solução através da resolução numérica da equação de Difusão-Advecção batizado de **ZIMORA** (uma aglutinação dos nomes dos autores **ZIM**ermann e **MORA**es). Este modelo resolveu, pelo método de diferenças finitas, a equação de conservação da massa após o procedimento de Média de Reynolds.

O modelo numérico mostrou-se eficiente ao resolver com grande resolução espacial e temporal o campo de concentração após o acomplamento de dados de vento através do procedimento de interpolação de grades de baixa resolução, da ordem de quilômetros, para resoluções finas, da ordem de metros, utilizando como dados de entrada um campo de vento realístico oriundos de um modelo regional de meso-escala de previsão.

O modelo também mostrou resultados satisfatórios ao incorporar coeficientes de transportes fisicamente aceitáveis para uma turbulência não isotrópica, estimados através da parametrização da CLA proposta por Moraes [41], que fisicamente considera a variabilidade da altura da CLA.

O **ZIMORA** mostrou ter estabilidade numérica, indicando que os critérios necessários para que as equações de diferenças finitas utilizadas representem uma equação diferencial, como consistência, convergência e estabilidade, foram garantidos durante a implementação computacional

A solução numérica obtida a partir do **ZIMORA** é fisicamente aceitável, como como foi observado na validação dos resultados de sua simulação. Uma vez que não há solução analítica, a performance do **ZIMORA** foi auferida através da análise feita com bases em um conjunto de índices estatísticos. Indicando que, de forma geral, as concentrações simuladas apresentam uma boa correlação positiva com os dados observados.

A comparação entre os dados observados e os modelados pelo **ZIMORA** indicam que para os casos aonde ocorrem menores valores para concentrações observadas o modelo **ZIMORA** apresenta uma melhor correlação entre os dados experimentais e observados. Os



casos aonde ocorrem maiores valores para concentrações observadas o modelo ZIMORA superestima estas concentrações. Contudo, de maneira geral o modelo descreve satisfatoriamente os dados observados.

O esquema numérico adotado comportou-se adequadamente para a simulação da equação de difusão-advecção, pois os resultados da simulação da evolução temporal da pluma de concentrações, para todos os conjuntos de dados, apresentaram uma boa concordância com o comportamento do campo de vento fornecido pelo modelo regional de mesoescala (BRAMS) o qual teve sua resolução aumentada pelo modelo ZIMORA.

A interface entre o modelo numérico regional de mesoescala (BRAMS) e o modelo numérico de dispersão ZIMORA funcionou bem, mostrando a capacidade de sinergia entre estes dois sistemas.

Em resumo, foi apresentado o desenvolvimento de um modelo com aplicabilidade específica (região de emissões de poluentes por fontes pontuais), implementando a resolução numérica para a equação de Difusão-Advecção. Desenvolvido a partir de sua raiz, este modelo contemplou a necessidade de levar em consideração a formulação e aplicação de parametrizações com base nos estudos realizados e dados disponíveis no grupo de micrometeorologia da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), que há mais de uma década realiza pesquisas de campo, particularmente na região de Candiota, possuindo um grande conjunto de dados realísticos da atmosfera e também contemplou os esforços realizados pelo Grupo de Modelagem Atmosférica (GruMa/UFSM), que possui em operação o modelo de previsão de tempo regional (BRAMS), cujos dados de campo de vento foram utilizados como dados meteorológicos de entrada para o modelo ZIMORA.

Em continuidade a este trabalhos, a melhoria *atualização* do ZIMORA pode ser feita nos seguintes aspectos em ordem de prioridade:

- Implementação de equações para dar maior robustez a modelagem como equação de balanço radiativo, modelagem dos processos químicos e efeitos de empuxo sobre a pluma;  
Incorporação de parametrizações mais modernas para os coeficientes de transporte turbulento, como aquela baseada na teoria clássica de estatística de difusão e distribuição espectral da energia cinética turbulenta de Degrazia *et. al* (2000);
- Incorporação de um esquema para interpolação vertical, com níveis irregularmente espaçados;
- Implementação de características de topografia e cobertura do terreno;

- Automação da conexão virtual com a saída do modelo regional meteorológico;
- Implementação de inserção de dados experimentais observados para as simulações;
- Implementar a assimilação de radiossondagens (virtualmente quando disponível) para operação.

Do ponto de vista prático a atualização do modelo pode ser feito nos seguintes aspectos:

- Automação do sistema de emissão da fonte, utilizando conexão virtual com o sistema monitor da chaminé, como por exemplo a fonte da termelétrica Presidente Médici (CGTEE) com finalidades operacionais;
- Desenvolvimento de interface para monitoramento e controle operacional;
- Desenvolvimento de uma interface de usuário para simulação;
- Implementar a geração de um boletim de qualidade do ar para ser utilizado como um subproduto da operação.

## *Bibliografia*

- [1] ALVES, R. C. M. *Descrição das Circulações Locais na Região de Candiota-RS e seus Efeitos no Transporte de poluentes*. Doutorado em Meteorologia, Universidade de São Paulo, São Paulo-SP, 2000.
- [2] ANDRADE, E. X. de., Sampaio, R., Silva, G. N. *Notas em Matemática Aplicada*, volume 3. Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, São Paulo-SP, 2003.
- [3] ARFKEN, G. B. e Weber, J. H. *Mathematical Methods For Physicists*. Harcourt Academic Press, London UK, 5 edition, 2001.
- [4] BARBOSA, J. P. S. Novas parametrizações de turbulência atmosfera para o modelo BRAMS. Mestrado em Meteorologia, INPE, São José dos Campos, São Paulo-SP, 2007.
- [5] BARNES, L. S. A technique for maximizing details in numerical wether map analysis. *Journal of Applied Meteorology*, 3:396–409, 1964.
- [6] BENDAT, J. S. e Piersol, A. G. *Random Data - Analysis And Measurement Procedures*. Wiley, New York, 2 edition, 1990.
- [7] BEVEN, K. J., Kirkby, M. J., Schoffield, N. e Tagg, A. Testing a physically-based flood forecasting model (topmodel) for three uk catchments. *J. Hydrol.*, 69:119–143, 1984.
- [8] CHEN, C. e Cotton W.R. A one dimensional simulation of the stratocumulus capped mixed layer meteorology. 25:289–321, 1983.
- [9] CRESSMAN, G. P. An operational objective analysis system. *Monthly Weather Review*, 87:367–374, 1959.
- [10] DEARDORFF, J. W. Efficient prediction of ground surface temperature and moisture, with inclusion of a layer of vegetation. *Jour. Geoph. Res.*, 83 C4:1889–1903, 1978.
- [11] DEGRAZIA, G. A., e Anfossi, D., Carvalho, J. C., Mangia, T. Tirabassi, C. and Velho, H. F. C. Turbulence parameterisation for pbl dispersion models in all stability conditions. *Atmospheric Environment*, 34:3575–3583, 2000.
- [12] FORTUNA, A. O. *Métodos Numéricos para Dinâmica Computacional de Fluidos*. EDUSP, São Paulo, 2000.
- [13] FRITSCH, J. M. e Chappell, C. F. Numerical prediction of convectively driven mesoscale pressure systems. part i: Convective parametrization. *J. Atmos. Sci.*, 37:1722–1733, 1980.
- [14] HALTINER, G. J. *Numerical Weather Prediction*. John Wiley & Sons Inc, New York, 1971.

- [15] HANNA, S. R. Method of estimating vertical eddy transport in the planetary boundary layer using characteristics of the vertical velocity spectrum. *Journal of Atmospheric Sciences*, 25:1026, 1968.
- [16] HANNA, S. R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment*, 23:1385–1395, 1989.
- [17] HAUGEN, D. A. Effects of sampling rates and averaging periods on meteorological measurements. In *Fourth Symposium on Meteorological Observations and Instrumentation*, Denver, CO, April 1978.
- [18] HIBBARD, W. L. e Wylie, D. P. D. A. An efficient method of interpolating observations to uniformly spaced grids. In *Interactive Information and Processing systems (IIPS) for Meteorology*, 1985.
- [19] HINZE, J. O. *Turbulence*. McGraw-Hill, 1975.
- [20] HOFFMAN, J. D. *Numerical Methods for Engineers and Scientists*. McGraw Hill - Mechanical engineering Series, 1993.
- [21] JESUS, S. M. Estimação espectral e aplicações. University of Algarve, 1999/00. Curso: Engenharia de Sistemas e Computação, Faculdade de Ciências e Tecnologia.
- [22] KAIMAL, J. C. e Finnigan, J. J. *Atmospheric Boundary layer Flows: Their Structure and Measurements*. Oxford Press, 1994.
- [23] KOSOVIC, B., Pullin, D.I., Samtaney, R. Subgrid-scale modeling for large-eddy simulations of compressible turbulence. [citeseer.nj.nec.com/415137.html](http://citeseer.nj.nec.com/415137.html), 1997. Último acesso Julho/2009.
- [24] KOVALETS, I. V., Tsiouti, V., Andropoulos, S., Bartzis, J. G. Improvement of source and wind field input of atmospheric dispersion model by assimilation of concentration measurements: Method and applications in idealized settings. *Applied Mathematical Modelling*, 2008. In Press.
- [25] KUO, H. L. Further studies of the parameterization of the influence of cumulus convection on large-scale flow. *J. Atmos. Sci.*, 31:1232–1240, 1974.
- [26] LAMB, R. G. A numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective boundary layer. *Atmospheric Environment*, 12:1297–1304, 1978.
- [27] LAX, P. D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and the numerical computation. *Comm. Pure Appl. Math.*, 7:159–193, 1954.
- [28] LAX, P. D. Hyperbolic systems of conservation laws ii. *Comm. Pure Appl. Math.*, 10:537–566, 1957.
- [29] LAX, P. D. e Wendroff, B. Systems of conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math.*, 13:217–237, 1960.
- [30] LIN, C. C. On Taylor's hypothesis and the acceleration terms in the Navier-Stokes equation. *Quarterly Applied Math.*, 10:295, 1953.

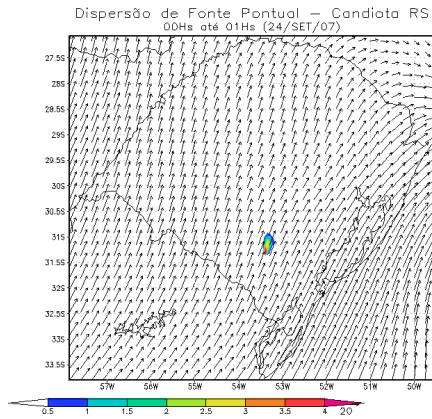
- [31] LIN, C. C. e Reid, W. H. Handbuch der physic., volume viii/2, chapter turbulent flow. theoretical aspects. *Springer-Verlag*, pages 438–523, 1963.
- [32] LISIEUR, M. *Turbulence In Fluids*. Kluwer Academic Publishers, Dodrecht, 3 edition, 1997.
- [33] LUMLEY, J. L. e Panofsky, H. A. *The Structure Of The Atmospheric Turbulence*. John Wiley & Sons, London, 1964.
- [34] LYONS, T. J. e Scott, W. D. *Principles of Air Pollution Meteorology*. Belhaven Press, 1990.
- [35] MACHADO, K. D. *Equações Diferenciais Aplicadas À Física*. UEPG, Ponta Grossa, 3 edition, 2004.
- [36] MAHRER, Y.E. e Pielke, R. A. A numerical study of the airflow over irregular terrain. *Beitrage zur Physik der Atmospharic*, 50:98–113, 1977.
- [37] MELLOR, T. e Yamada, T. Development of a turbulence closure model for geophysical fluid problems. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 20(4):851–875, 1982.
- [38] MEYERS, M. P. and Cotton, W. R. Evaluation of the potential for wintertime quantitative precipitation forecasting over mountainous terrain with an explicit cloud model. part i: Two-dimensional sensitivity experiments. *Journal of Applied Meteorology*, 31:26–50, 1992.
- [39] MOLINARI, J. A general form of kuo's cumulus parameterisation. *Monthly Weather Review*, 113:3–39, 1985.
- [40] MOLINARI, J. e Corsetti, T. Incorporation of cloud-scale and mesoscale downdrafts into a cumulus parameterization: Results of one- and three-dimensional integrations. *Monthly Weather Review*, 113:485–501, 1985.
- [41] MORAES, O. L. L. Turbulence characteristics in the surface boundary layer over the south american pampa. *Boundary-Layer Meteorology*, 96:317–335, 2000.
- [42] MORAES, O. L. L., Alves, R. C. M., Siqueira, A. C. , Borges, P. D., Tirabassi, T., Rizza, U. A study of so<sub>2</sub> dispersion around a thermoelectric power plant in the south of brazil. In *25th NATO/CCMS International Technical Meeting on Air Pollution Modeling and its Application*, page 359, Louvain-la-Neuve, Belgium, November 2001.
- [43] MORAES, O. L. L., Degrazia, G.A., e Tirabassi, T. Using the prandtl-kolmogorov relationship and spectral modeling to derive an expression for the eddy diffusivity coefficient for the stable boundary layer. *IL Nouvo Cimento*, 20D(6):791–798, 1998.
- [44] MORAES, O. L. L., Ferro, M., Alves, R. C. M., e Tirabassi, T. Estimating eddy diffusivities coefficients from spectra of turbulence. *Air Pollution*, VI:57–65, 1998.
- [45] PANOFSKY, H. A. Objective weather map analysis. *Journal of Meteorology*, 6(6):386–392, 1949.
- [46] PASQUILL, F. e Smith, F. B. *Atmospheric Diffusion*. Ellis Horwood, Chichester England, 3 edition, 1983.

- [47] PICCILLI, D. G. A. *Avaliação da Previbilidade Hidroclimática no Alto Paraguai*. Doutorado em Meteorologia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre-RS, 2007.
- [48] PIELKE, R. A. et al. A comprehensive meteorological modeling system-RAMS. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 49:69–81, 1992.
- [49] SEAMAN, L. N. Meteorological modeling for Air-Quality assessments. *Atmospheric Environment*, 34:2231–2259, 2000.
- [50] SILVESTRINI, H. J. e Möller, S. V. *Turbulência*, volume 4. Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, 2004.
- [51] SIVAPALAN, M., Beven, K. J. e Wood, E. F. On hydrological similarity: A scaled model of storm runoff production. *Water Resour. Res.*, 23(12):2266–2278, 1987.
- [52] SLADE, D. H. *Meteorology and atomic energy - 1968*. USAEC, 1968. TID-24190.
- [53] SMAGORINSKY, J. Geral circulation experiment with the primitive equations 1: The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91:99–164, 1963.
- [54] STULL, R. B. *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic, 1988.
- [55] TEICHRIEB, C. A., Zimmermann, H. R., Moraes O. L. L. e Acevedo O. C. Análise do balanço de energia em duas torres micrometeorológicas do PAMPA07. *Rev. Ciencia e Natura*, pages 149–152, 2007.
- [56] TREMBACK, C. J. Numerical simulation of a mesoscale convective complex: Model development and numerical results. Department of Atmospheric Sciens, 1990. Colorado State University, USA.
- [57] TREMBACK, C. J. e Kessler, R. A surface temperature and moisture parameterization for use in mesoscale numerical models. *Amer. Meteor. Soc.*, 1985. Preprints. 7th AMS Conference on Numerical weather Prediction. June 17-20. Montreal, Quebec, Canada, Boston.
- [58] TRIPOLI, G. J. e Cotton, W. R. A numerical investigation of several factors leading to the observed variable intensity of deep convection over south florida. *Journal Appl. Meteor.*, 19:037–1063, 1980.
- [59] TRIPOLI, G. J. e Cotton, W. R. The colorado state university three-dimensional cloud/mesoscale model-1982, part i, general theoretical framework and sensitive experiments. *Journal Rech. Atmospheric*, 16:185–219, 1982.
- [60] WALKO, R. L., Cotton, W. R., Meyers, M.P. e Harrington, J. Y. New RAMS cloud microphysics parameterization. Part i: The single-moment scheme. *Atmospheric Research*, 38:29–62, 1995.
- [61] WALKO, R. L. e Tremback, C. J. RAMS-regional atmospheric modeling system version 4.3/4.4. 2001. Guia de Usuário, Fort Collins, USA.
- [62] WALLACE, J. M. e Hobbes, P. V. *Atmospheric Science - An Introductory Survey*. Academic Press, Washington, 2 edition, 2006.

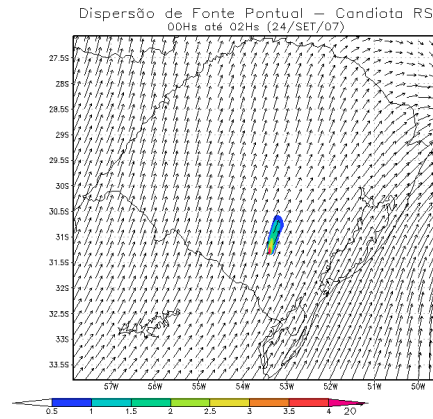
- [63] WEDLAND, E. Modelos matemáticos e métodos numéricos em recursos hídricos. EESC - USP, 2001. Notas de Aula.
- [64] ZIMERMANN, H. R. and Moraes, O. L. L. ZIMORA - an atmospheric dispersion model. *WIT Transactions on Ecology and the Environment*, 123, 2009. <http://dx.doi.org/10.2495/AIR090061>

## ***APÊNDICE A – Simulações do Zimora***

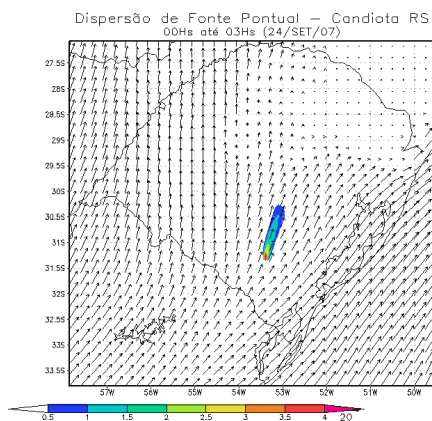




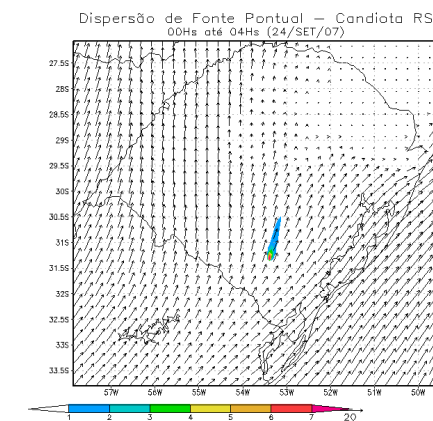
(a)



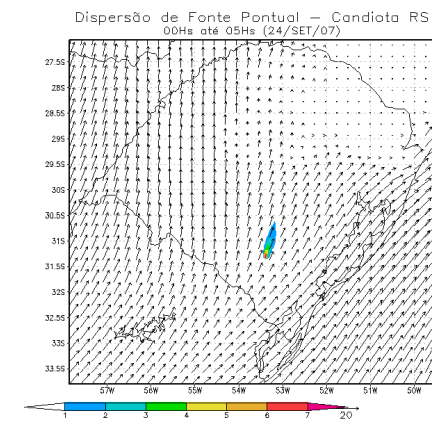
(b)



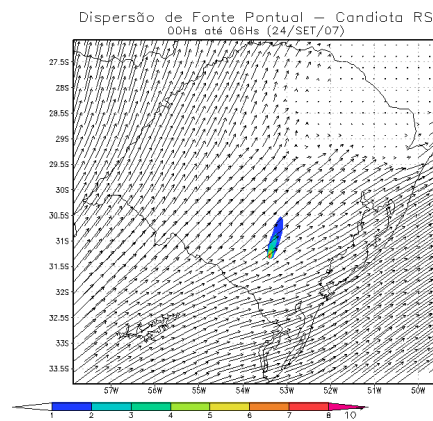
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.1: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 06h (00h-06h)

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

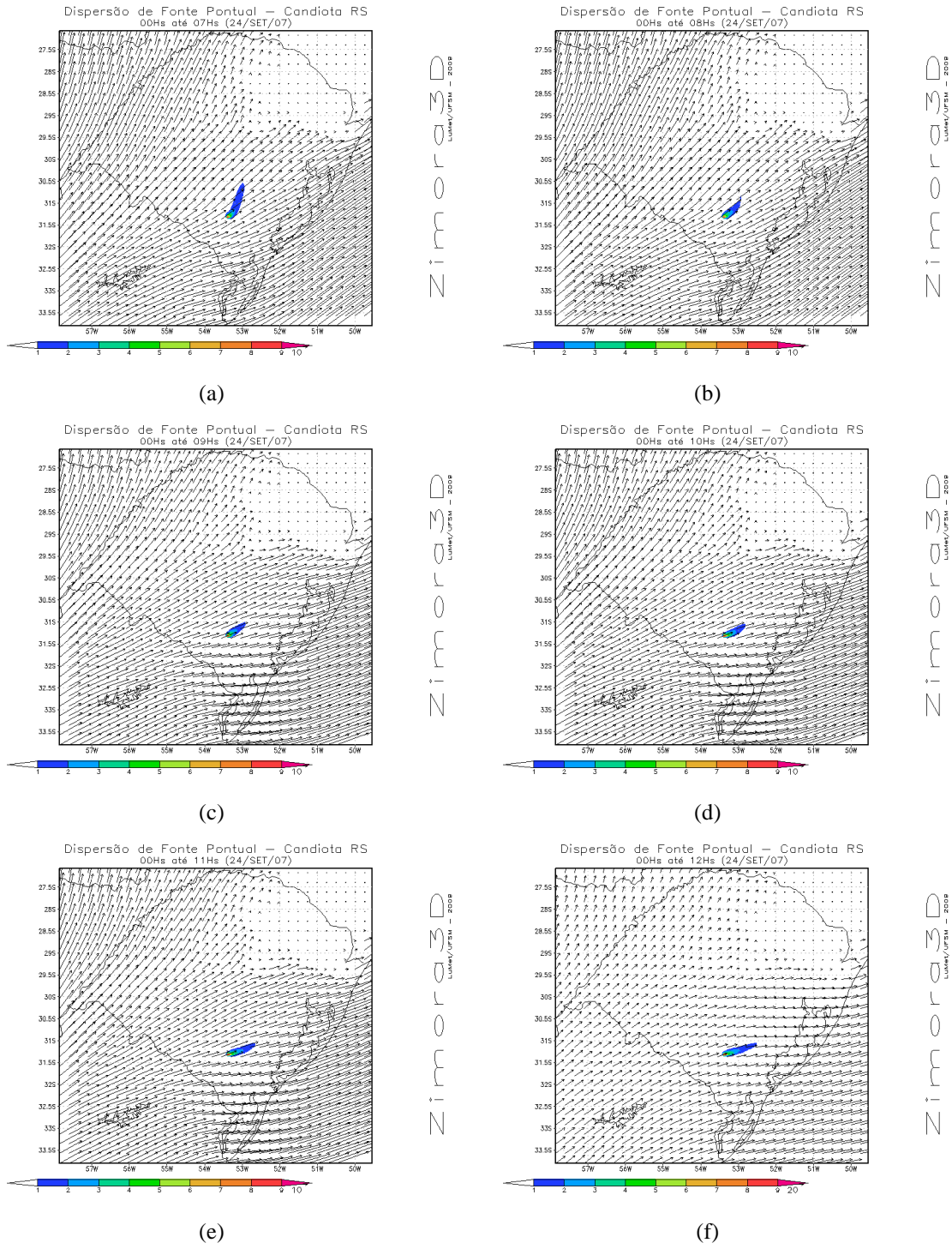


Figura A.2: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 12h (06h-12h)

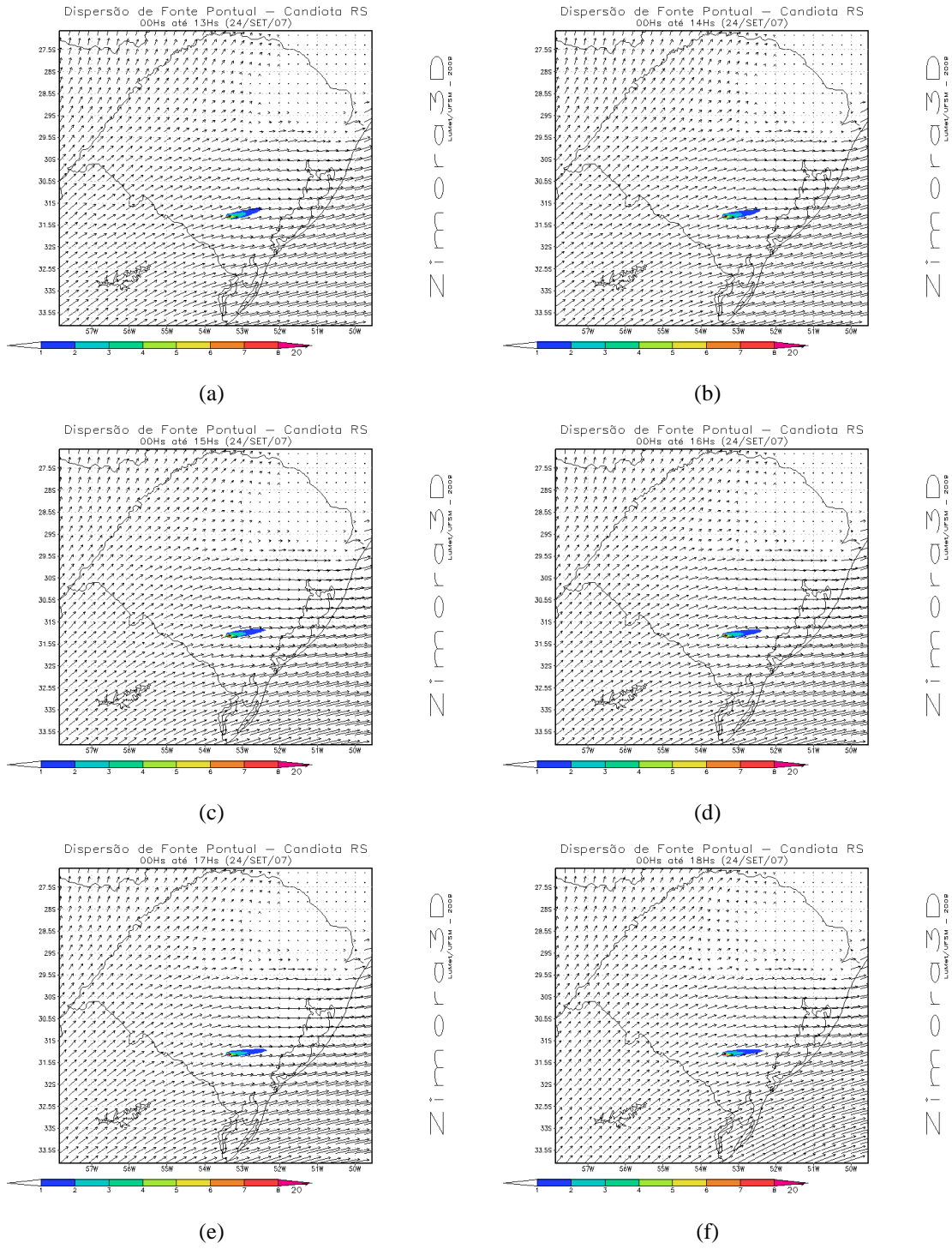


Figura A.3: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 18h (12h-18h)

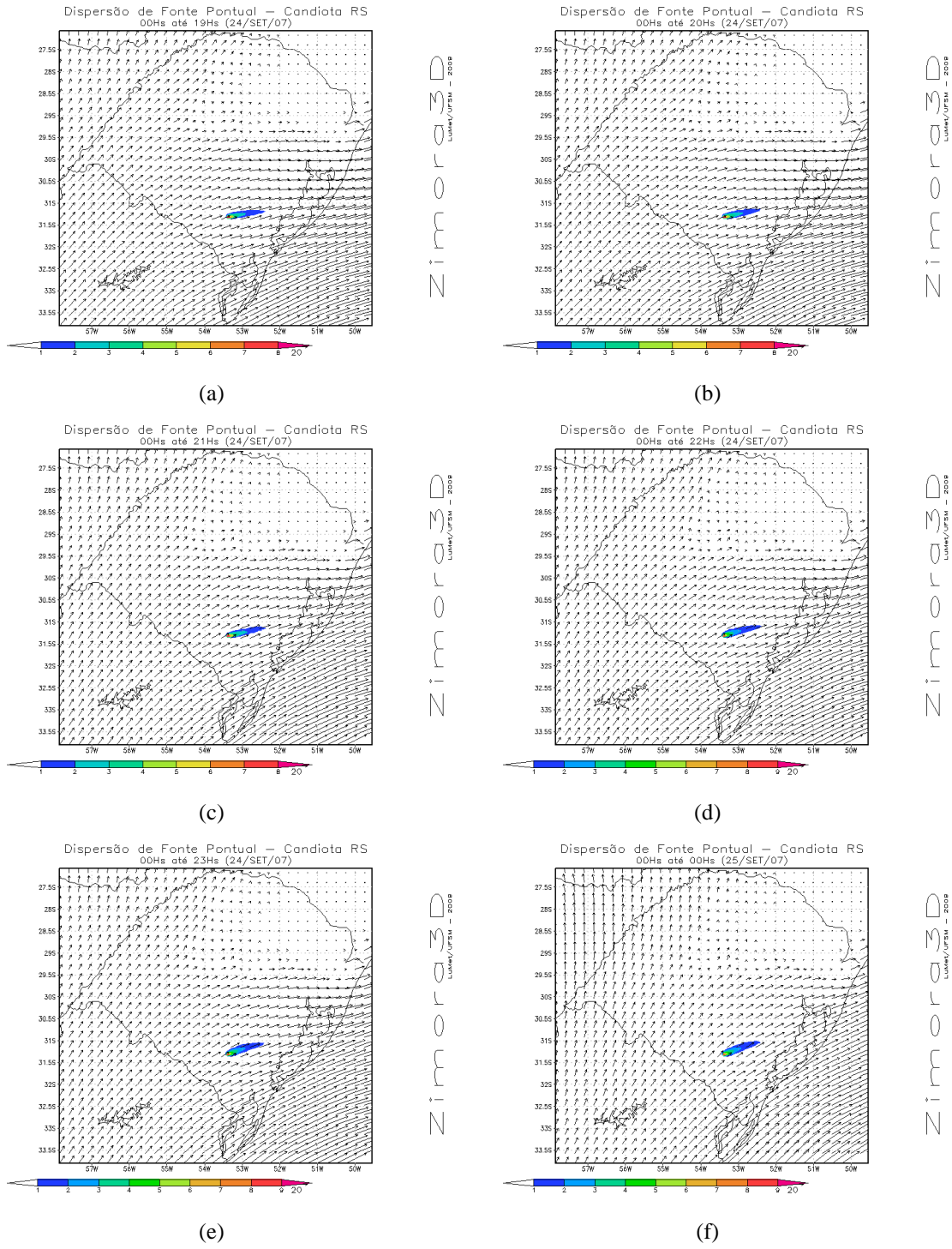
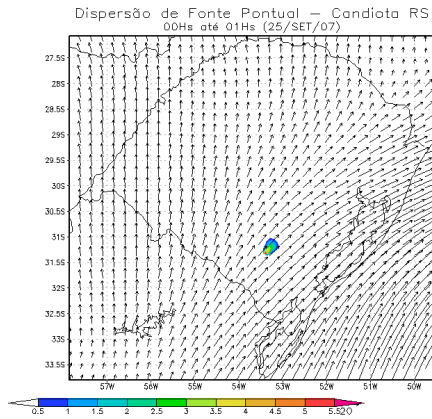
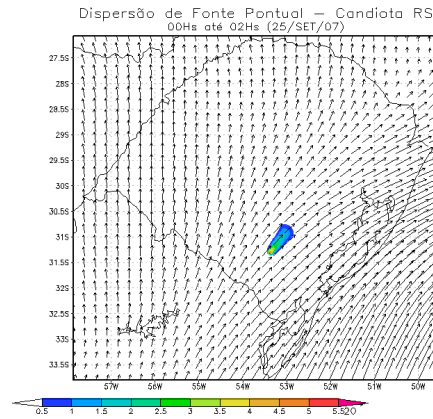


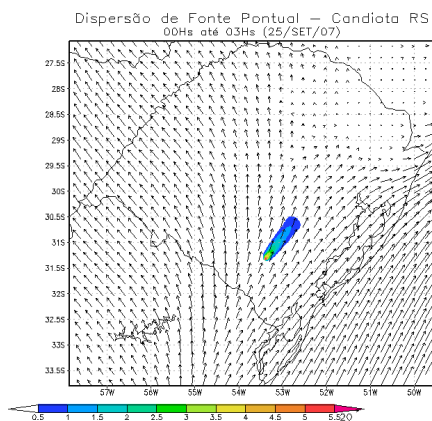
Figura A.4: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 18h (18h-24h)



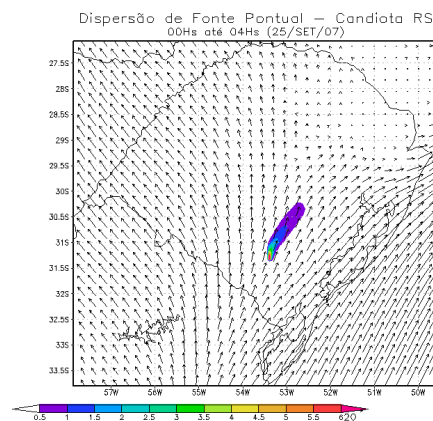
(a)



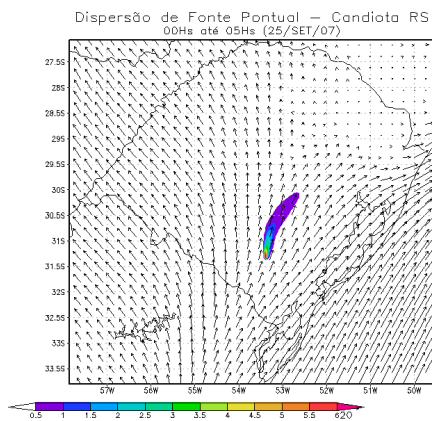
(b)



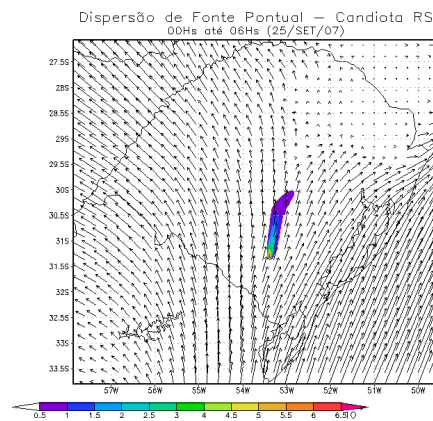
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.5: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 06h (00h-06h)

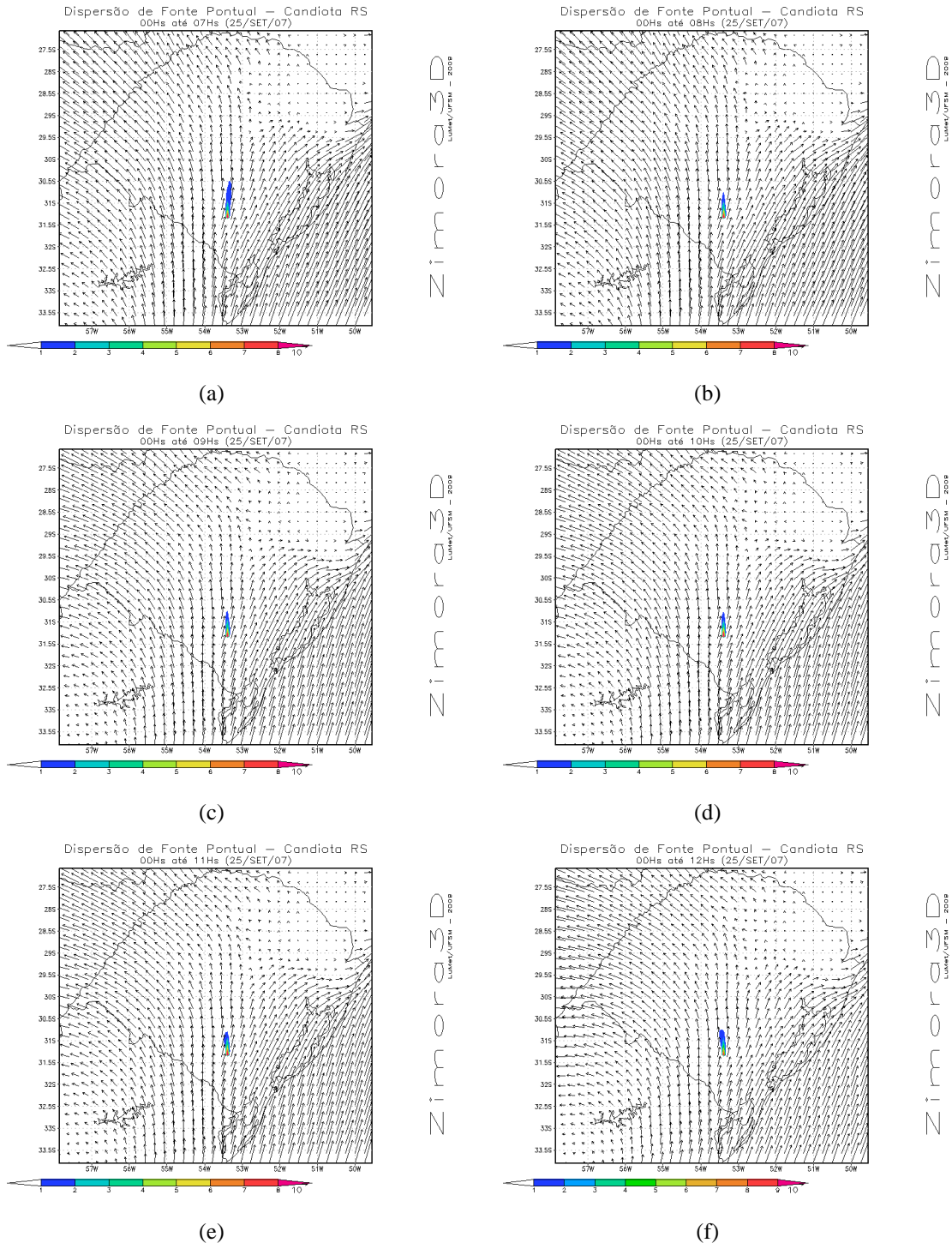
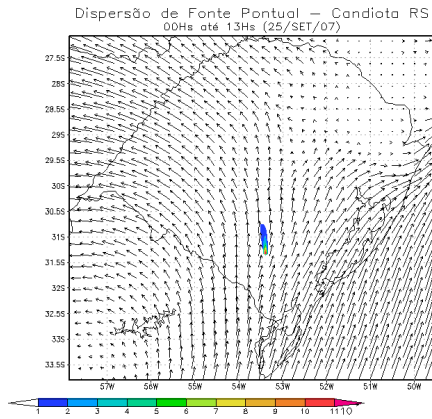
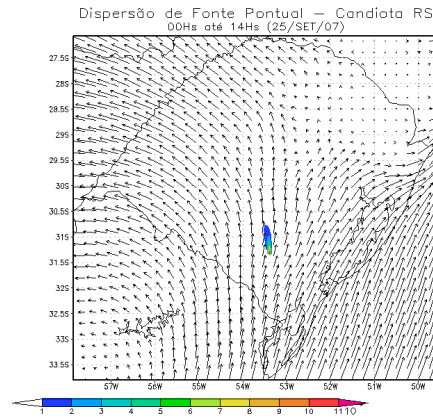


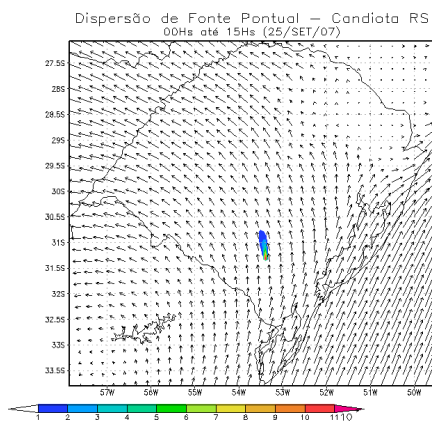
Figura A.6: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 12h (06h-12h)



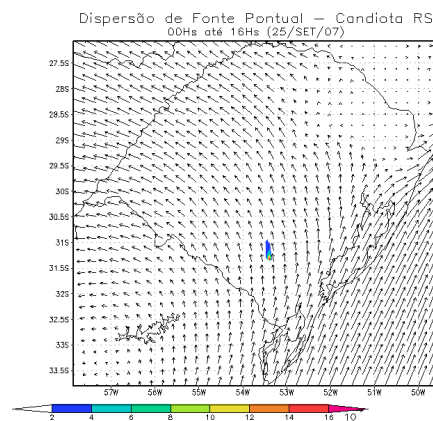
(a)



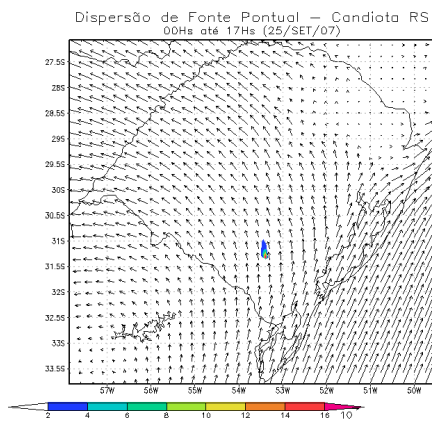
(b)



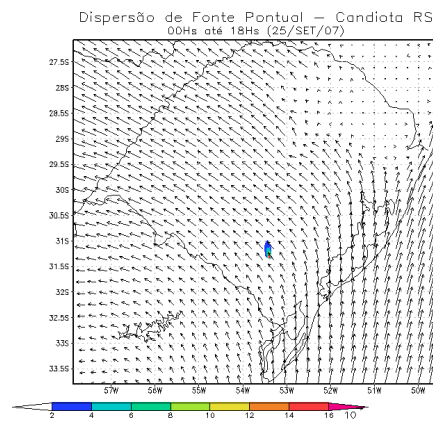
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.7: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 18h (12h-18h)

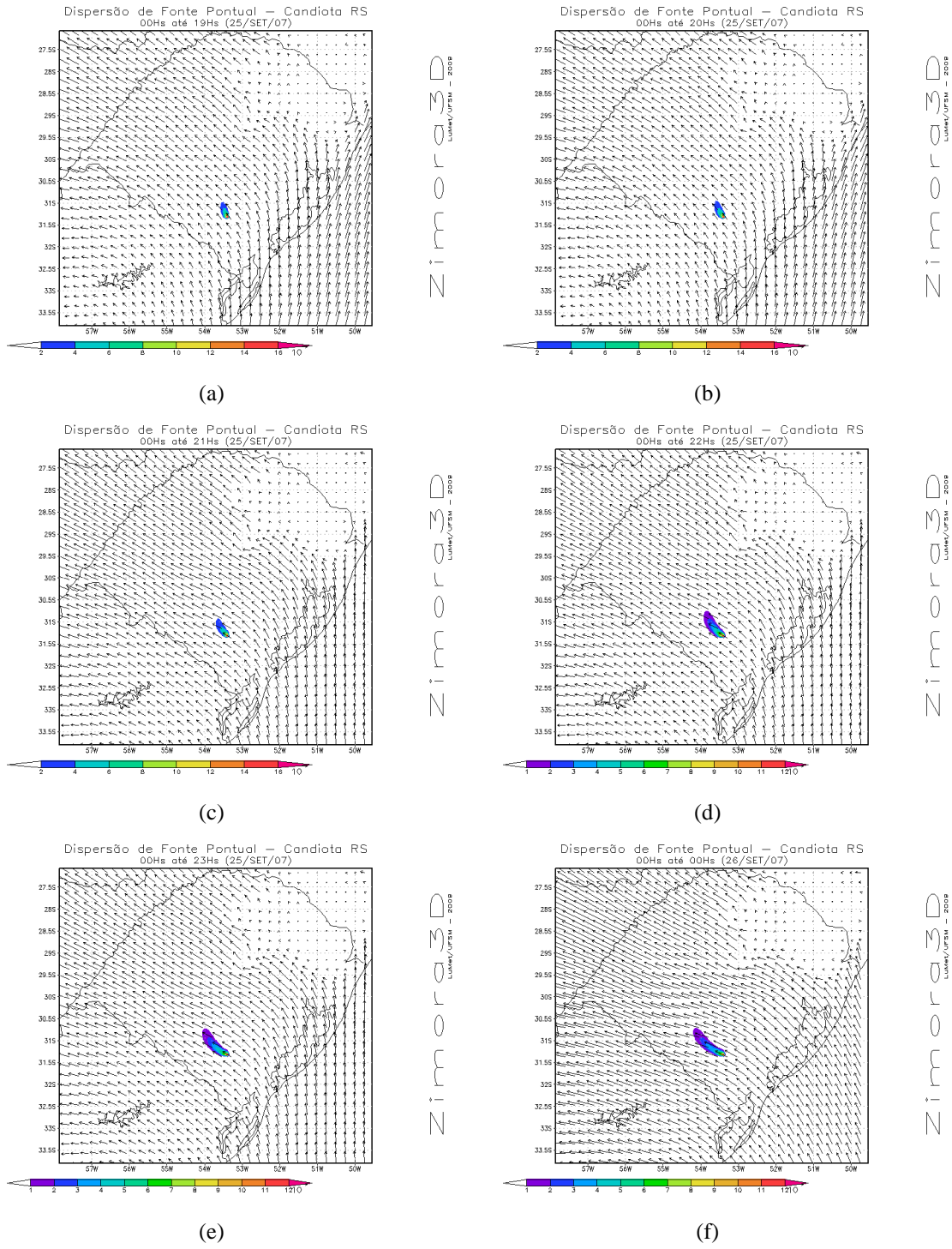
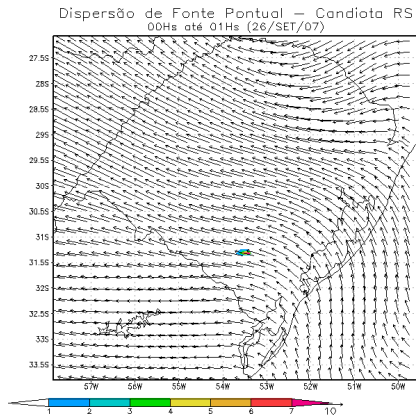
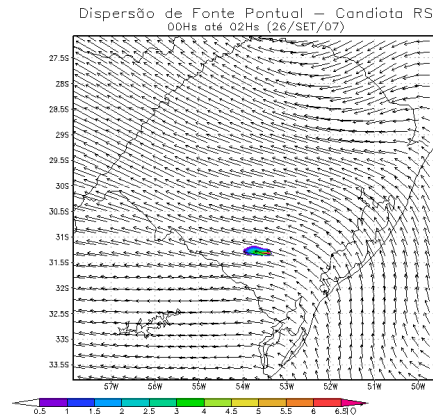


Figura A.8: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 18h (12h-18h)

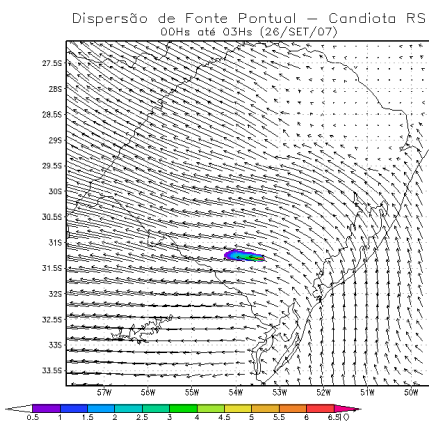




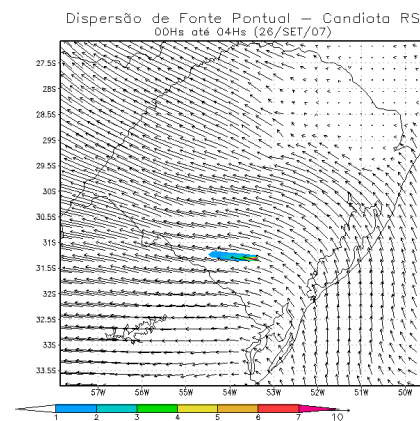
(a)



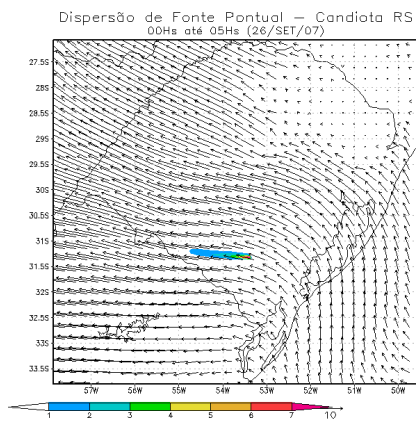
(b)



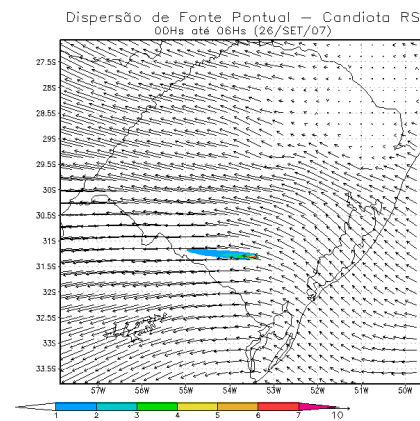
(c)



(d)

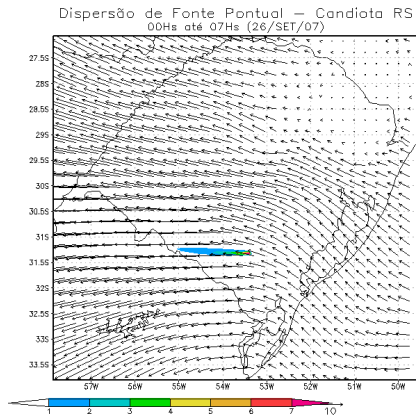


(e)

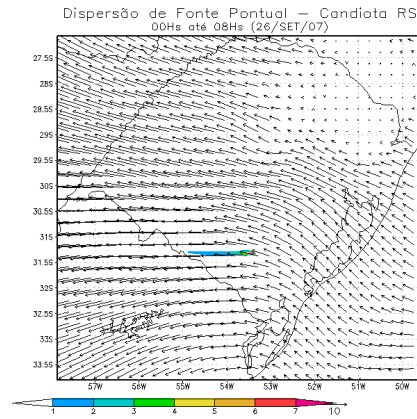


(f)

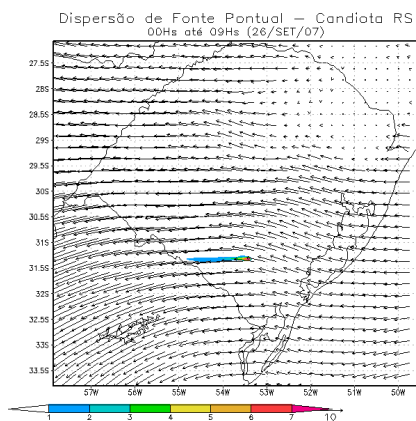
Figura A.9: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 06h (00h-06h)



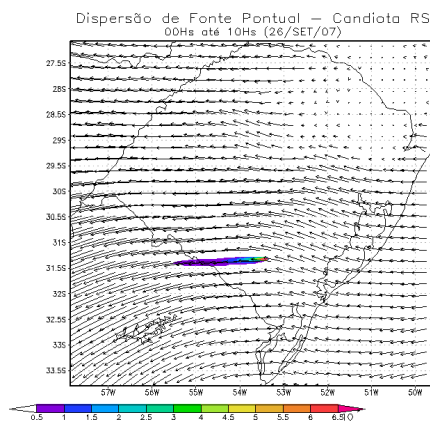
(a)



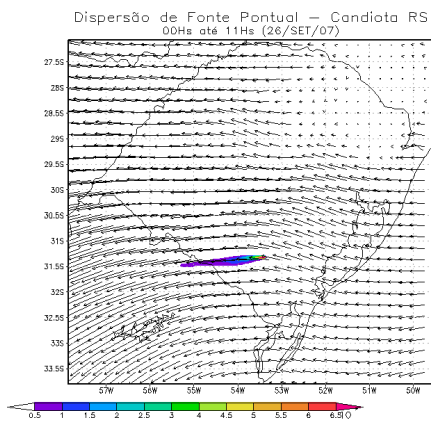
(b)



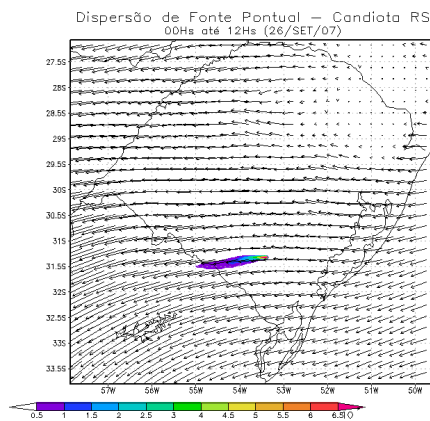
(c)



(d)

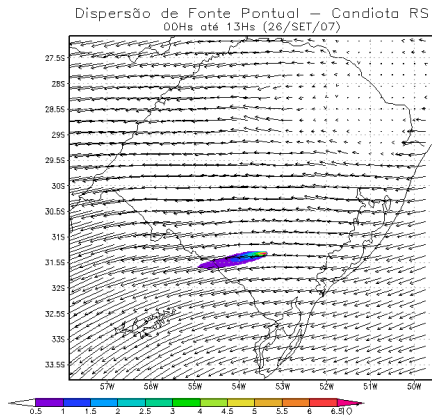


(e)

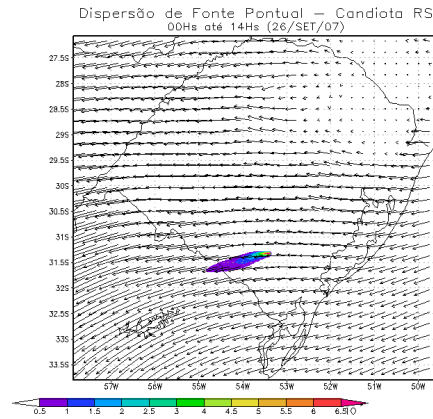


(f)

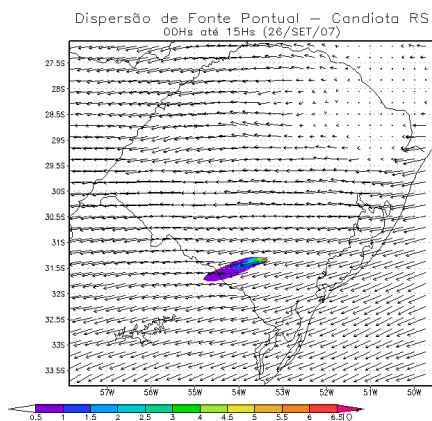
Figura A.10: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 12h (06h-12h)



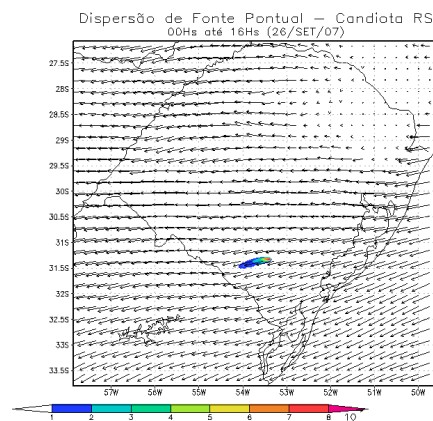
(a)



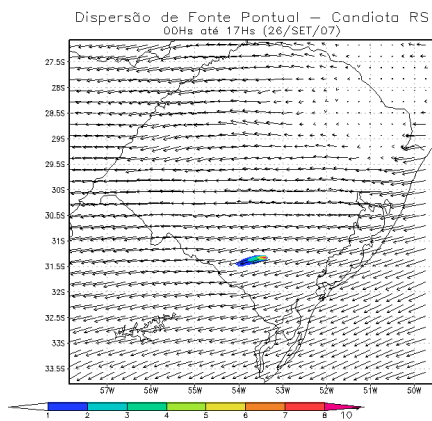
(b)



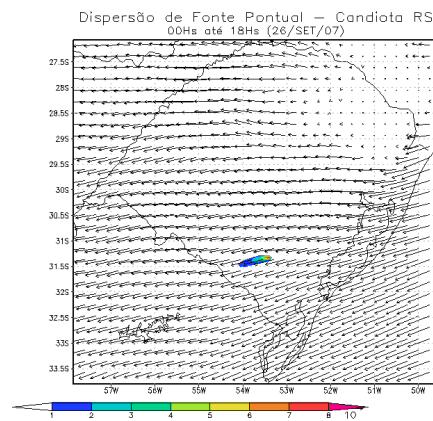
(c)



(d)

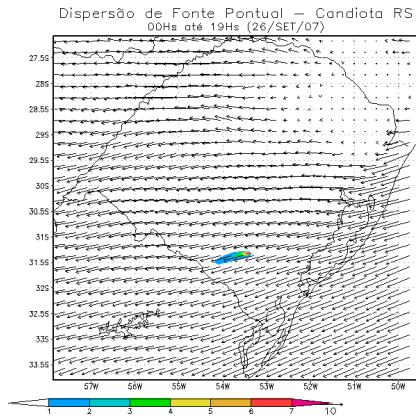


(e)

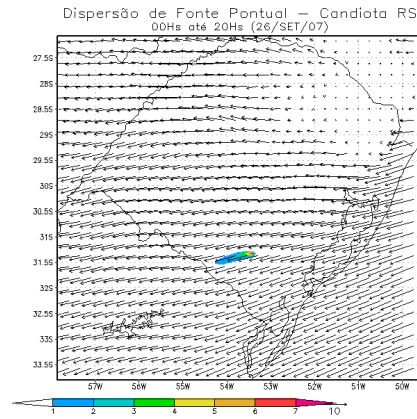


(f)

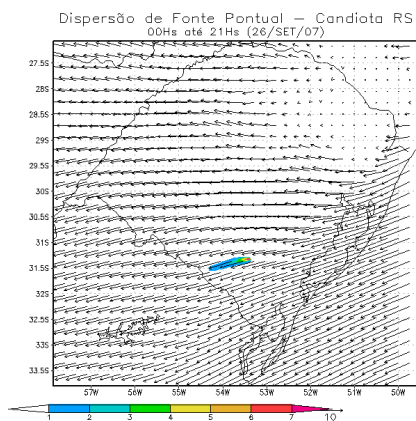
Figura A.11: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 18h (12h-18h)



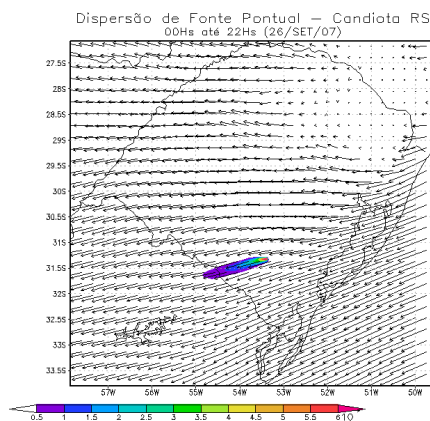
(a)



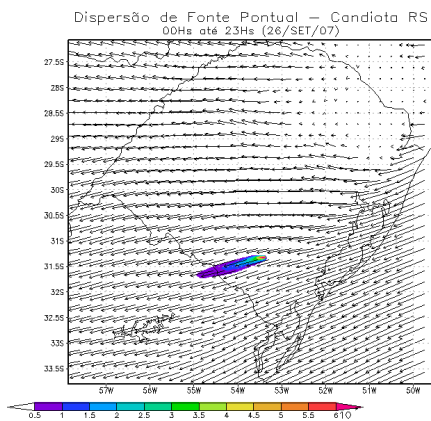
(b)



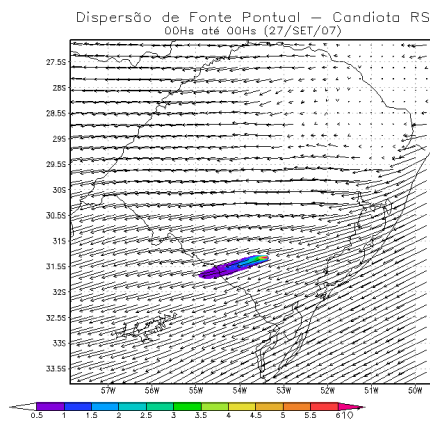
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.12: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 24h (18h-24h)

Zimora3D

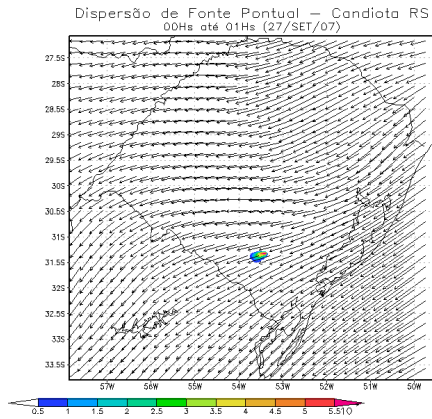
Zimora3D

Zimora3D

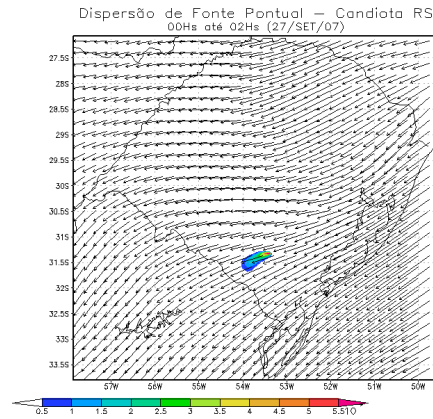
Zimora3D

Zimora3D

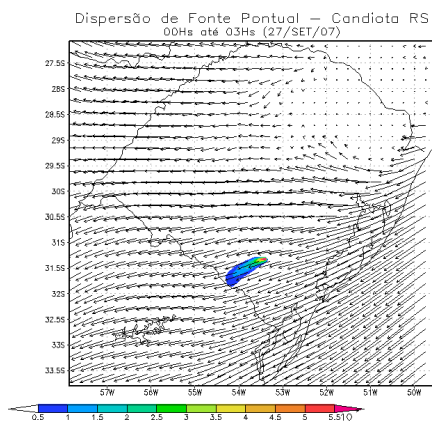
Zimora3D



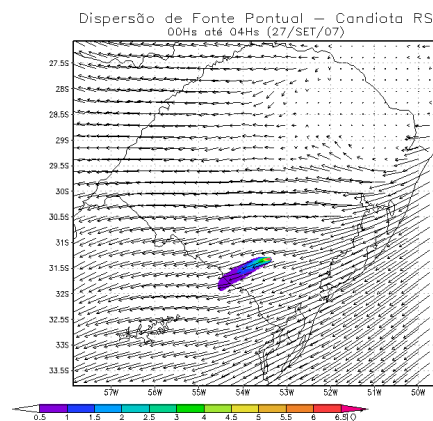
(a)



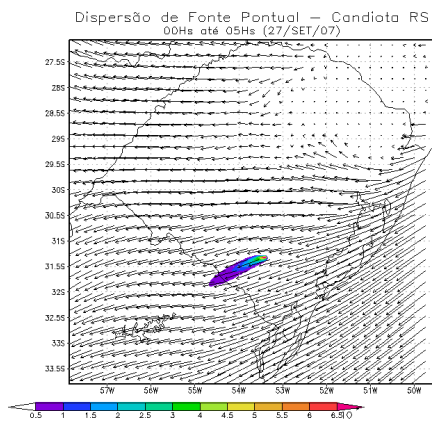
(b)



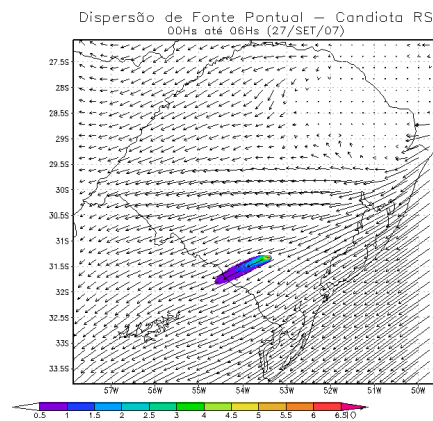
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.13: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 06h (00h-06h)

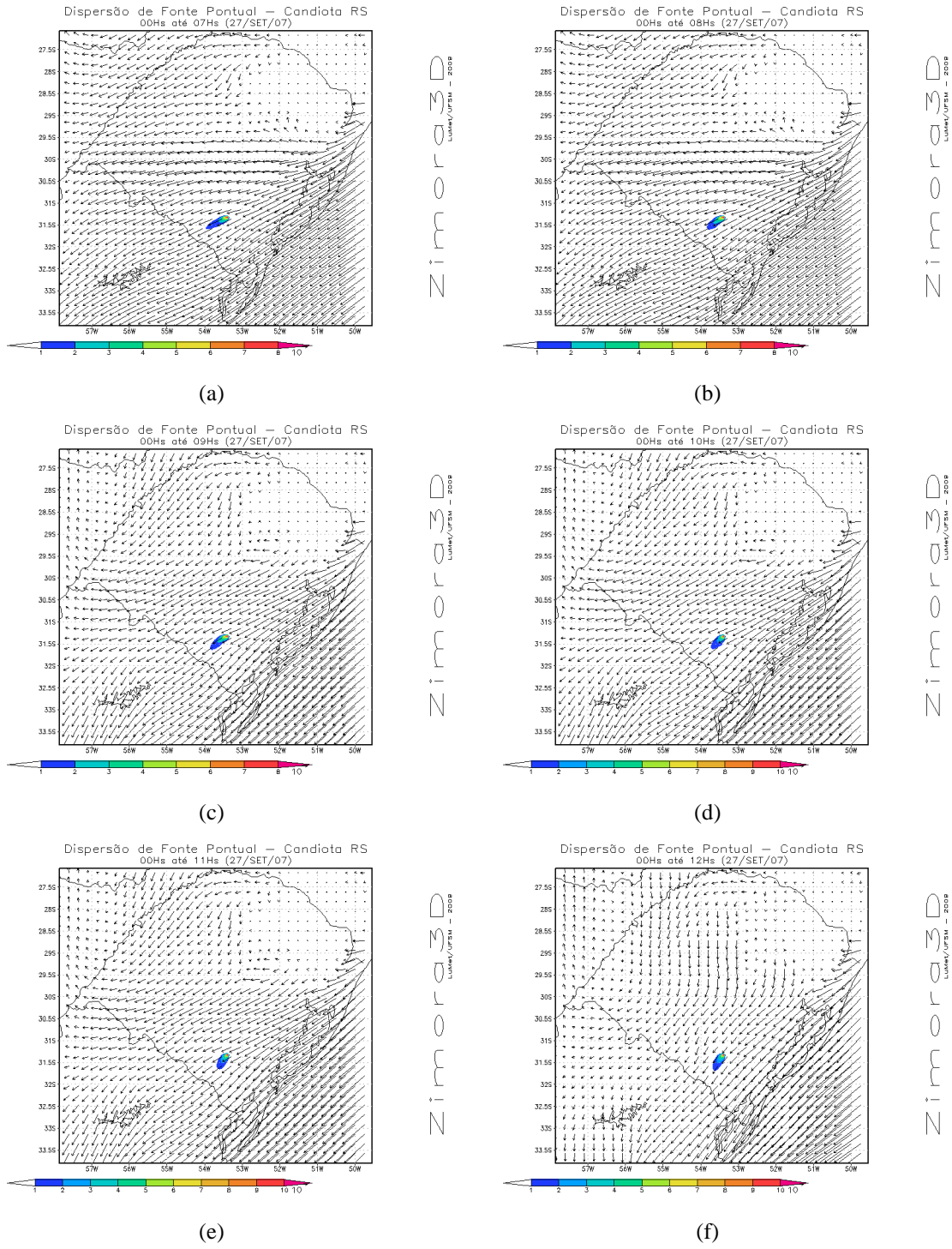
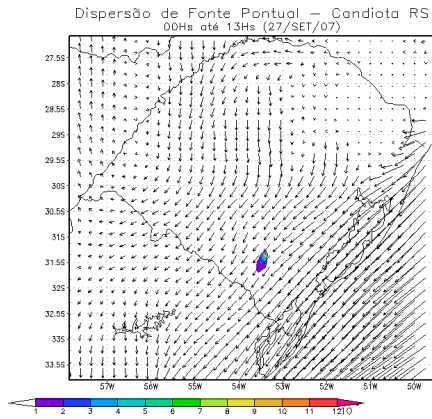
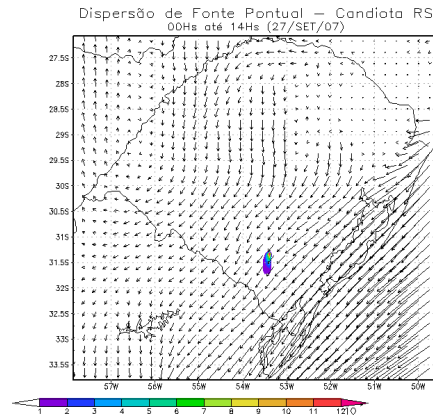


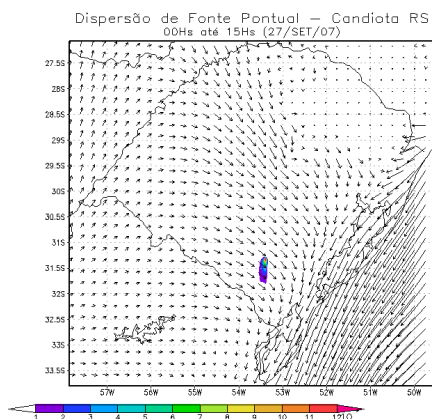
Figura A.14: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 12h (06h-12h)



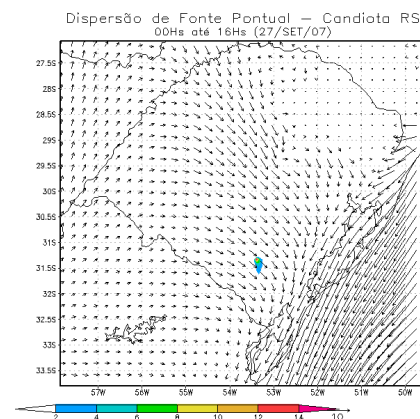
(a)



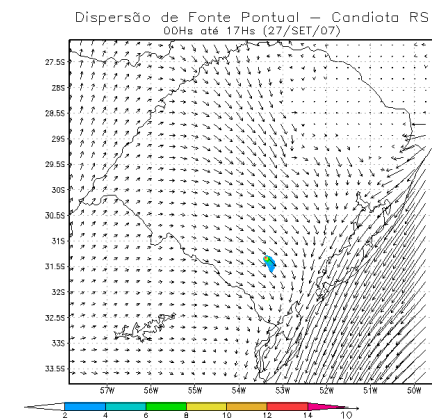
(b)



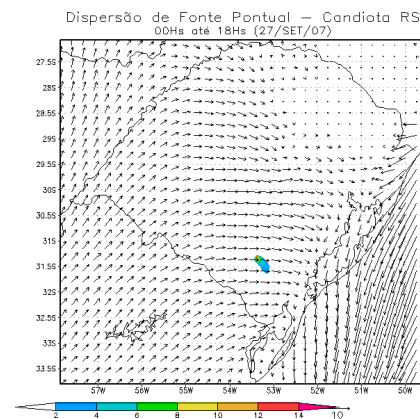
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.15: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 18h (12h-18h)

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

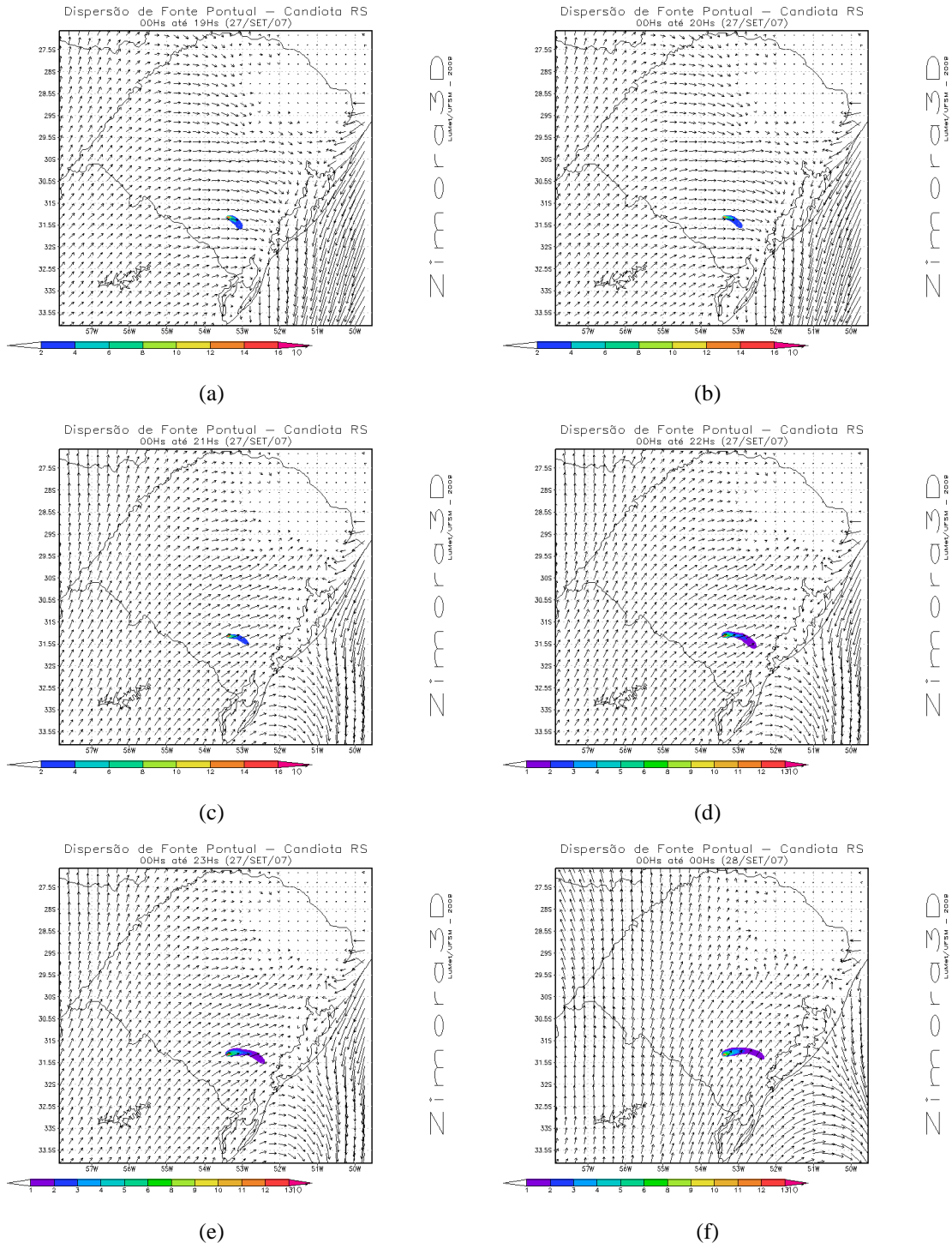
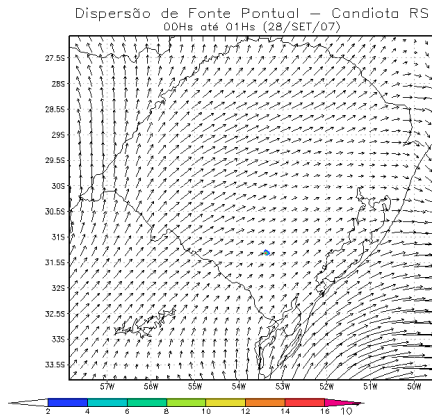
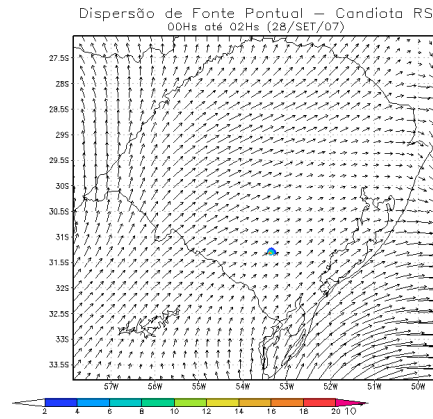


Figura A.16: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 24h (18h-24h)

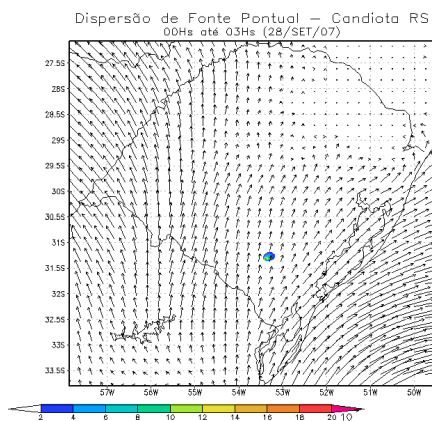




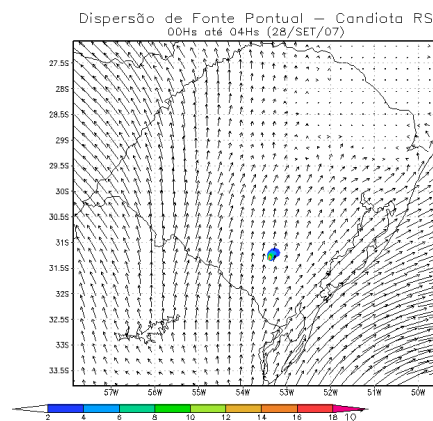
(a)



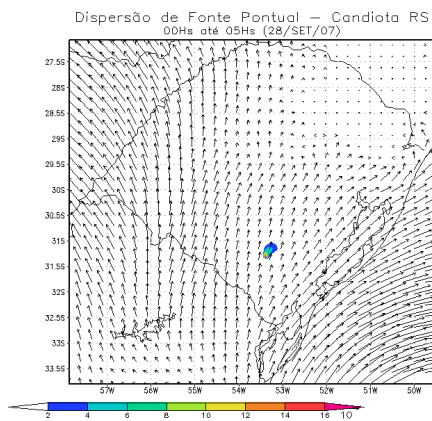
(b)



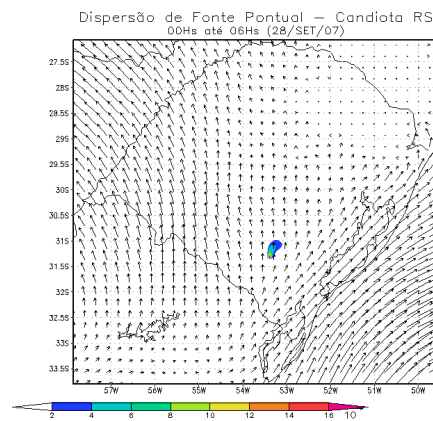
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.17: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 06h (00h-06h)

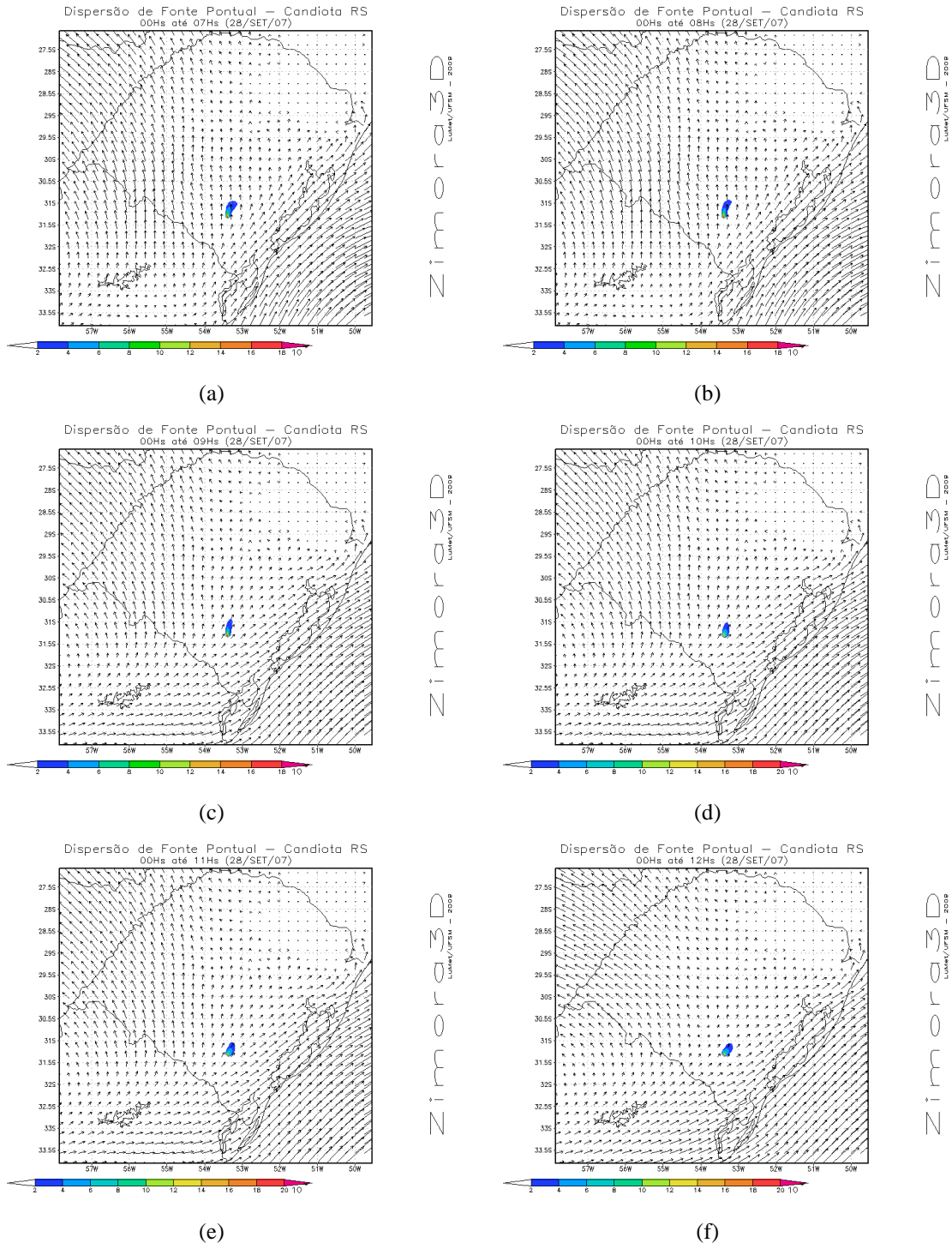
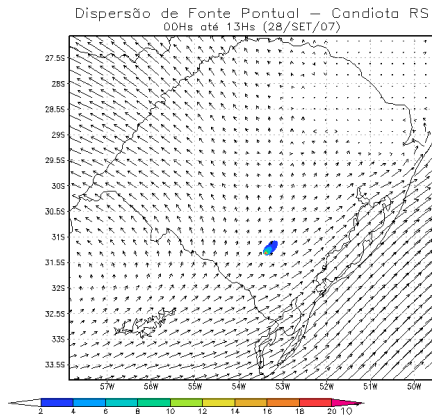
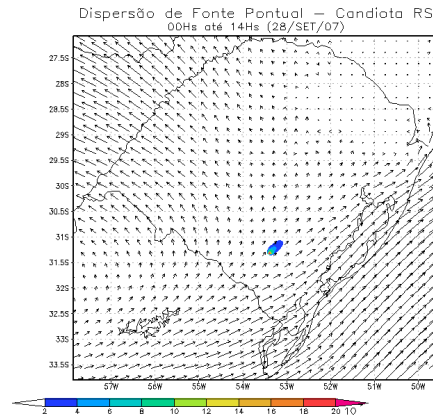


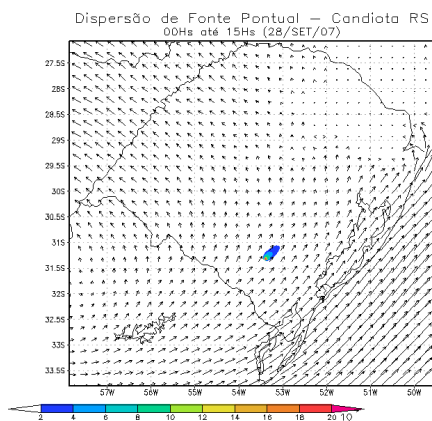
Figura A.18: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 12h (06h-12h)



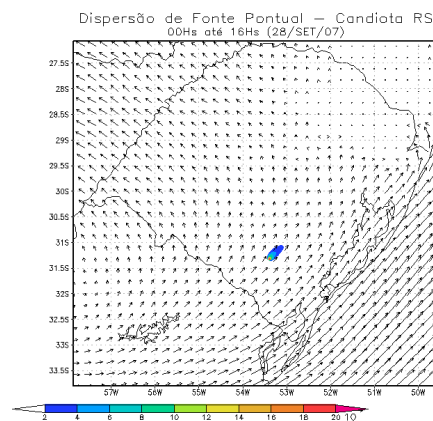
(a)



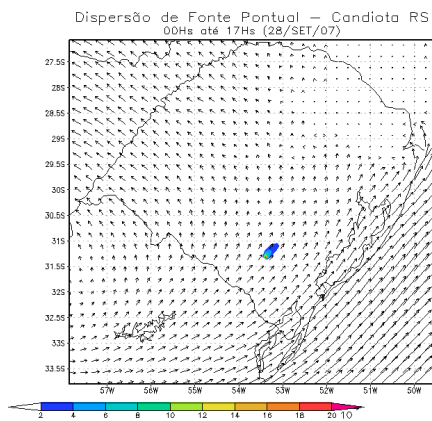
(b)



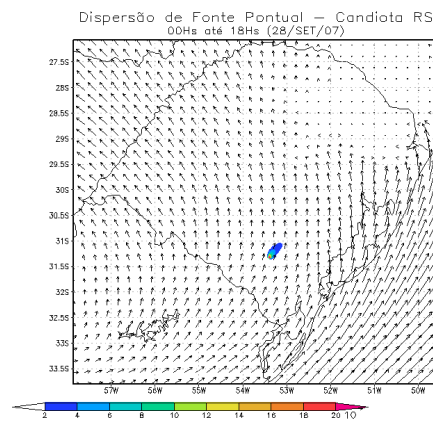
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.19: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 18h (12h-18h)

Zimora3D

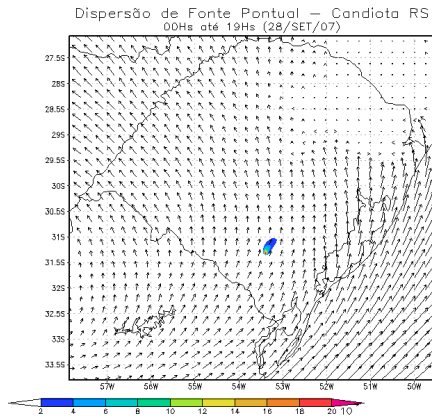
Zimora3D

Zimora3D

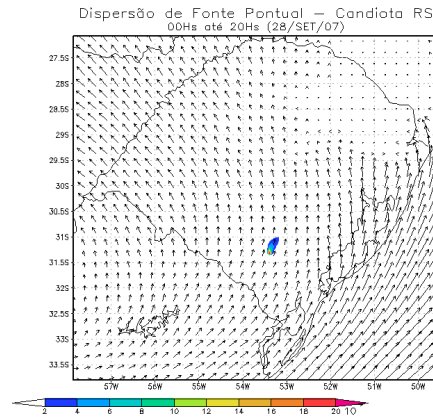
Zimora3D

Zimora3D

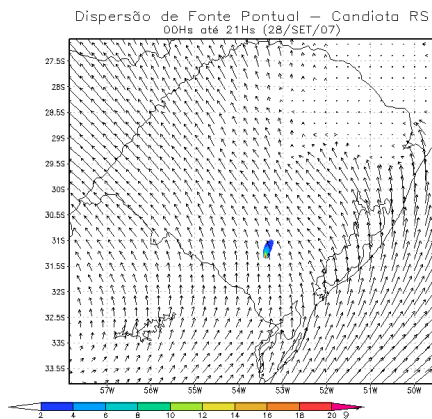
Zimora3D



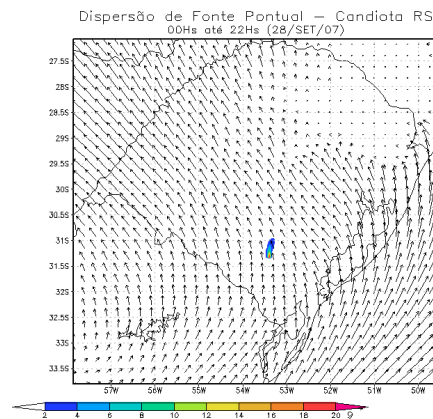
(a)



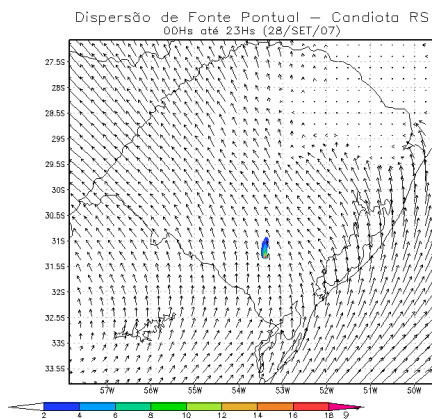
(b)



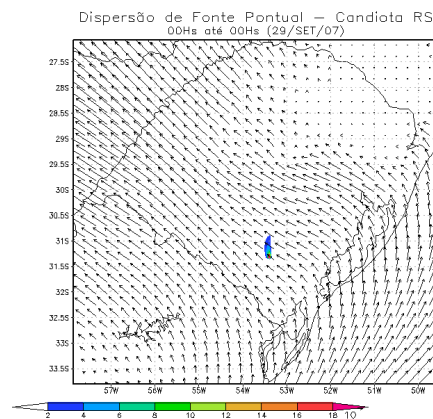
(c)



(d)

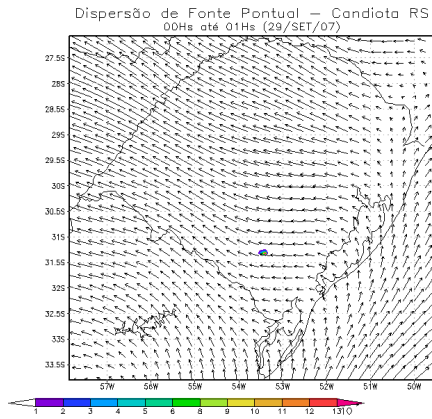


(e)

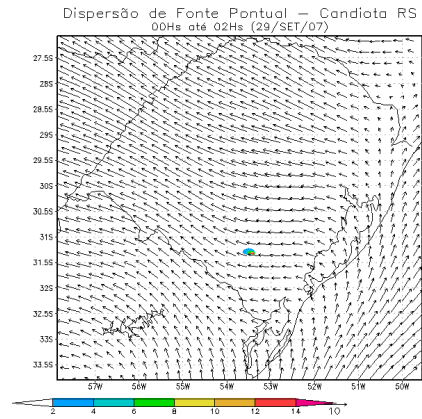


(f)

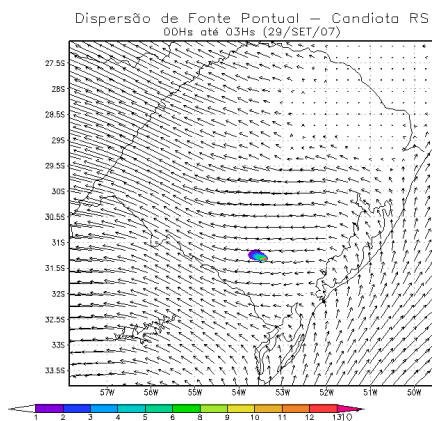
Figura A.20: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 24h (18h-24h)



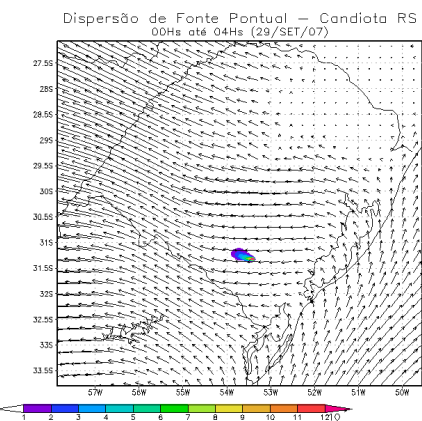
(a)



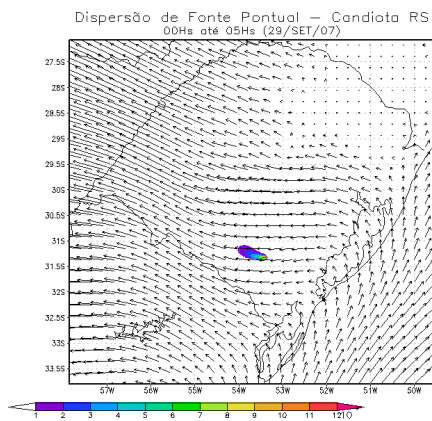
(b)



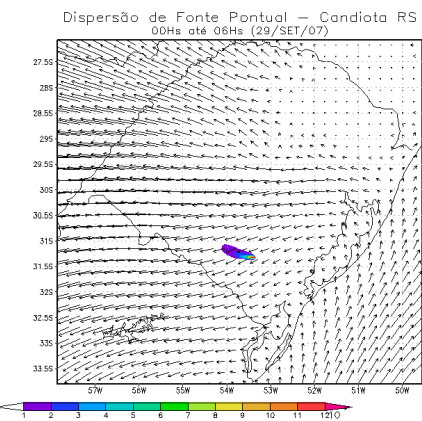
(c)



(d)

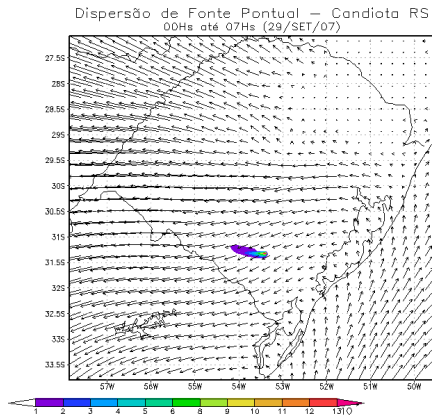


(e)

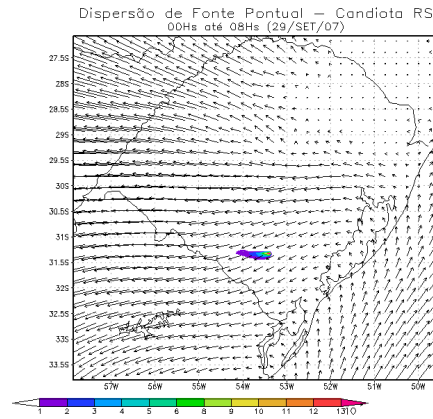


(f)

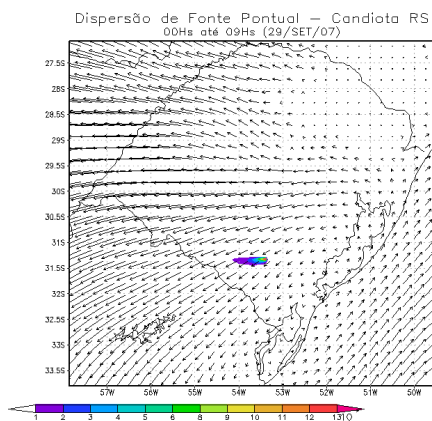
Figura A.21: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 06h (00h-06h)



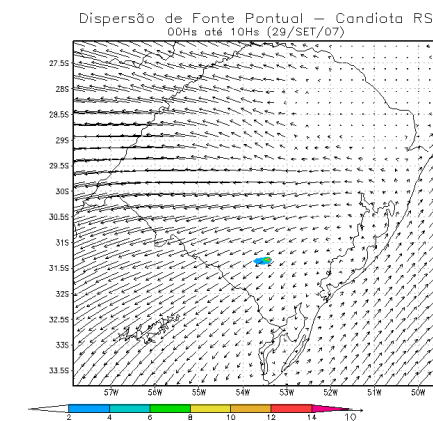
(a)



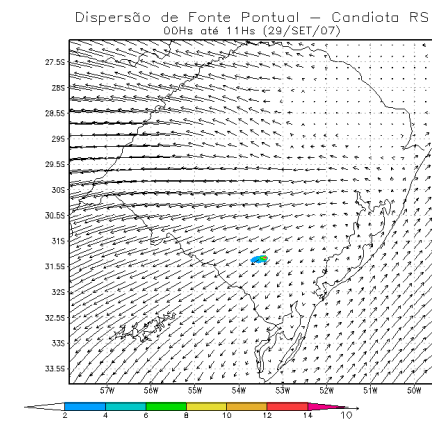
(b)



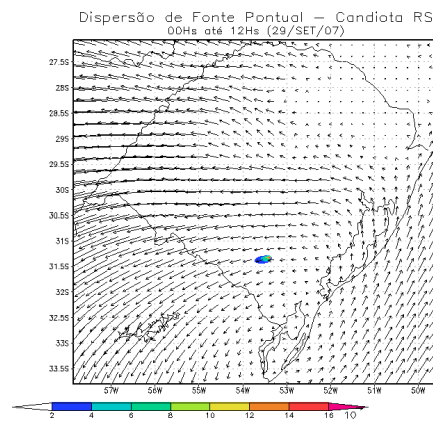
(c)



(d)

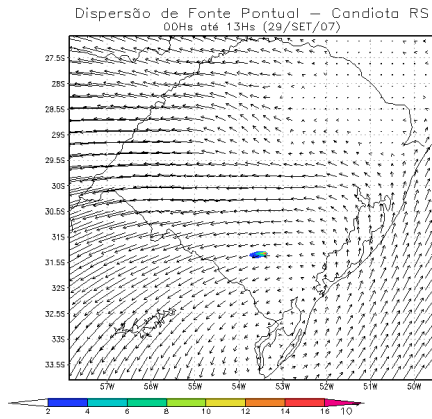


(e)

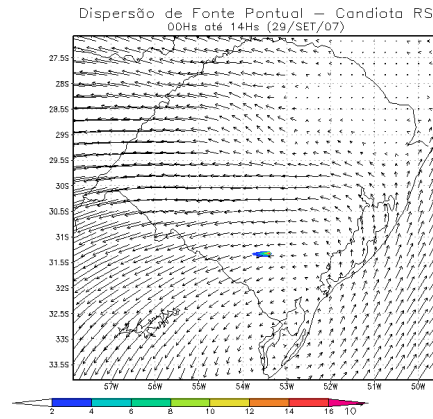


(f)

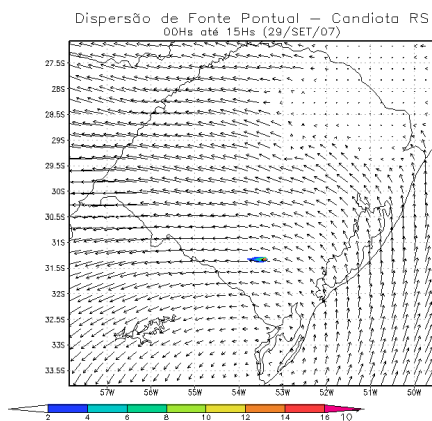
Figura A.22: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 12h (06h-12h)



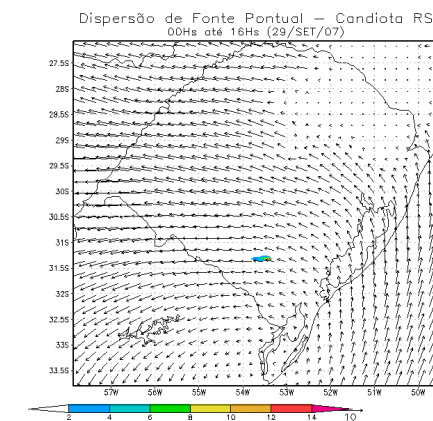
(a)



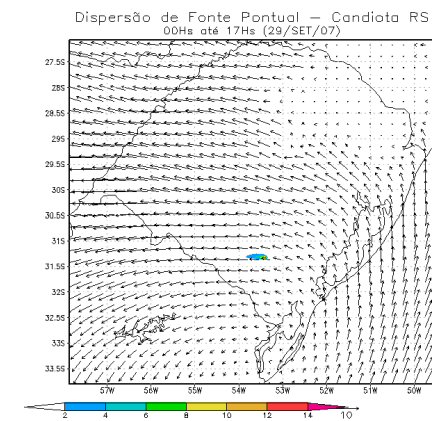
(b)



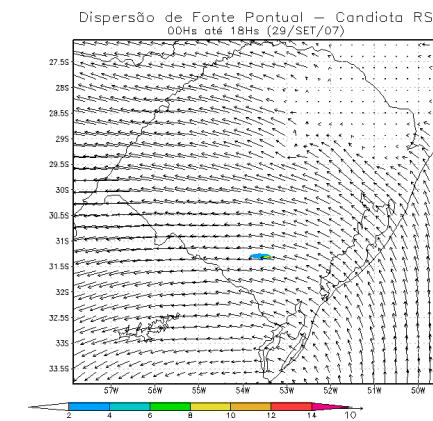
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.23: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 18h (12h-18h)

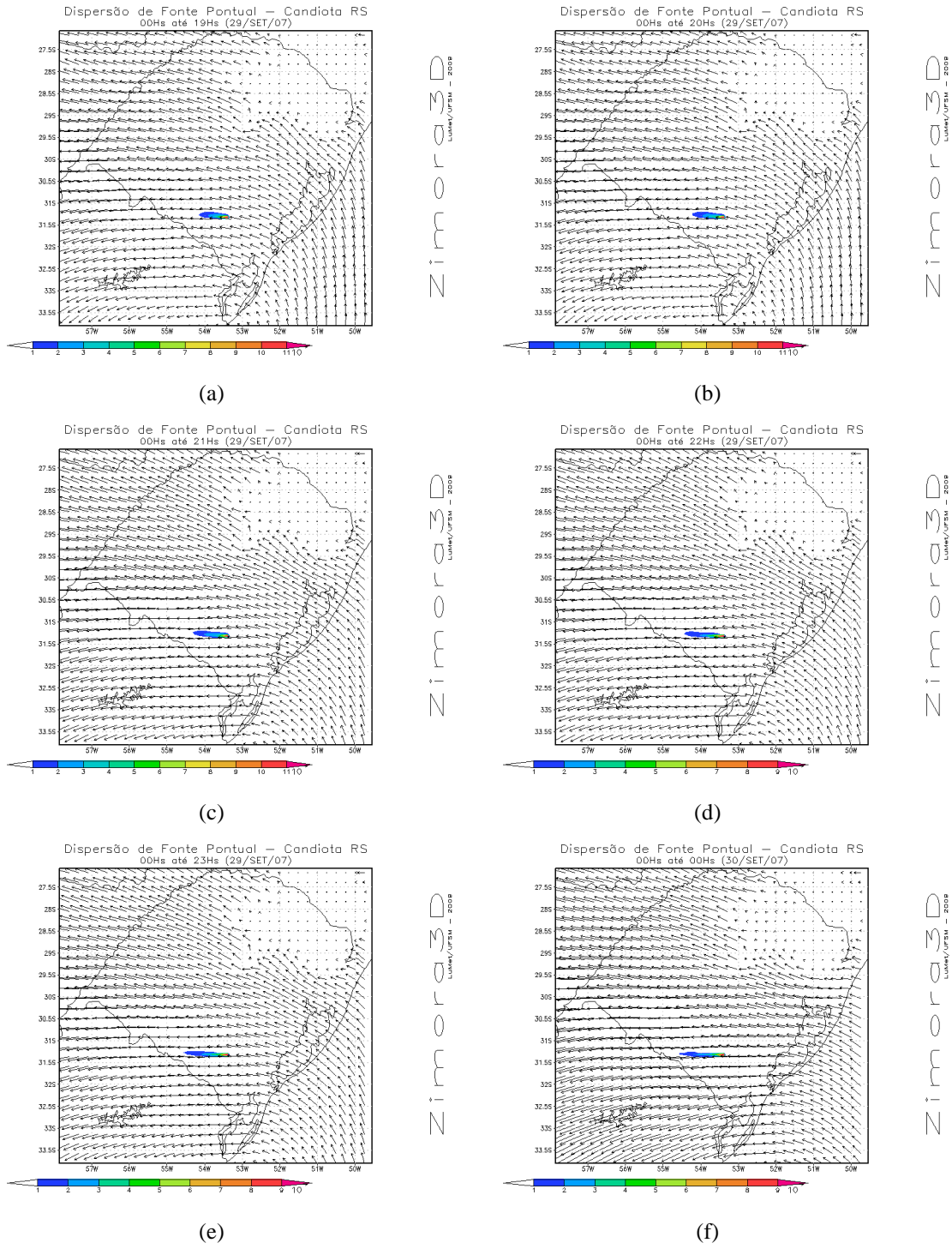
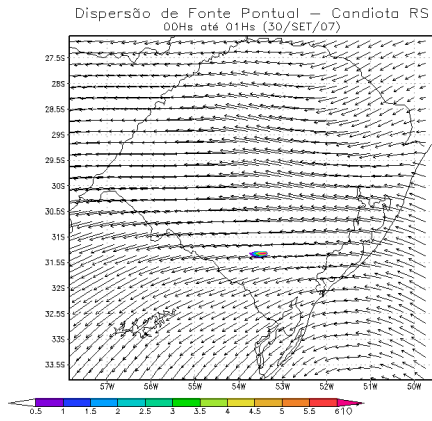
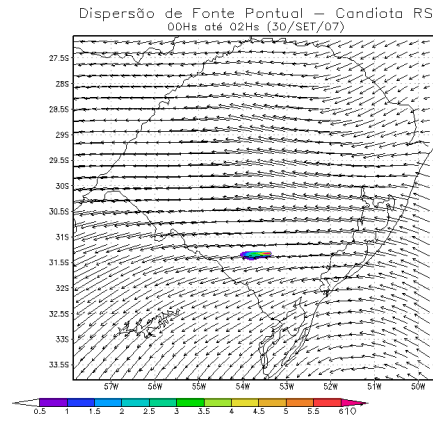


Figura A.24: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 24h (18h-24h)

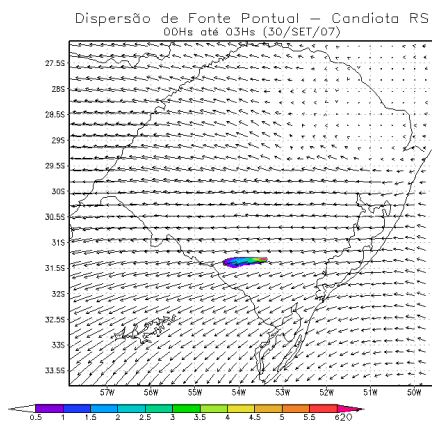




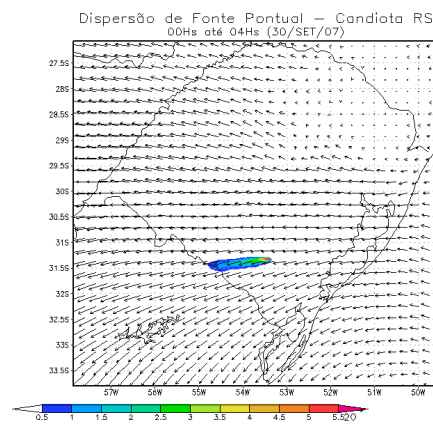
(a)



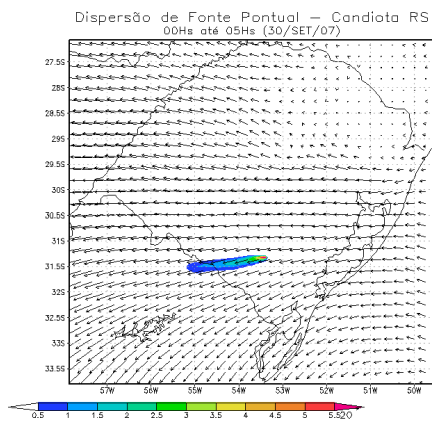
(b)



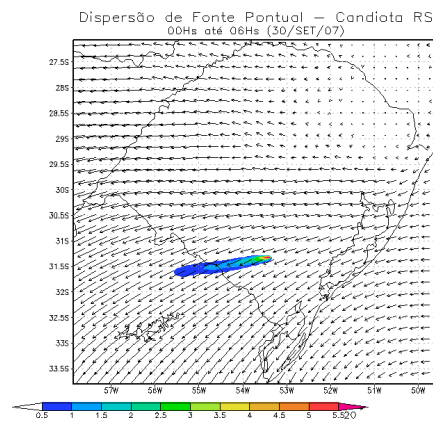
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.25: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 30/09/2007 - Período 06h (00h-06h)

Zimora3D

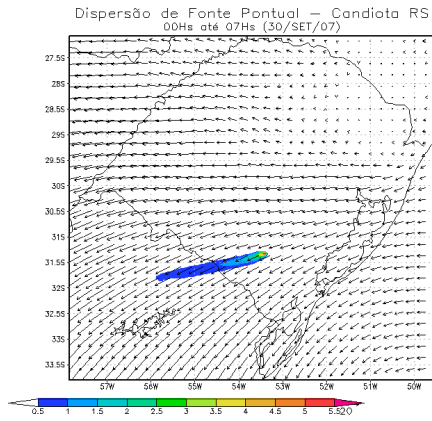
Zimora3D

Zimora3D

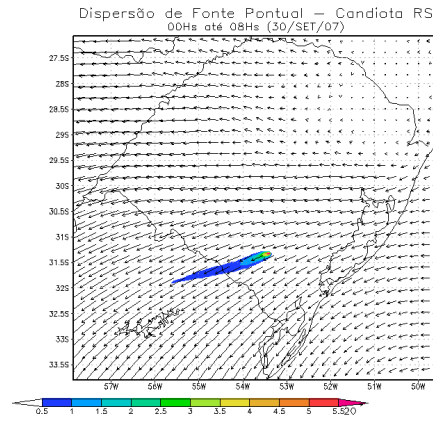
Zimora3D

Zimora3D

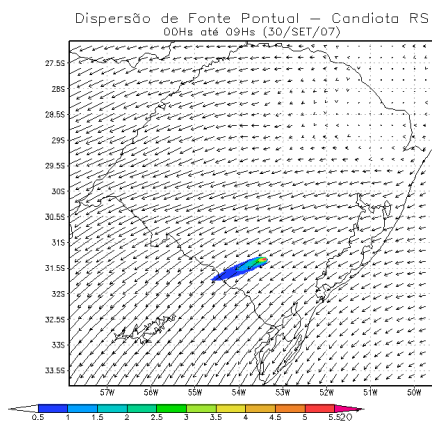
Zimora3D



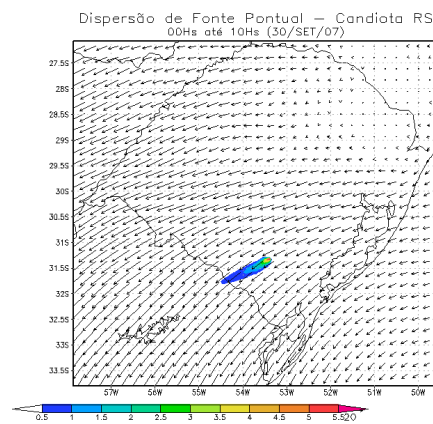
(a)



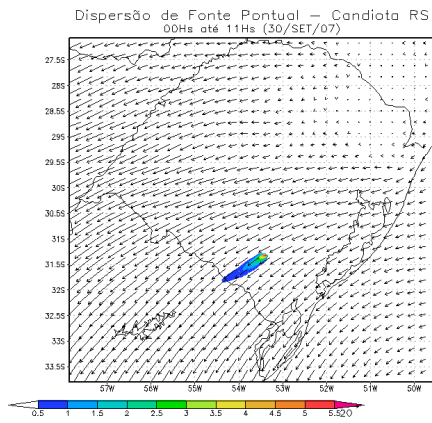
(b)



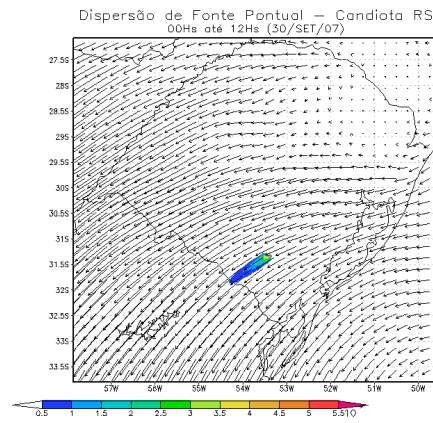
(c)



(d)

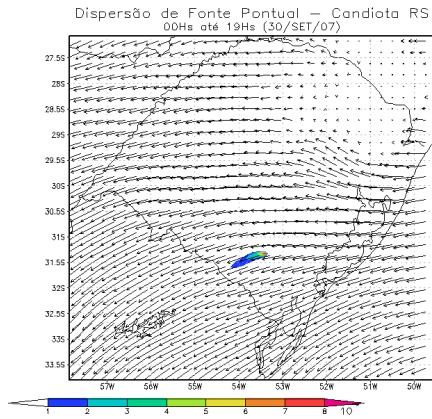


(e)

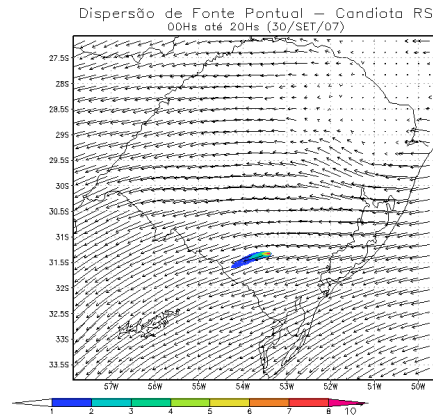


(f)

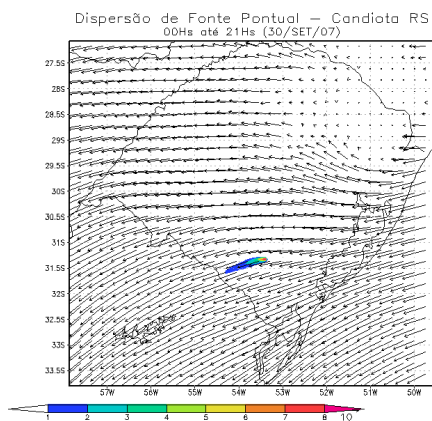
Figura A.26: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 30/09/2007 - Período 12h (06h-12h)



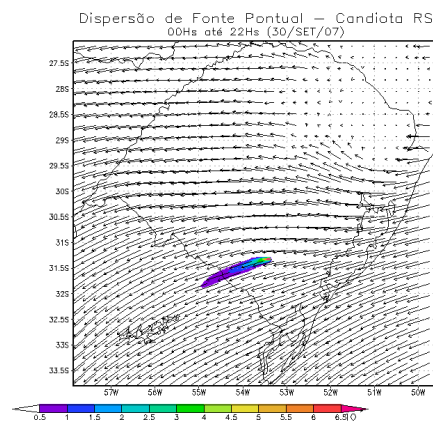
(a)



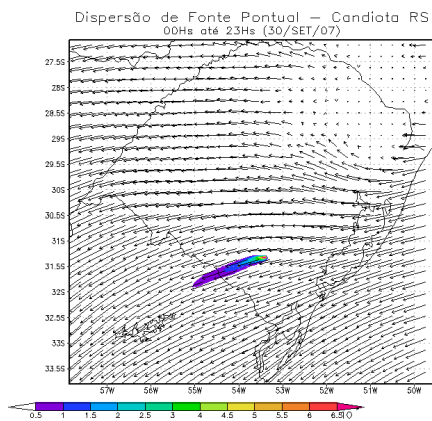
(b)



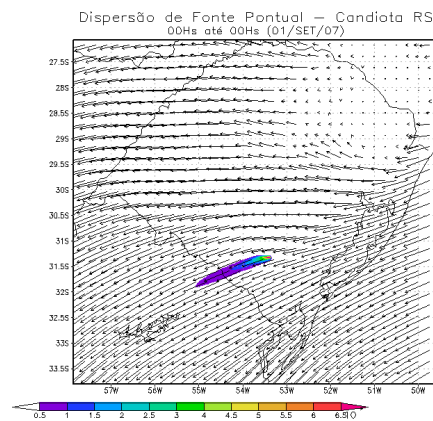
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.27: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 30/09/2007 - Período 24h (18h-24h)

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

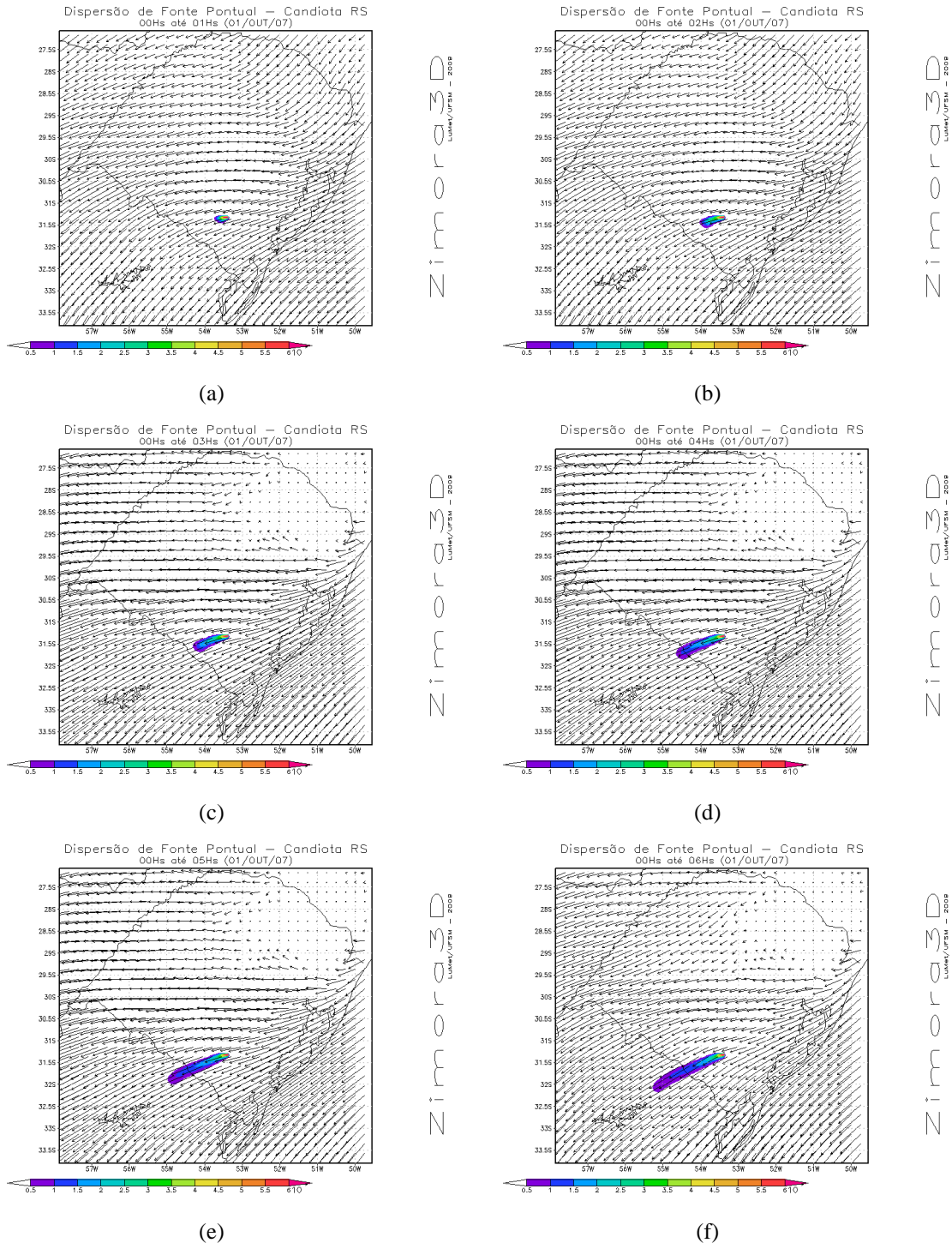
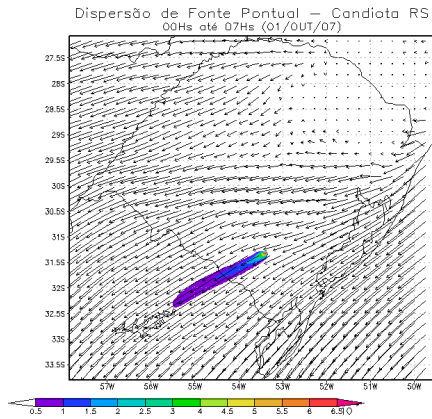
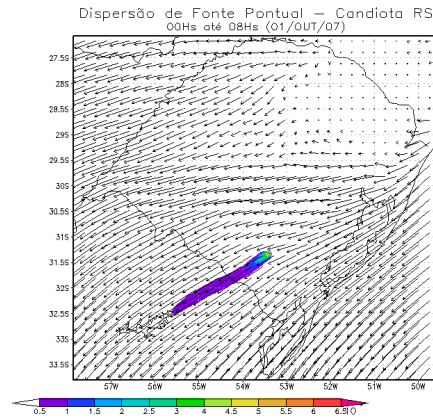


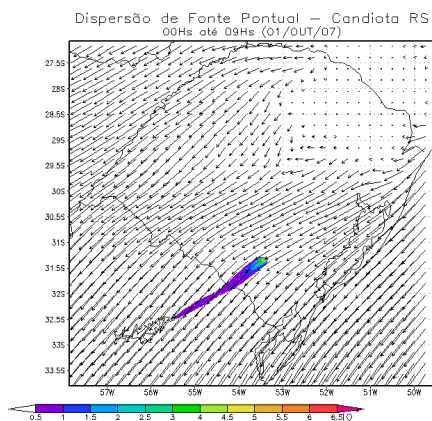
Figura A.28: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 06h (00h-06h)



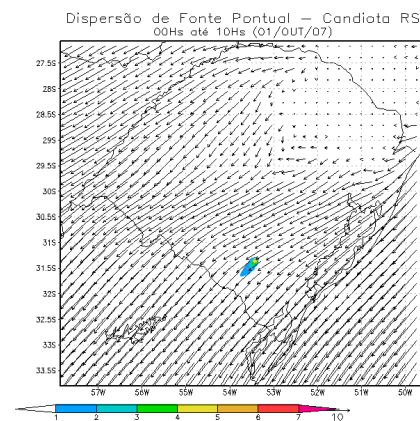
(a)



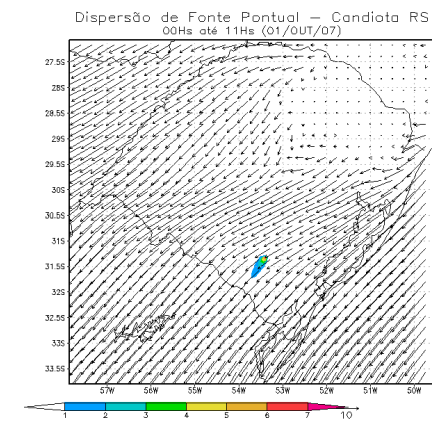
(b)



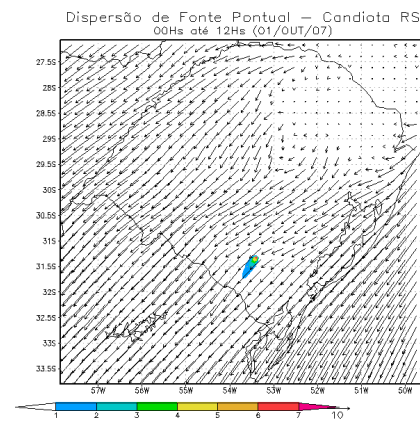
(c)



(d)

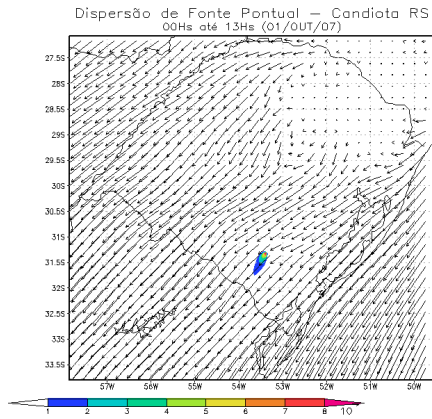


(e)

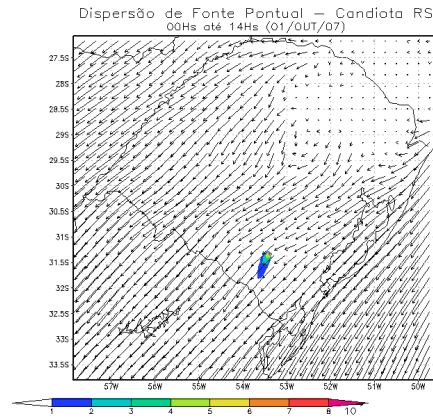


(f)

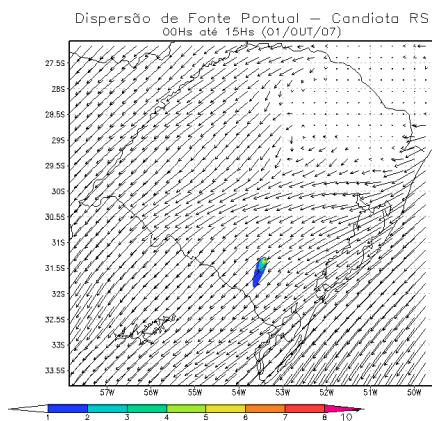
Figura A.29: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 12h (06h-12h)



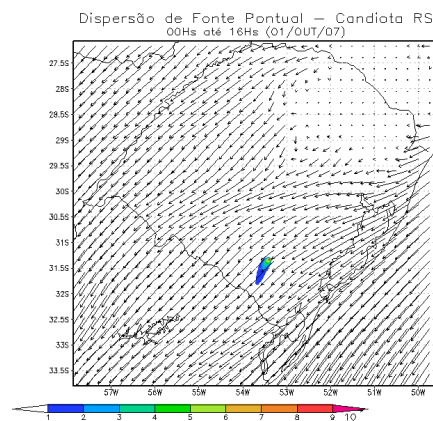
(a)



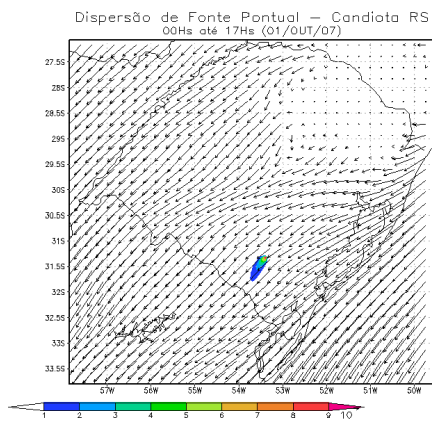
(b)



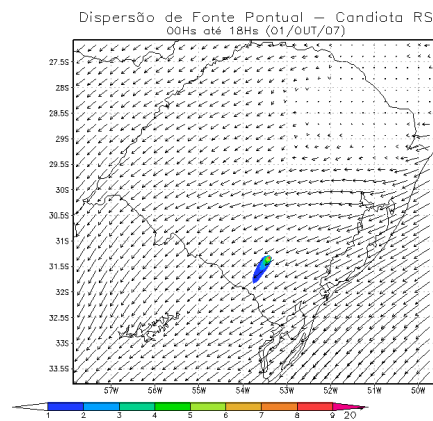
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.30: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 18h (12h-18h)

Zimora3D

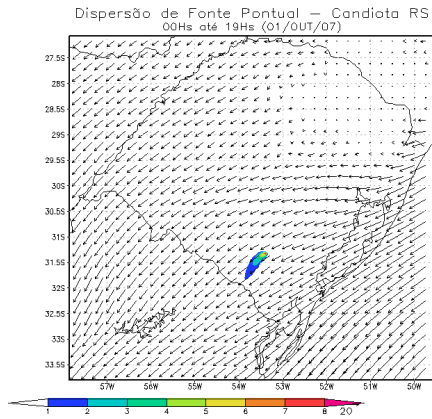
Zimora3D

Zimora3D

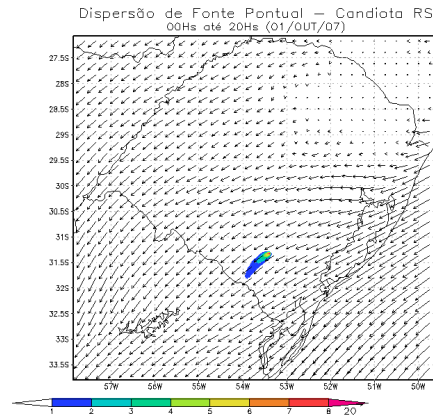
Zimora3D

Zimora3D

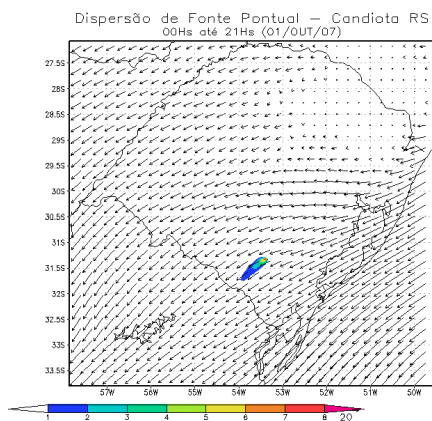
Zimora3D



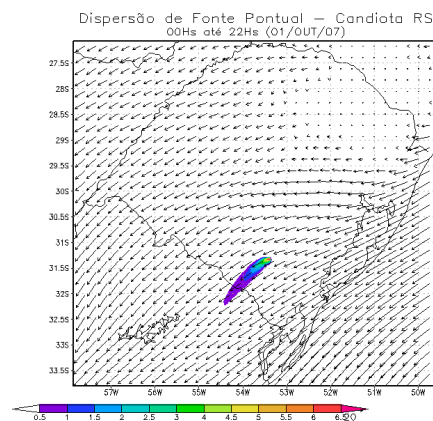
(a)



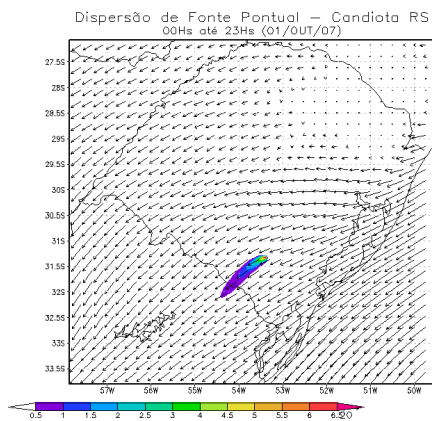
(b)



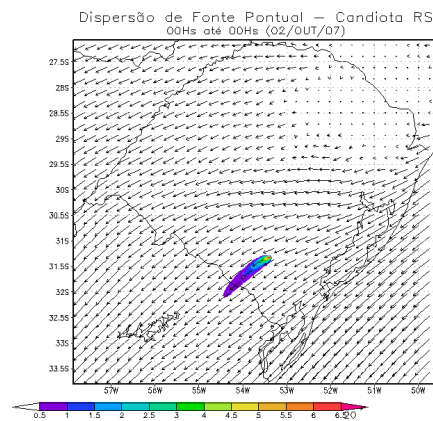
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura A.31: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 24h (18h-24h)

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

Zimora3D

***APÊNDICE B – Simulações do Zimora -  
Ampliação sobre estações***



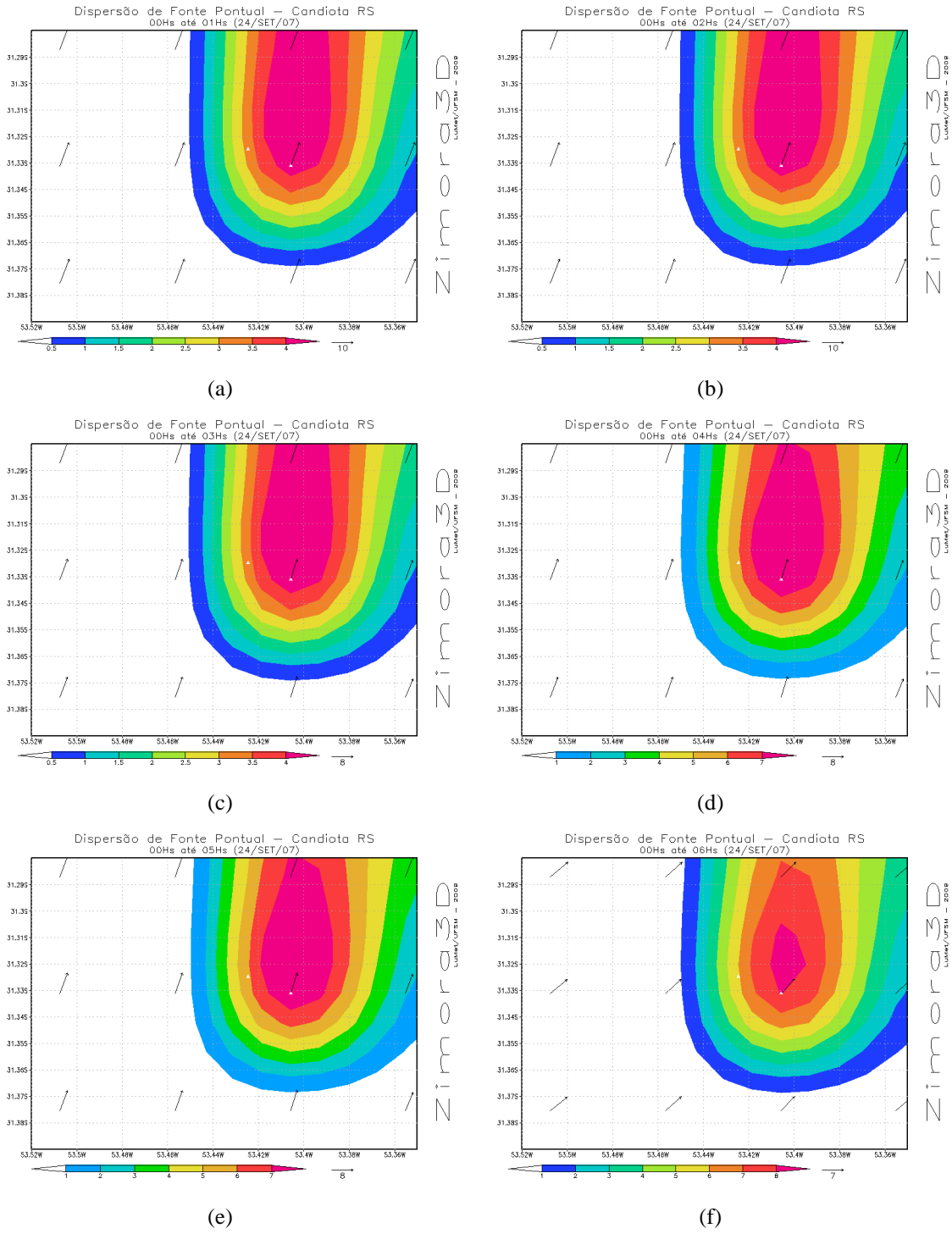


Figura B.1: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações (Triângulos brancos ao centro da figura)

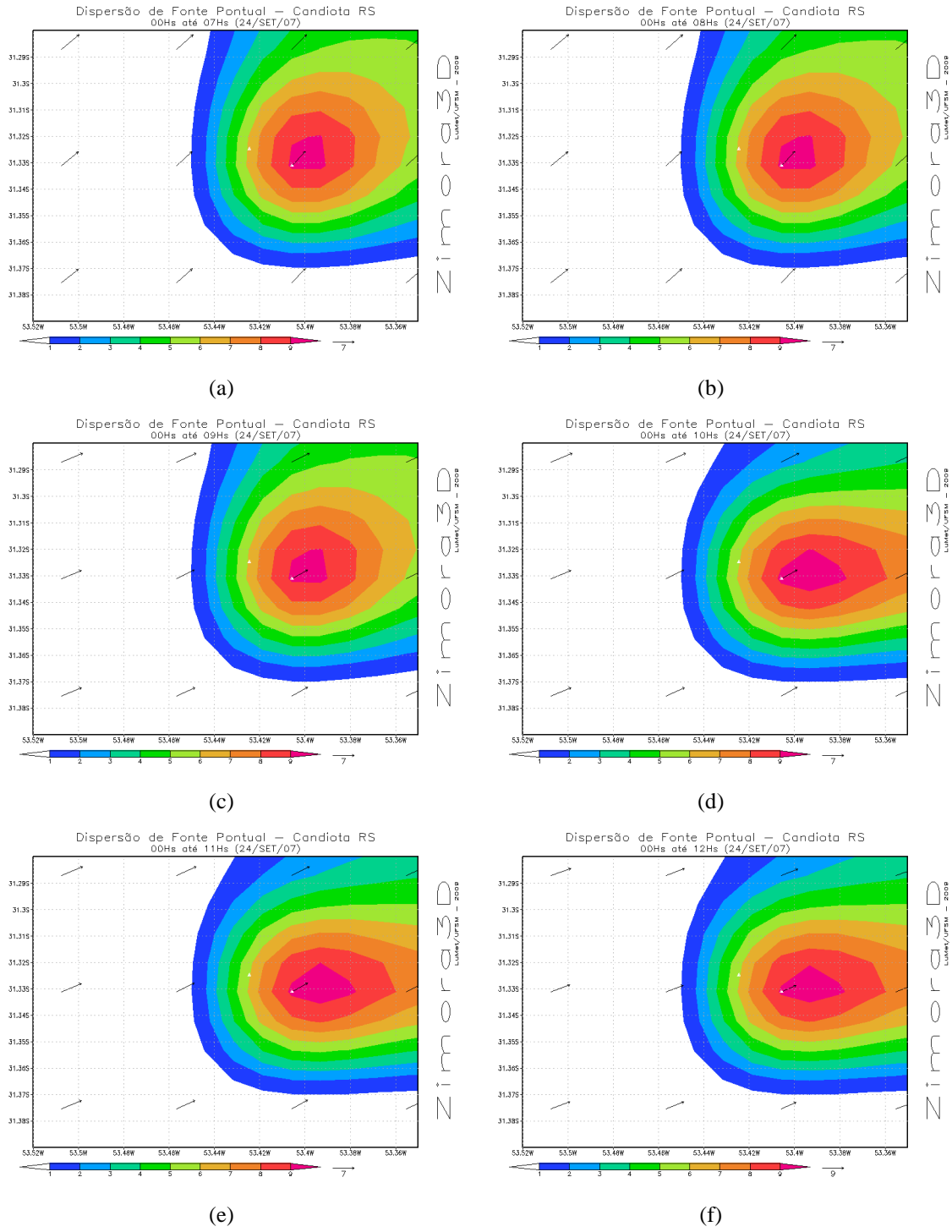


Figura B.2: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

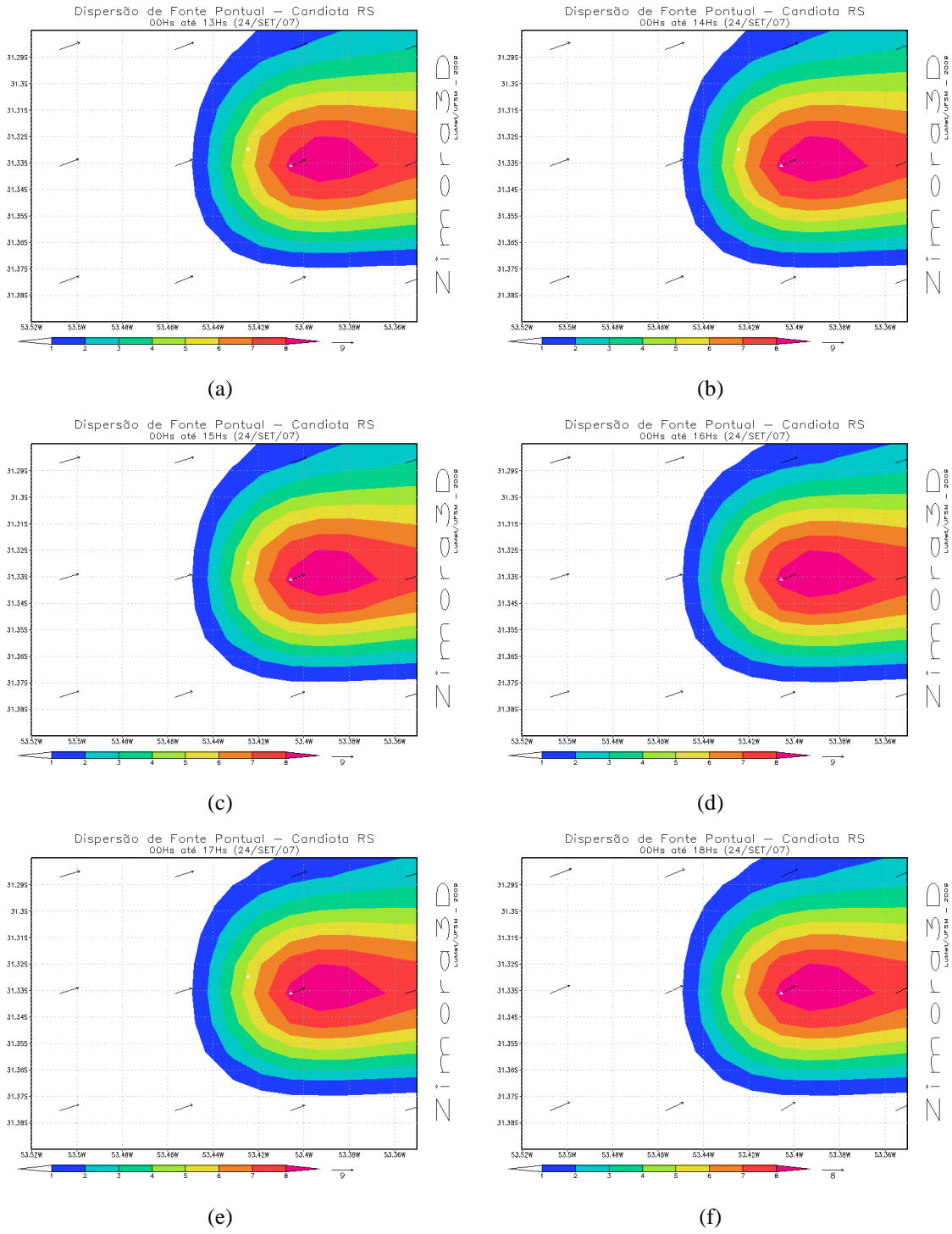


Figura B.3: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações

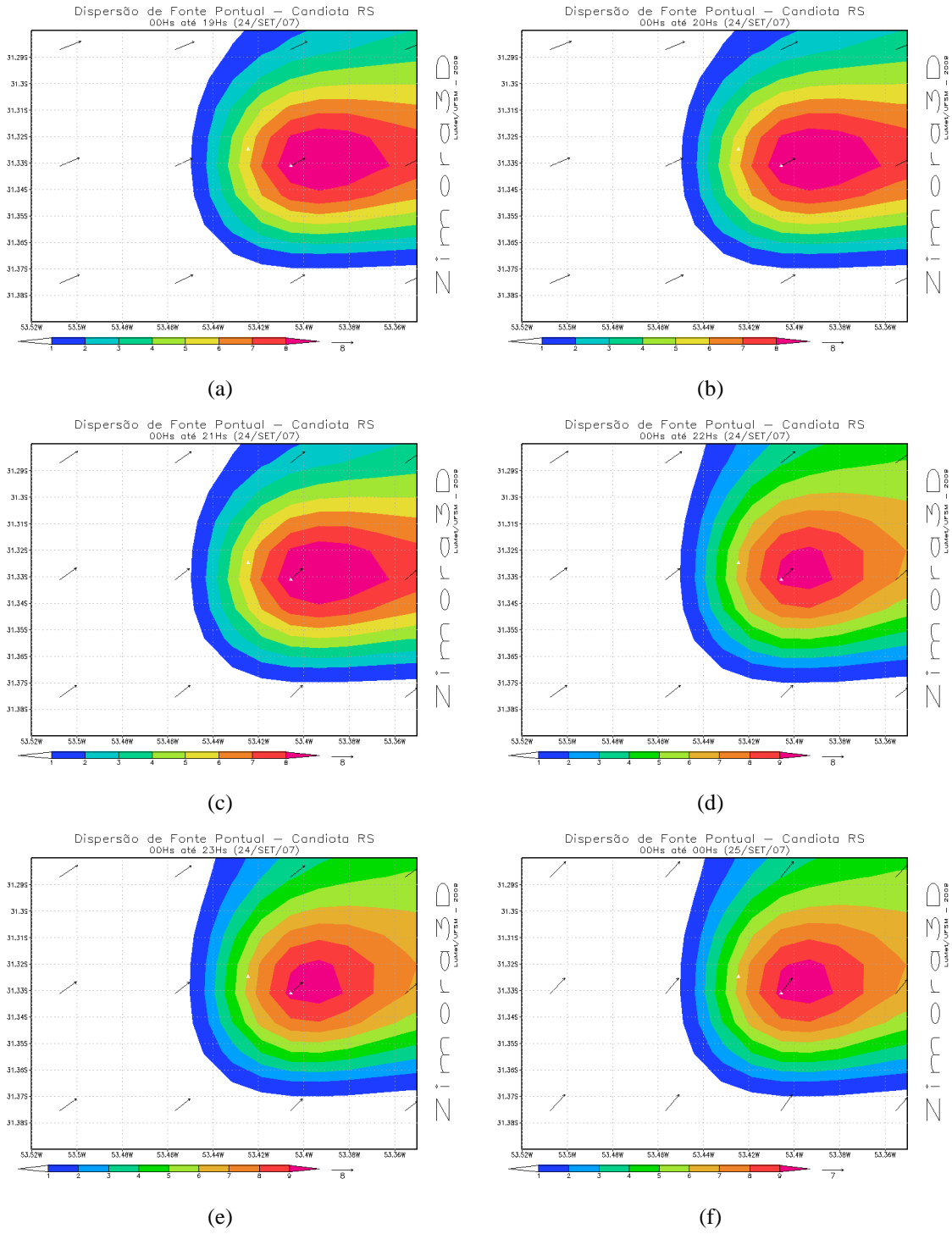


Figura B.4: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 24/09/2007 - Período 18h (18h-24h) - Ampliação sobre as estações

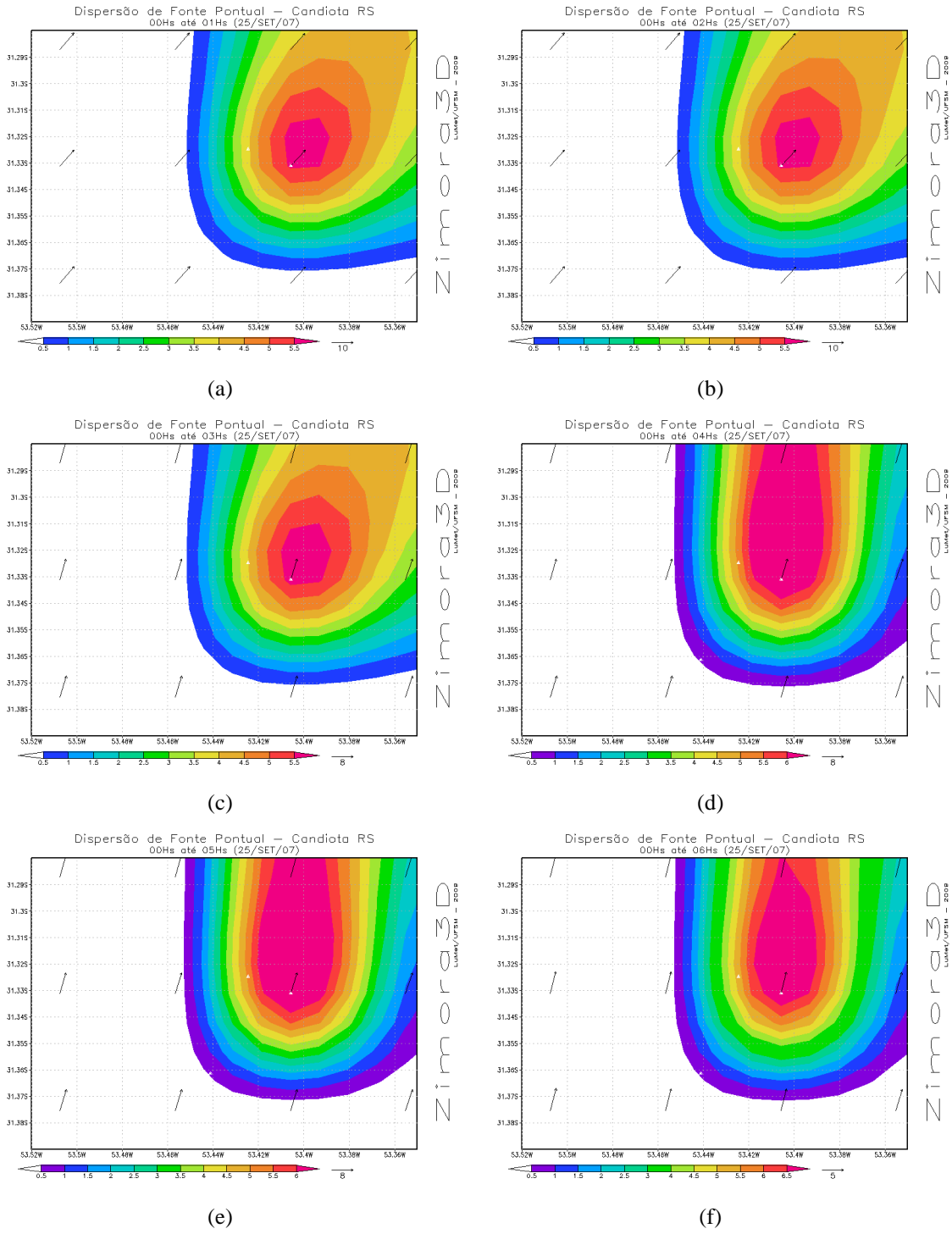


Figura B.5: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações

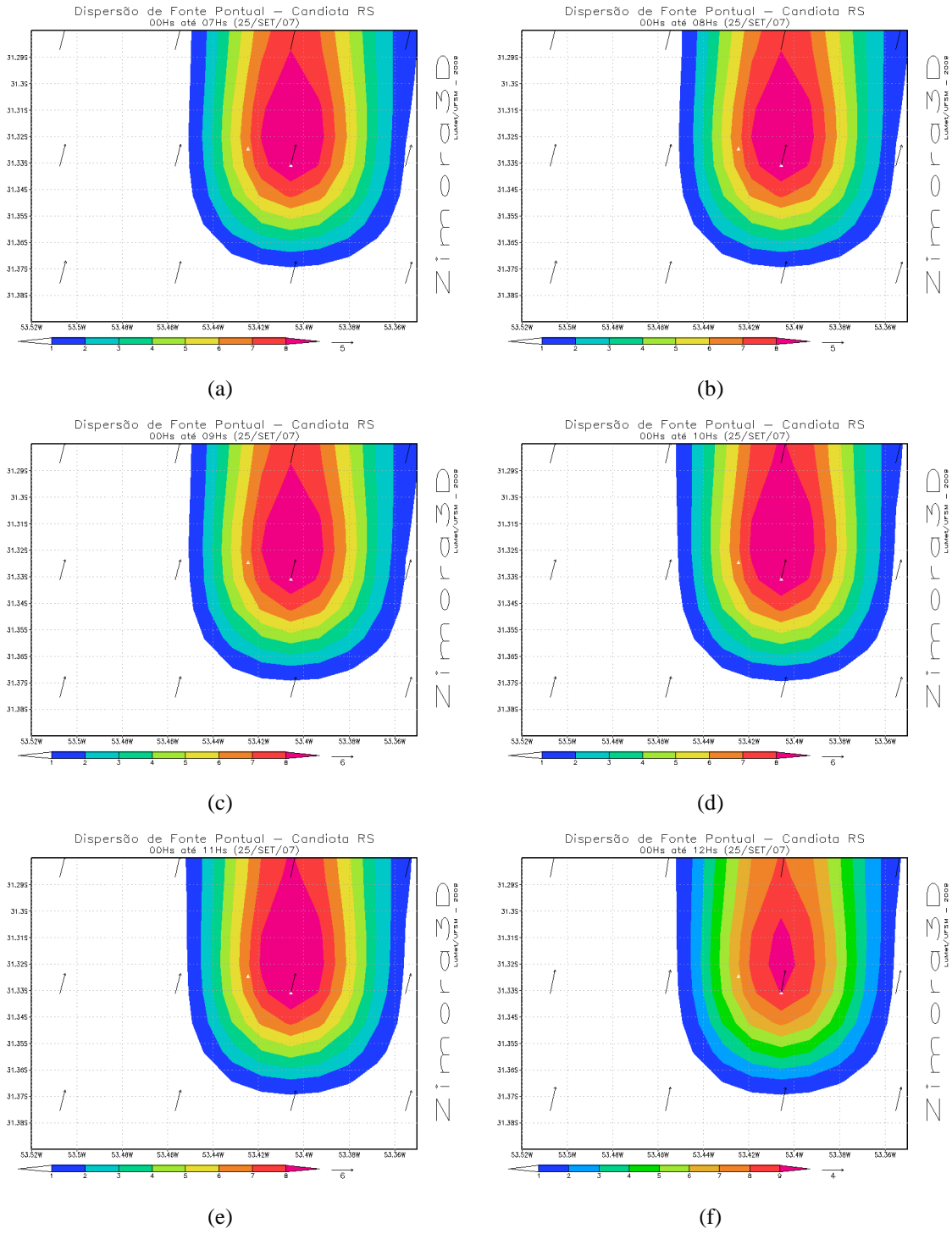


Figura B.6: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

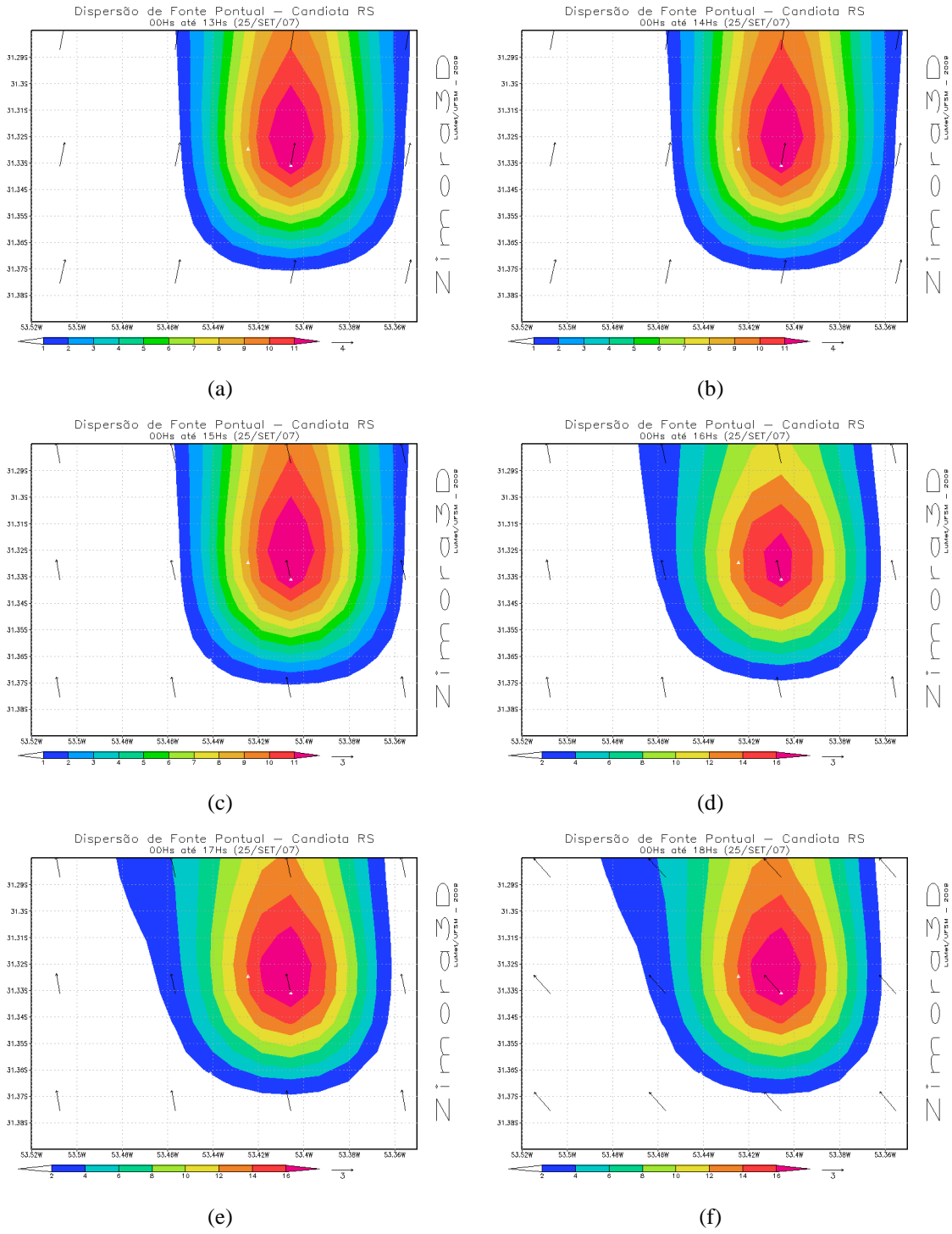


Figura B.7: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações

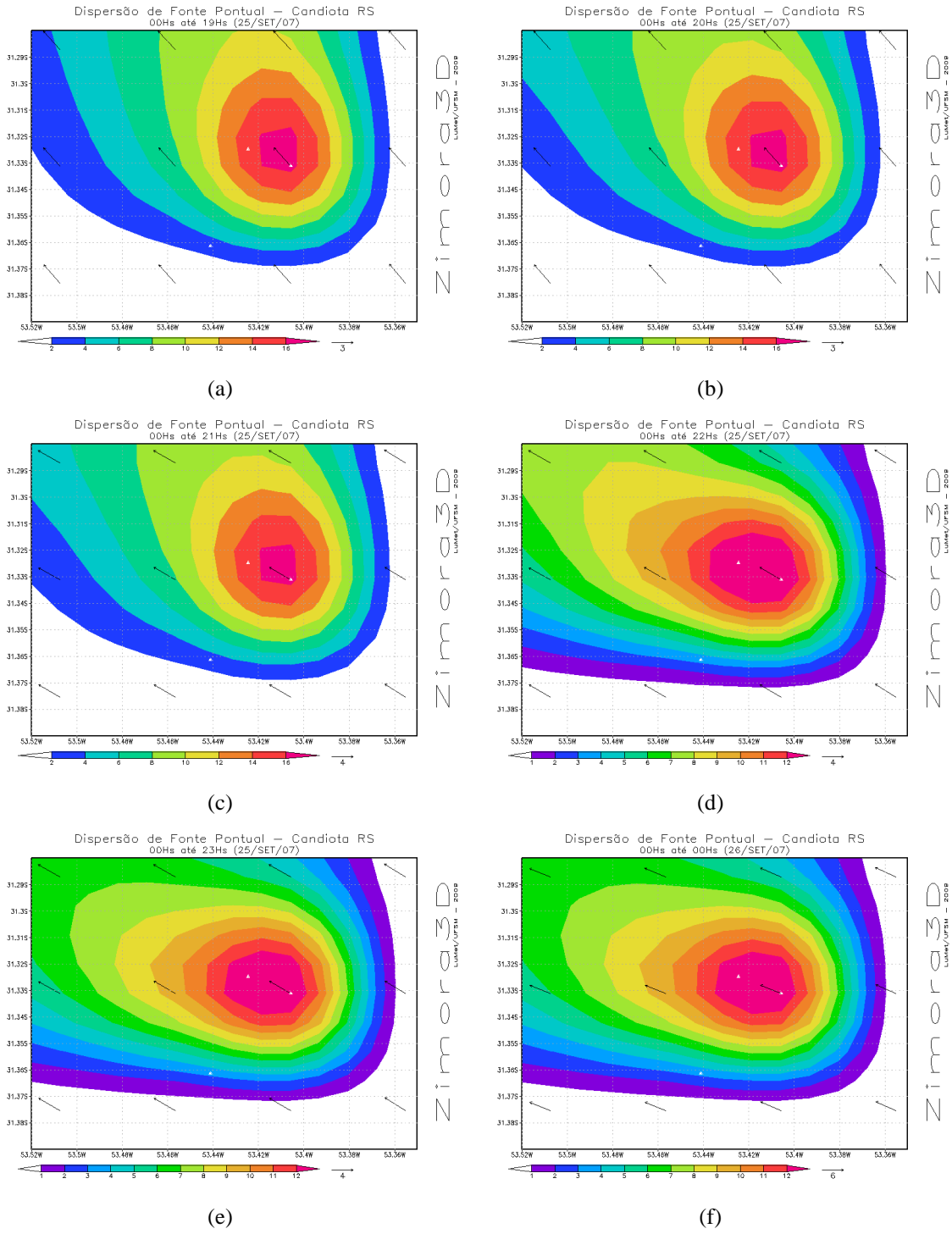


Figura B.8: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 25/09/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações



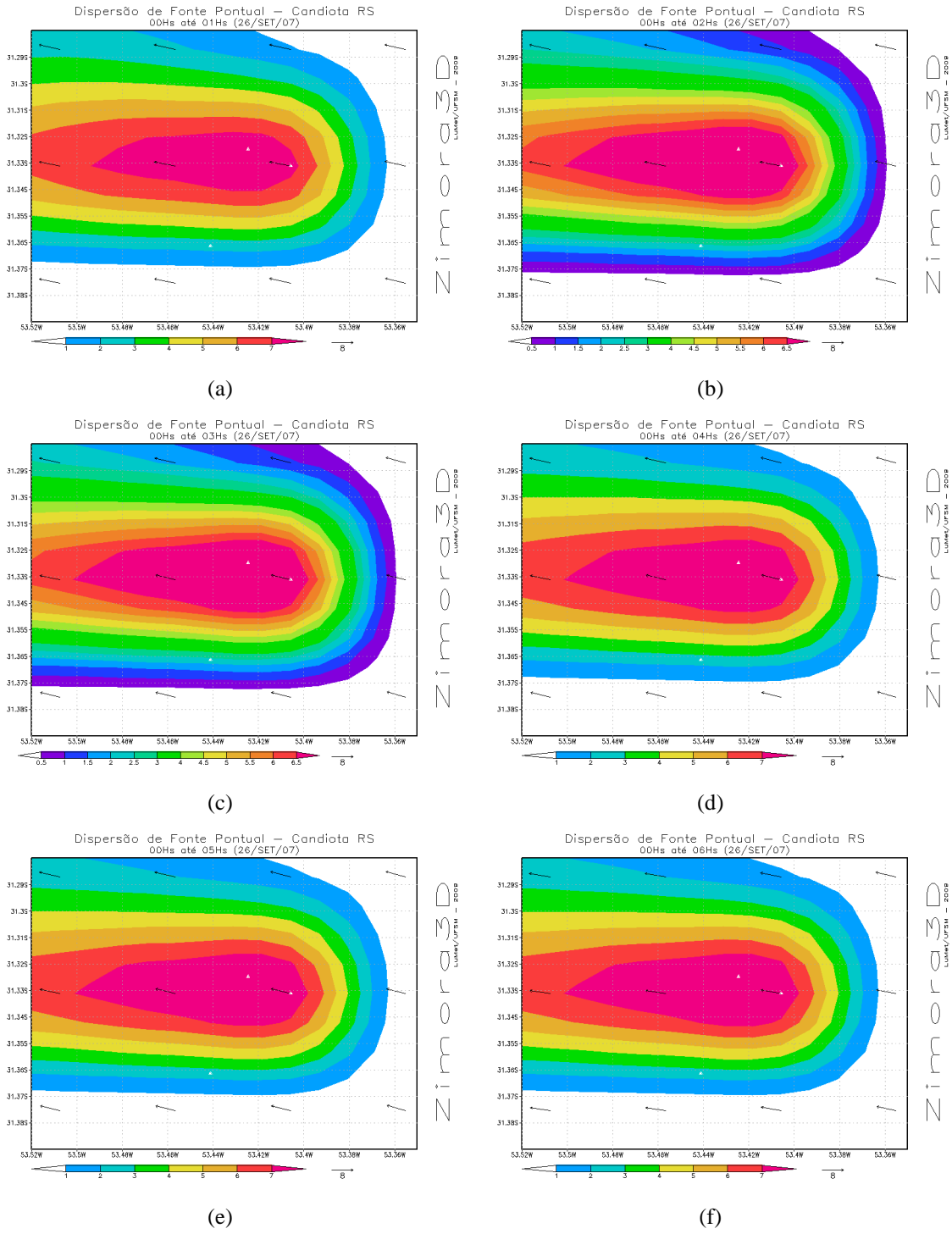


Figura B.9: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações

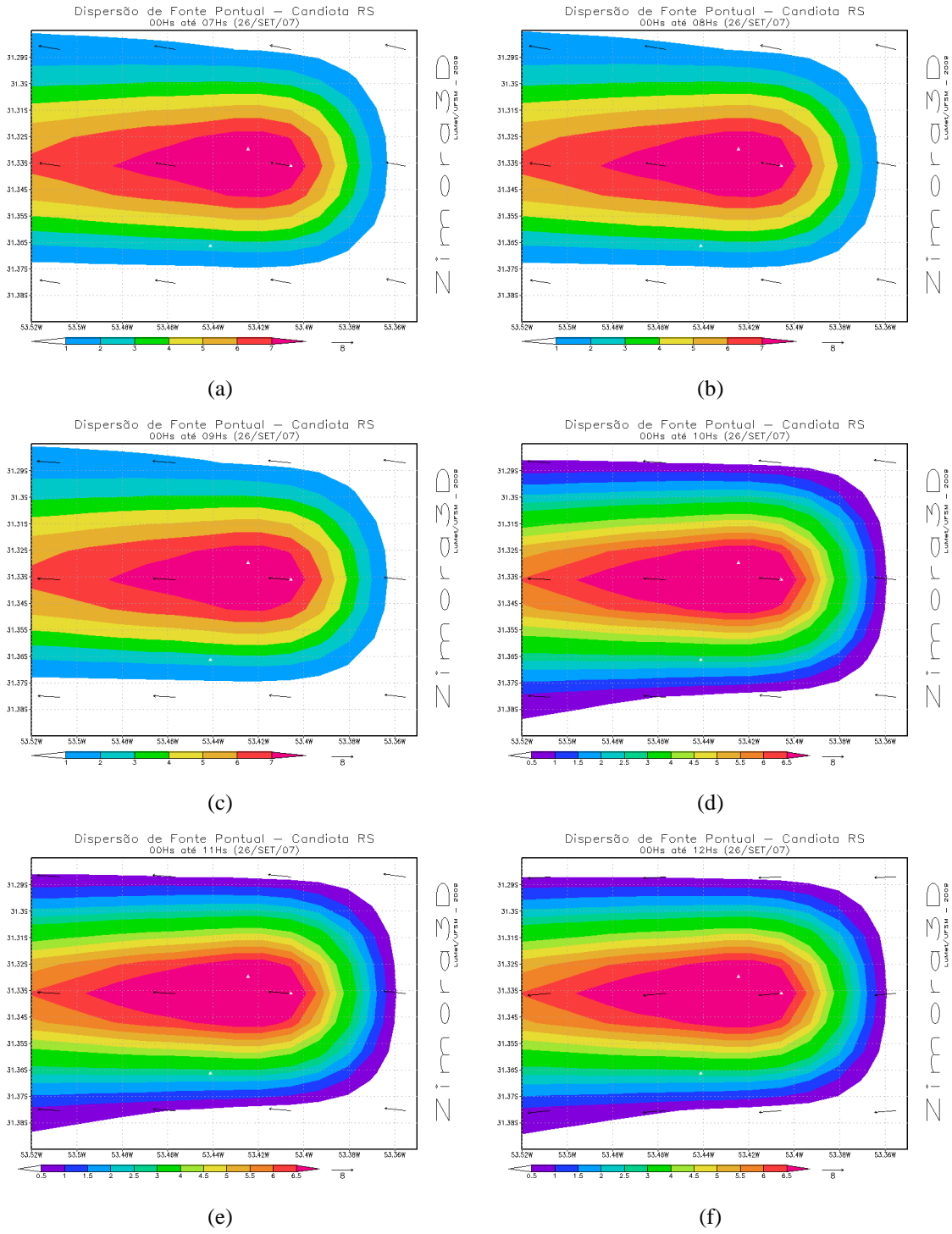


Figura B.10: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

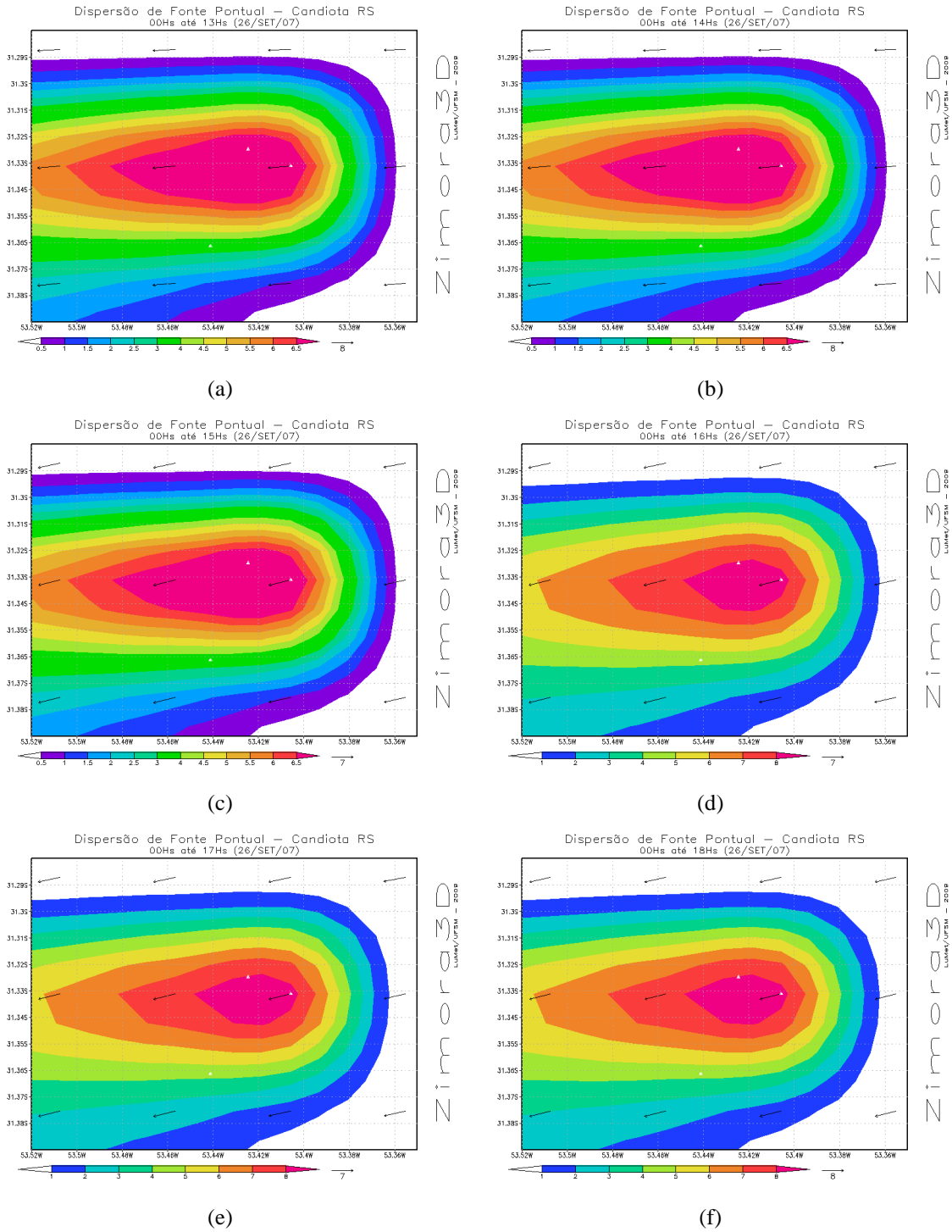


Figura B.11: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações

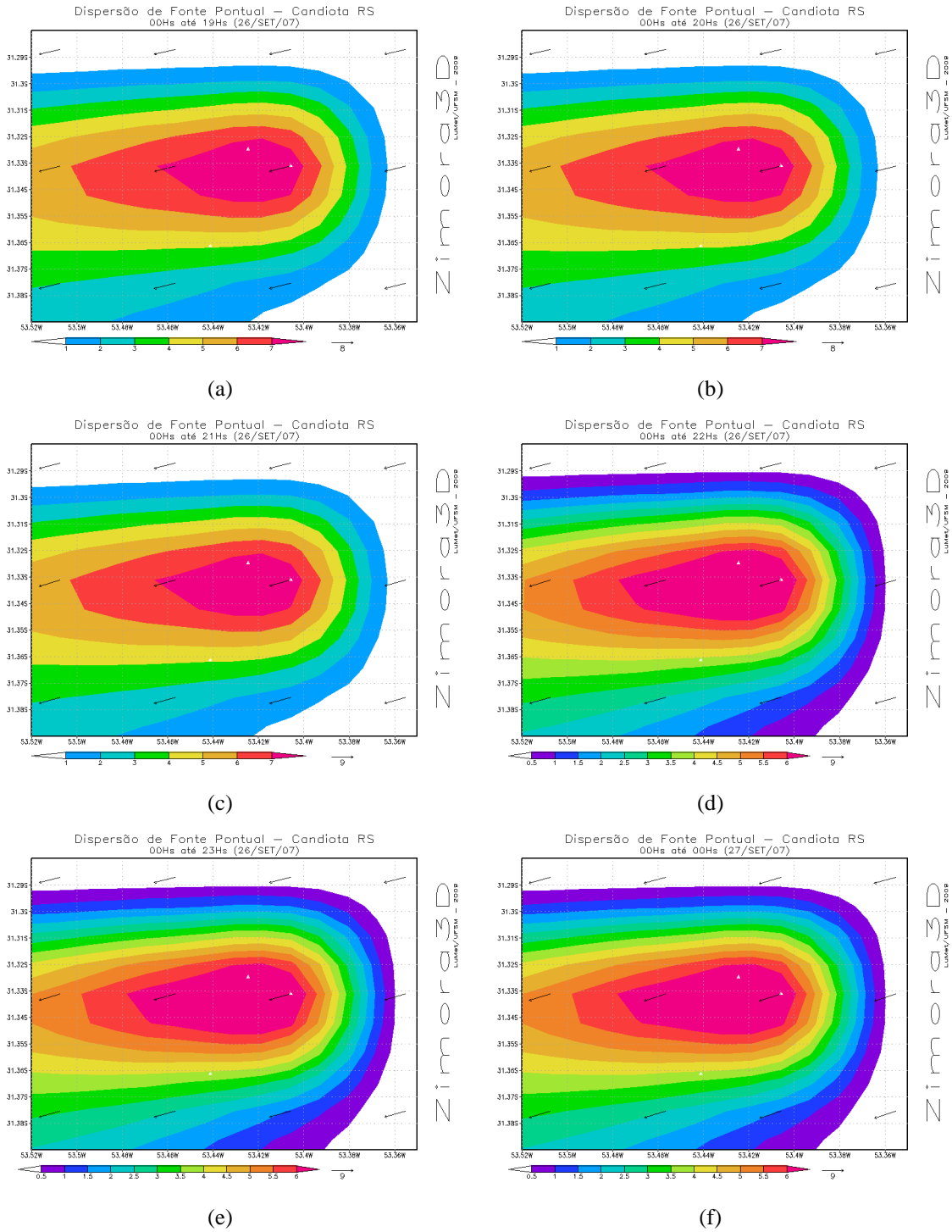


Figura B.12: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 26/09/2007 - Período 24h (18h-24h) - Ampliação sobre as estações

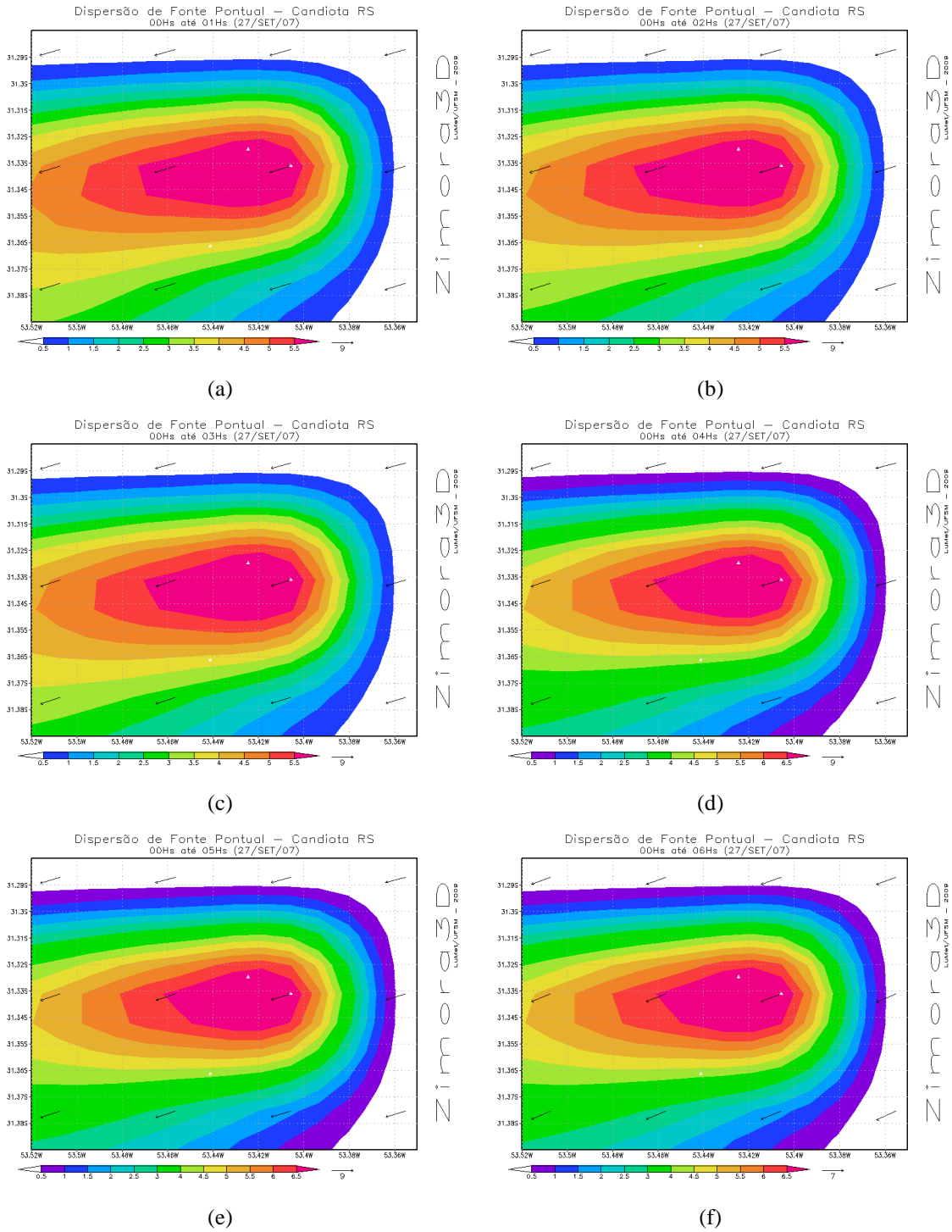


Figura B.13: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações

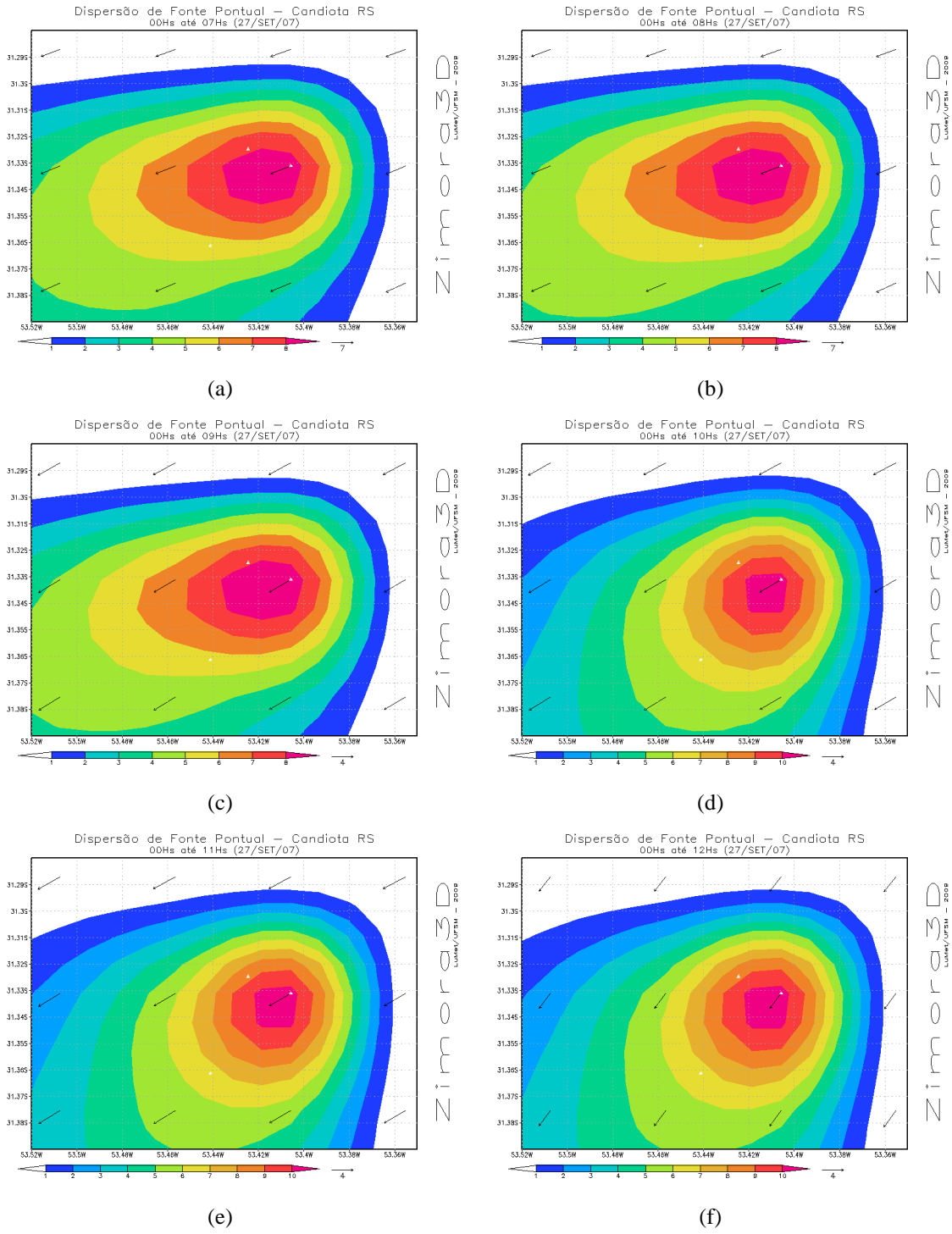


Figura B.14: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

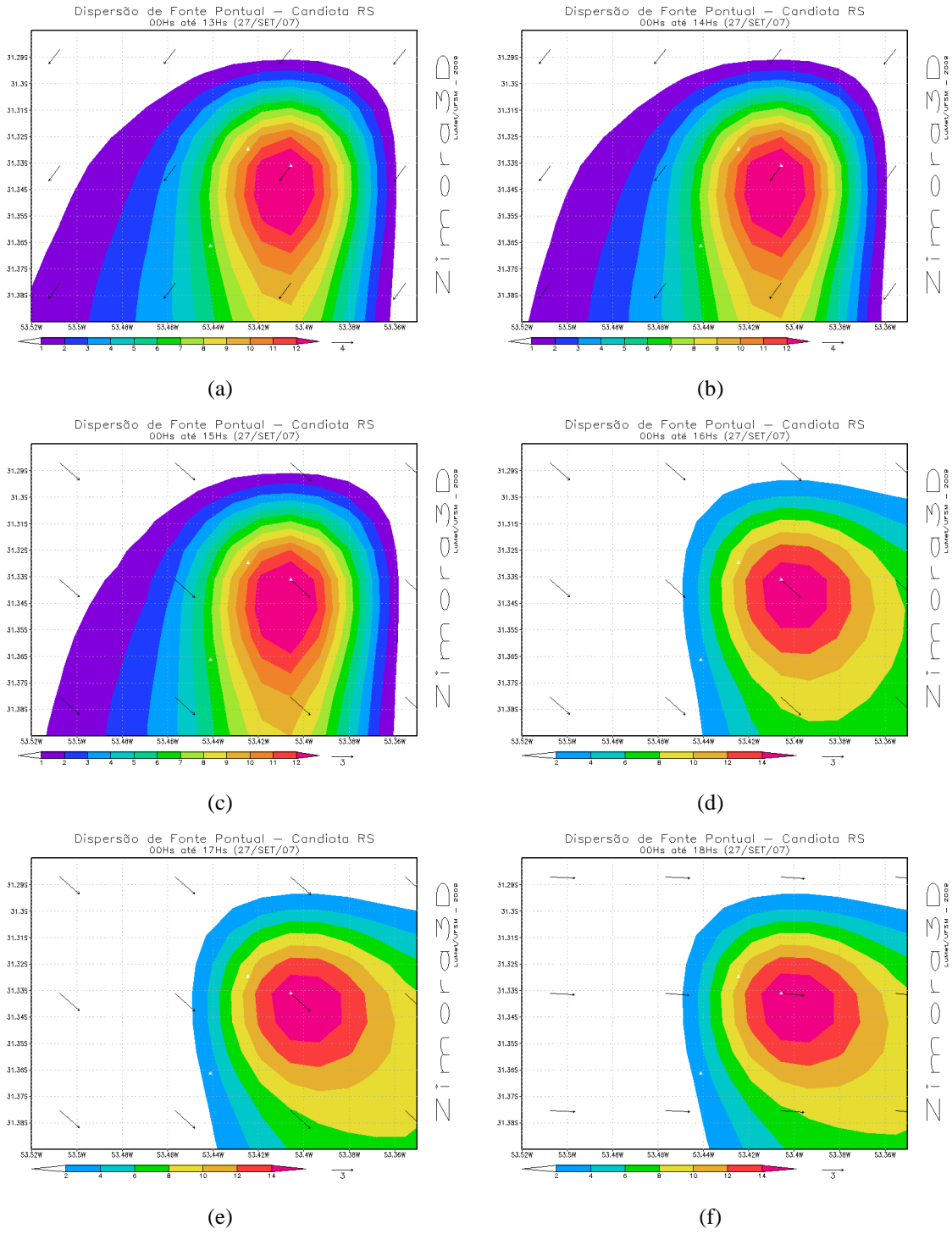


Figura B.15: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações

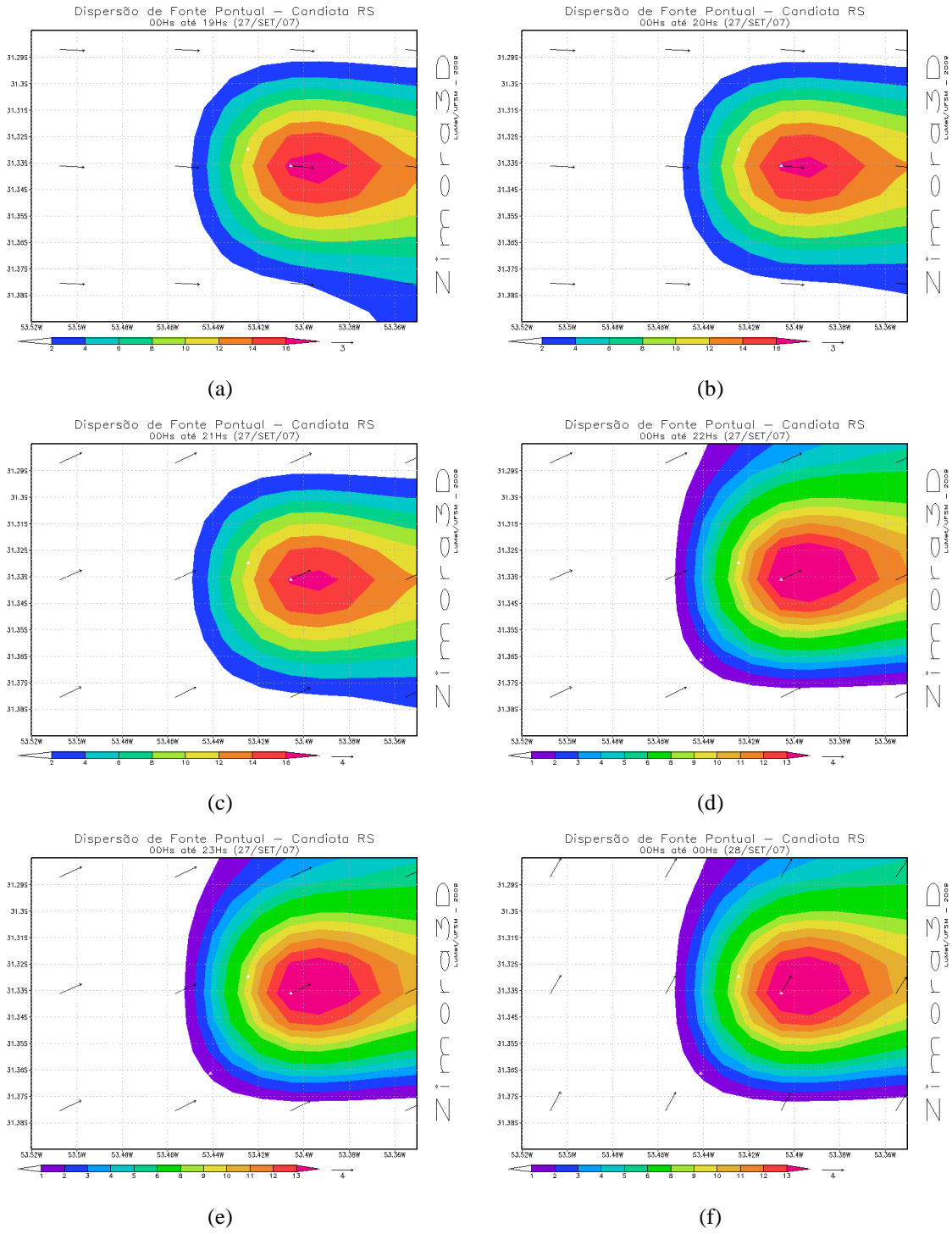


Figura B.16: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 27/09/2007 - Período 24h (18h-24h) - Ampliação sobre as estações



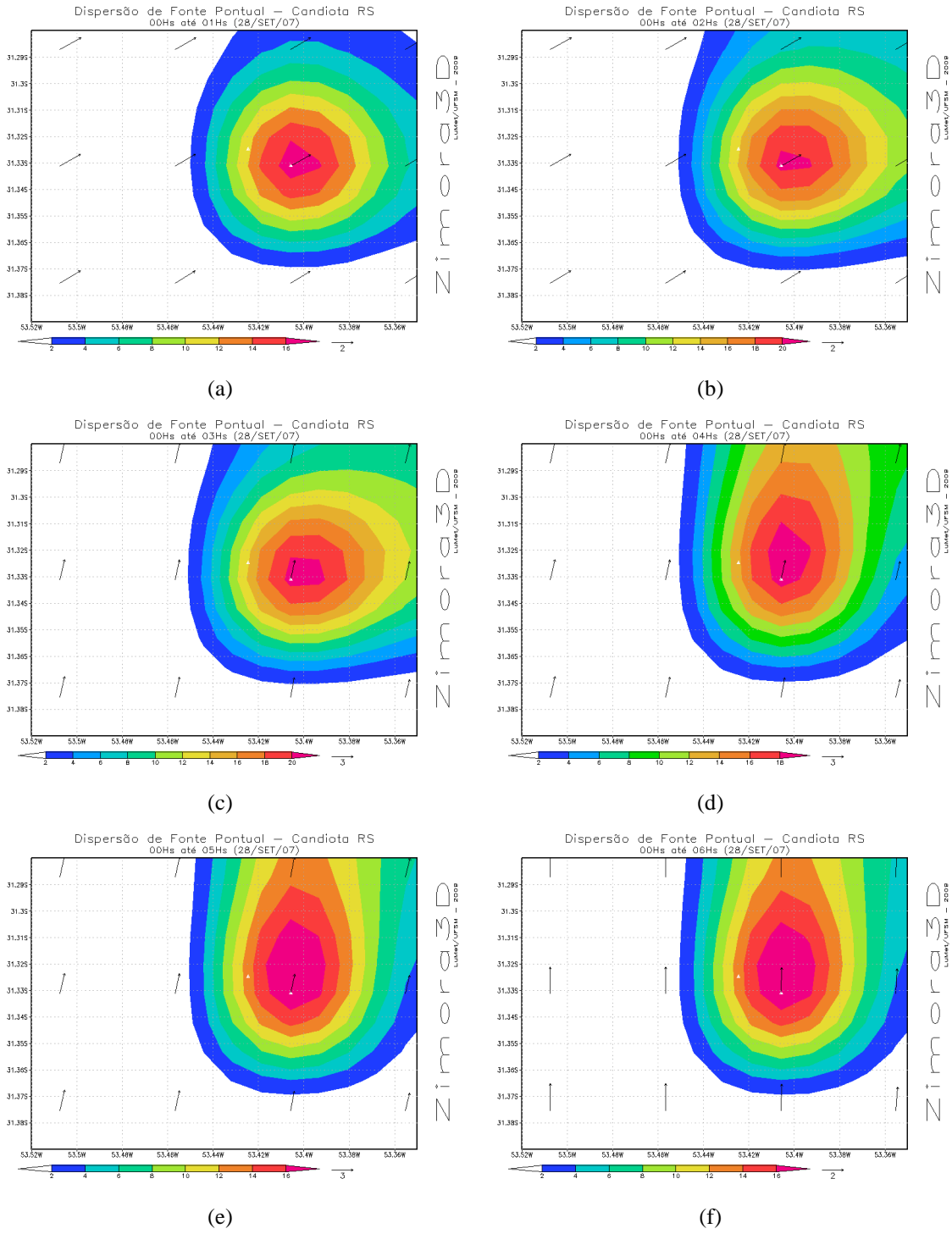


Figura B.17: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações

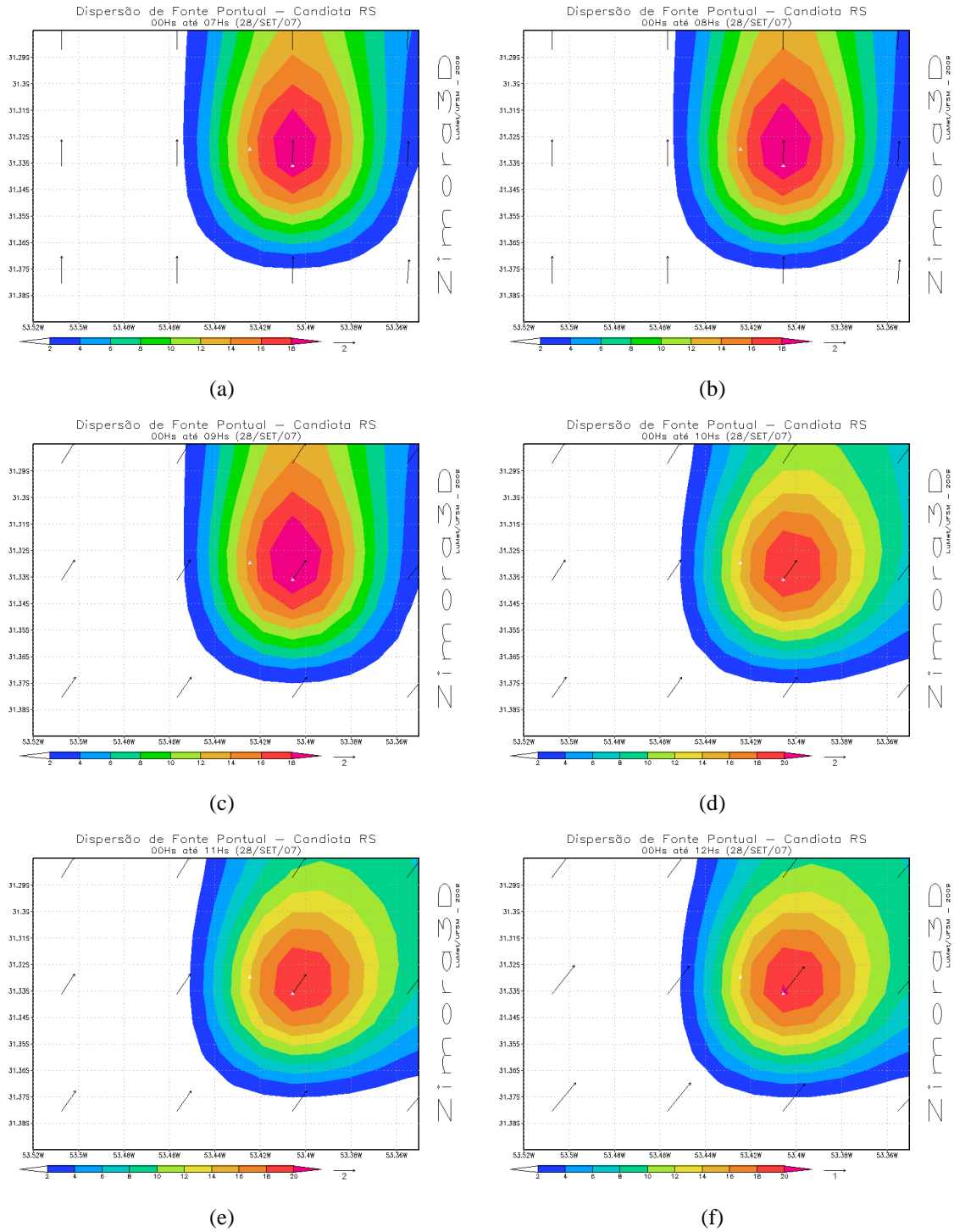


Figura B.18: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

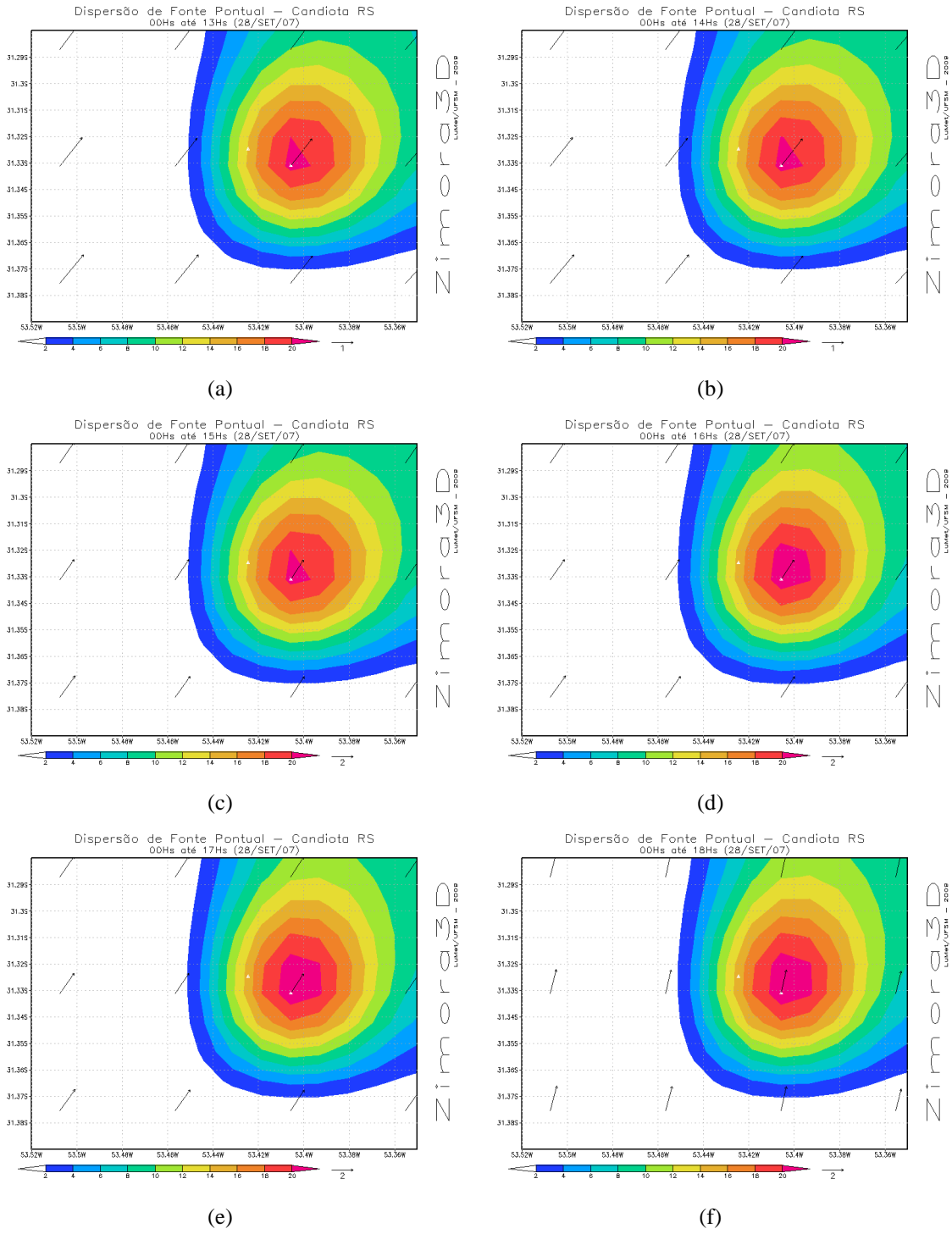


Figura B.19: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações

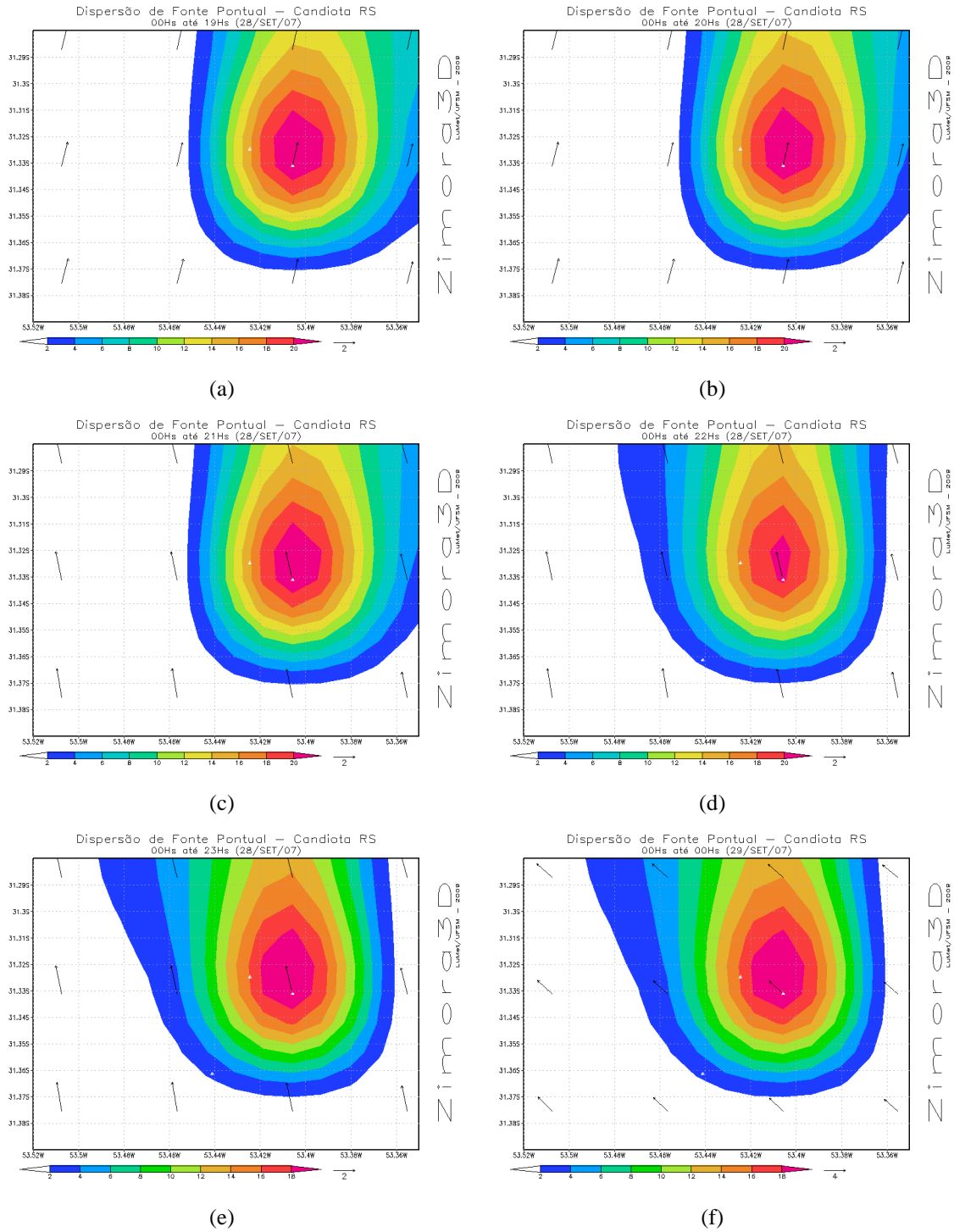


Figura B.20: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 28/09/2007 - Período 24h (18h-24h) - Ampliação sobre as estações

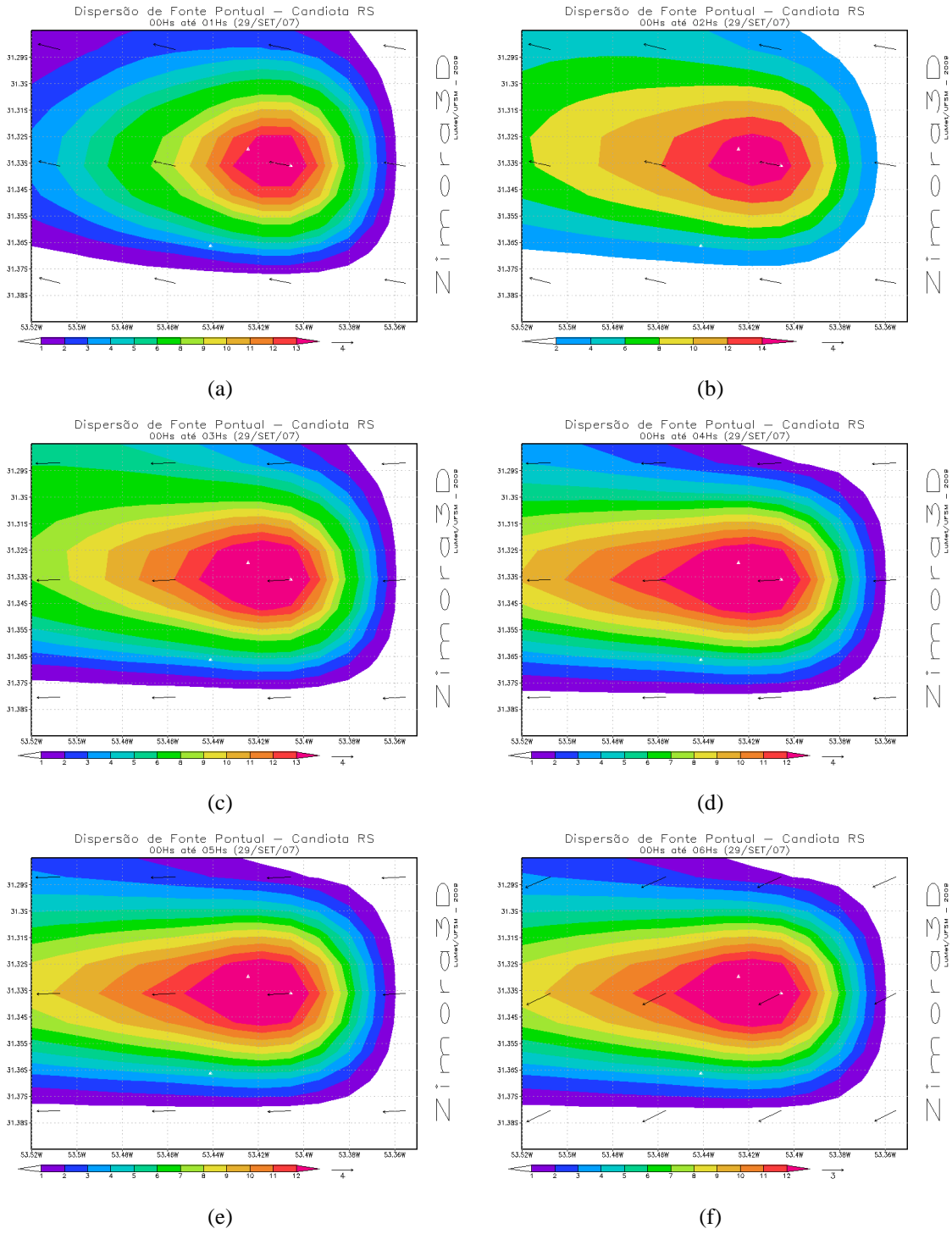


Figura B.21: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações

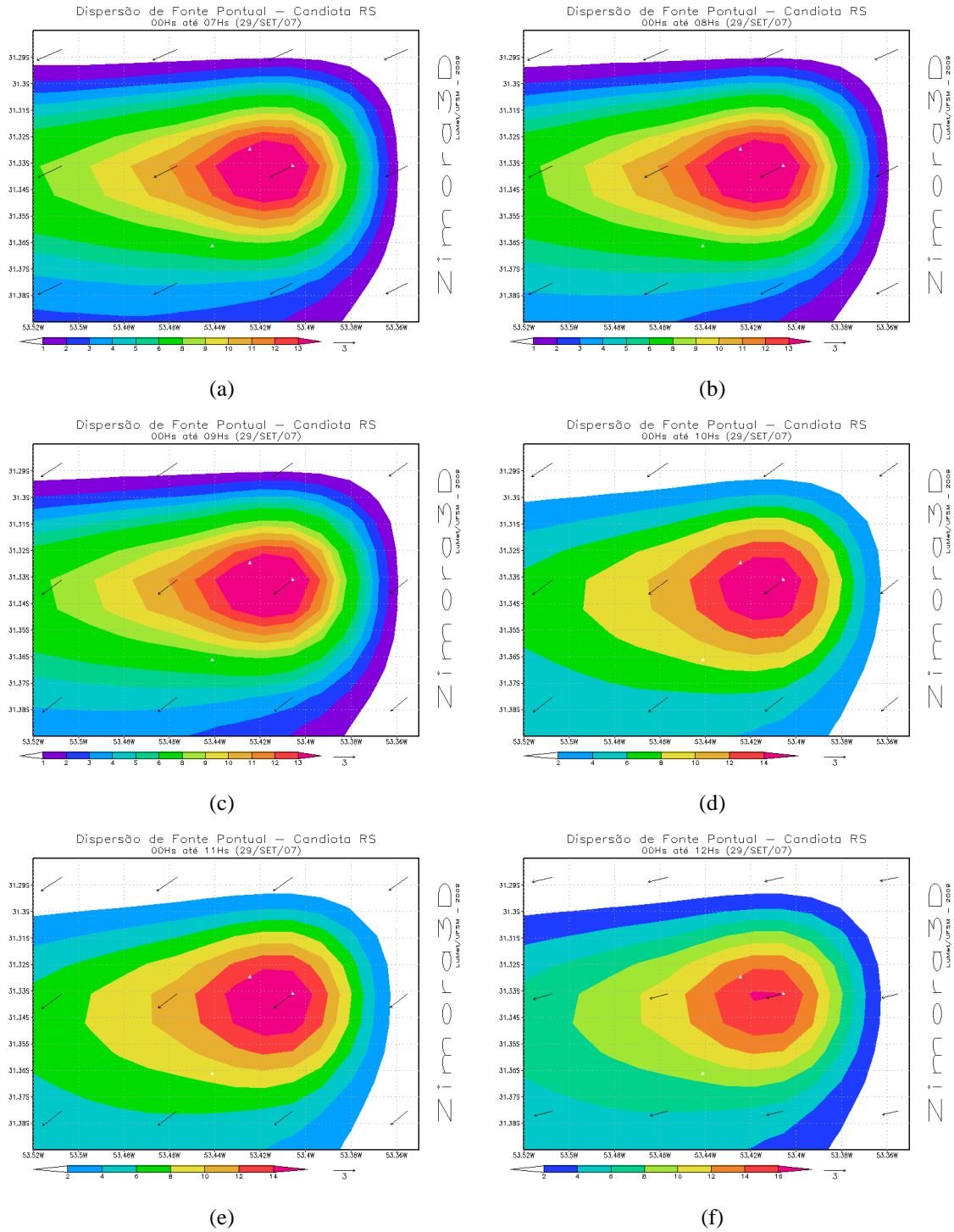


Figura B.22: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

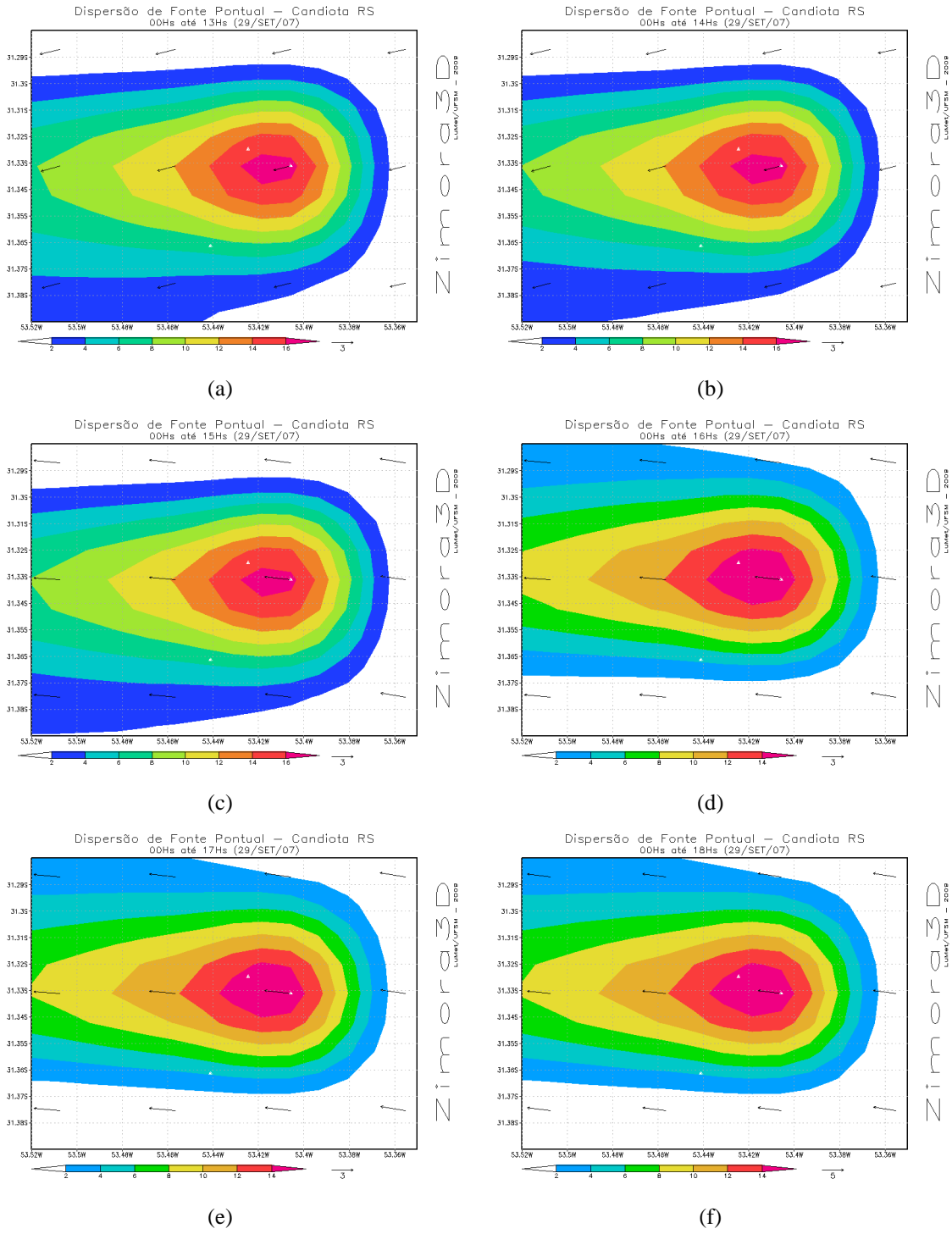


Figura B.23: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações

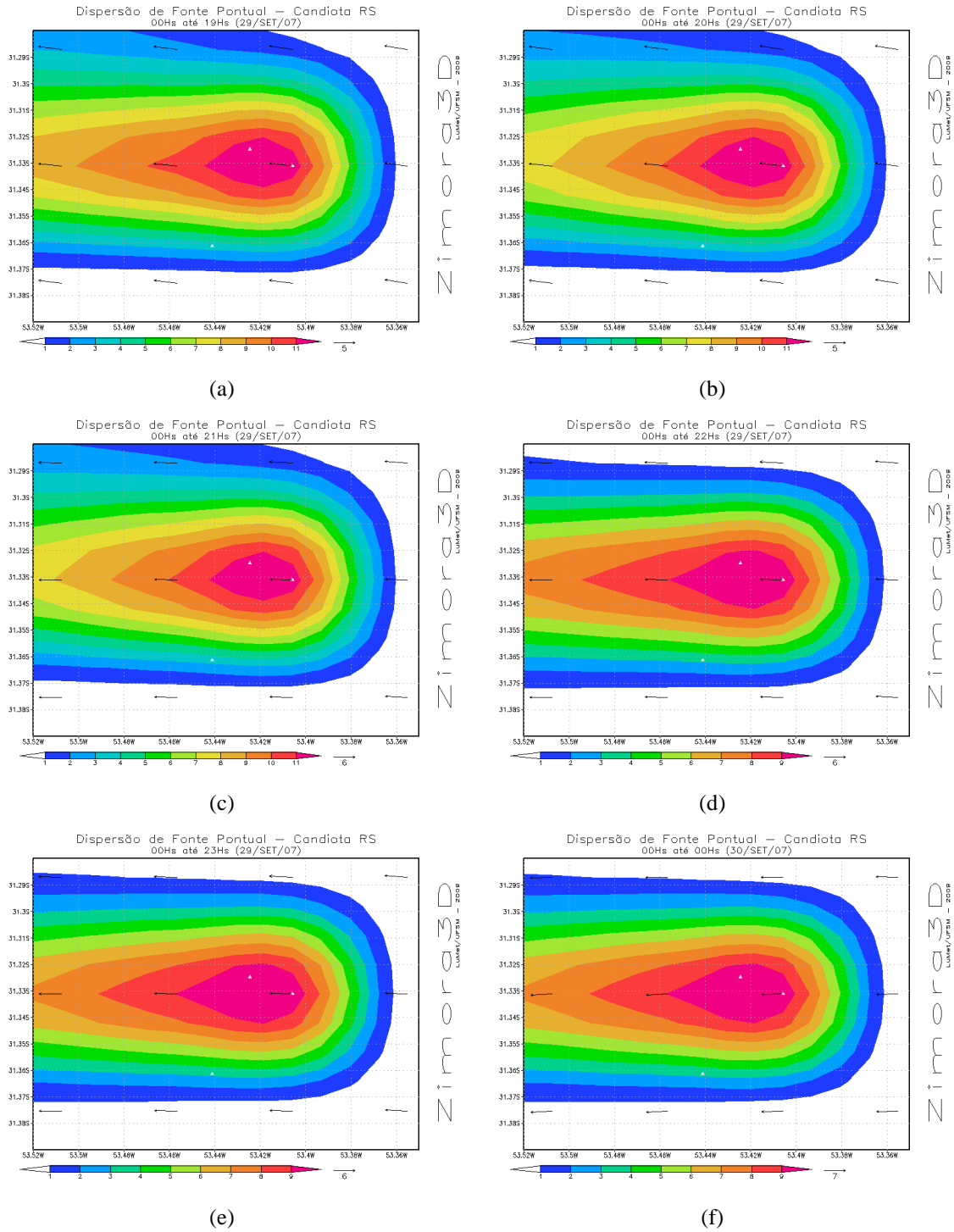


Figura B.24: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 29/09/2007 - Período 24h (18h-24h) - Ampliação sobre as estações



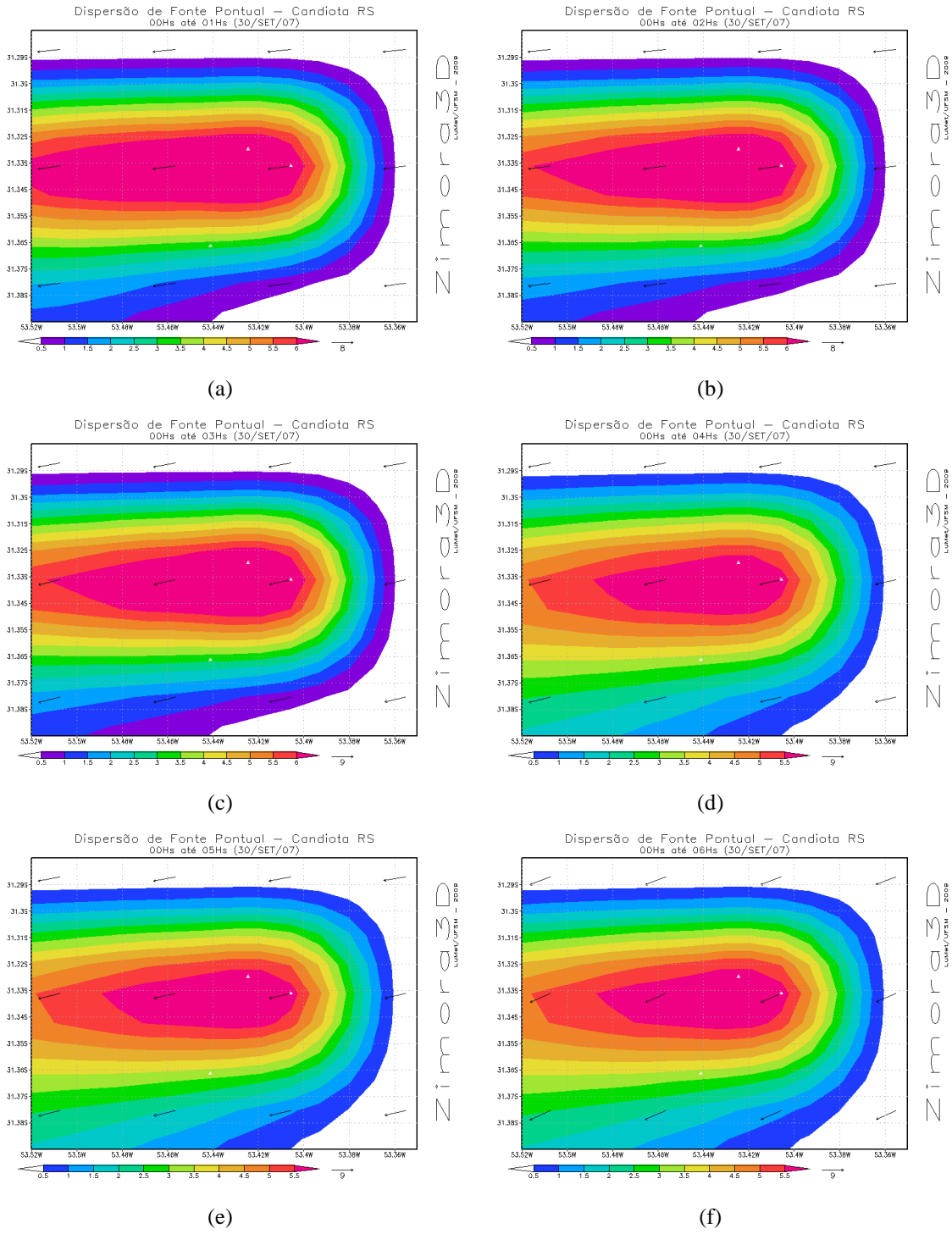


Figura B.25: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 30/09/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações

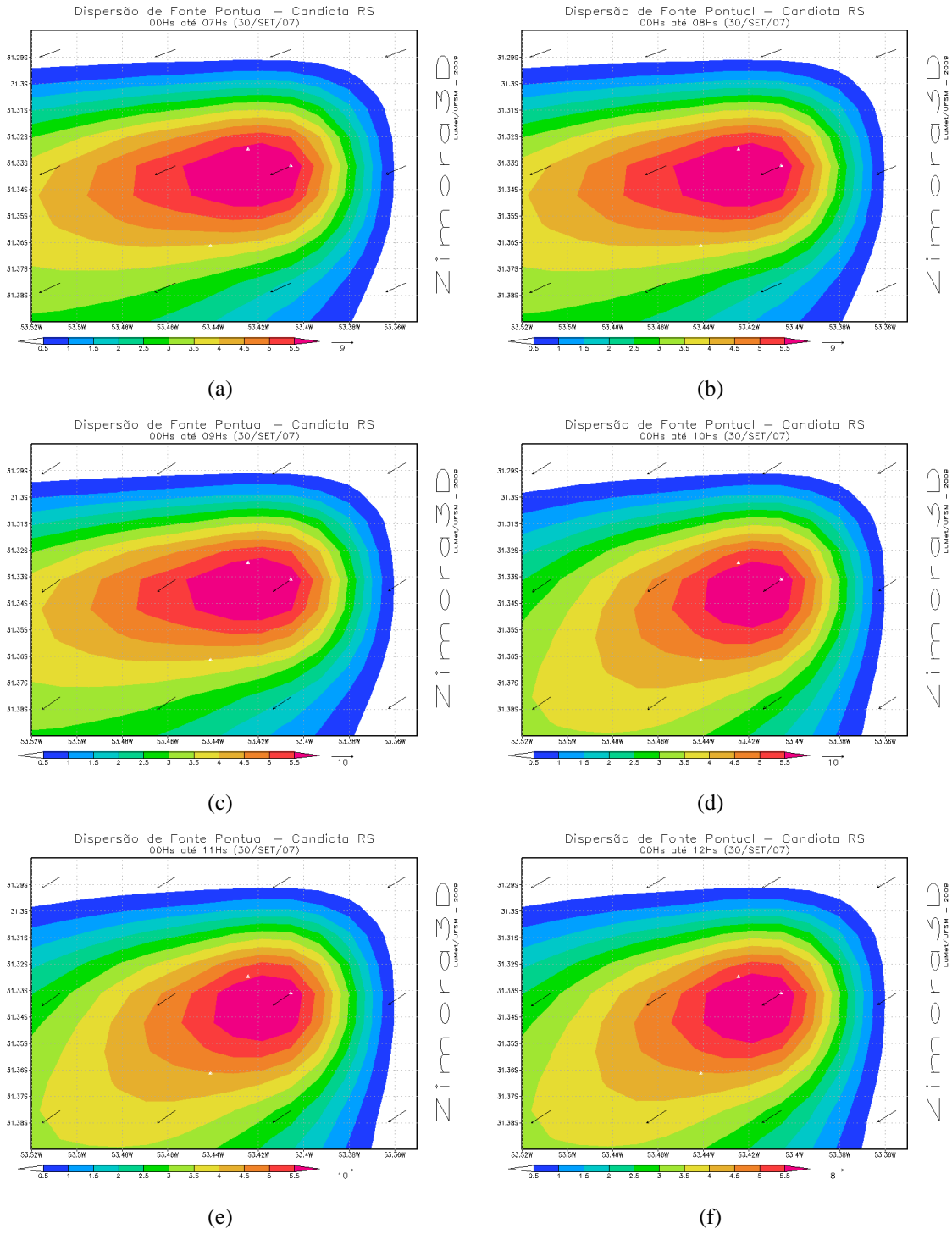


Figura B.26: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 30/09/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

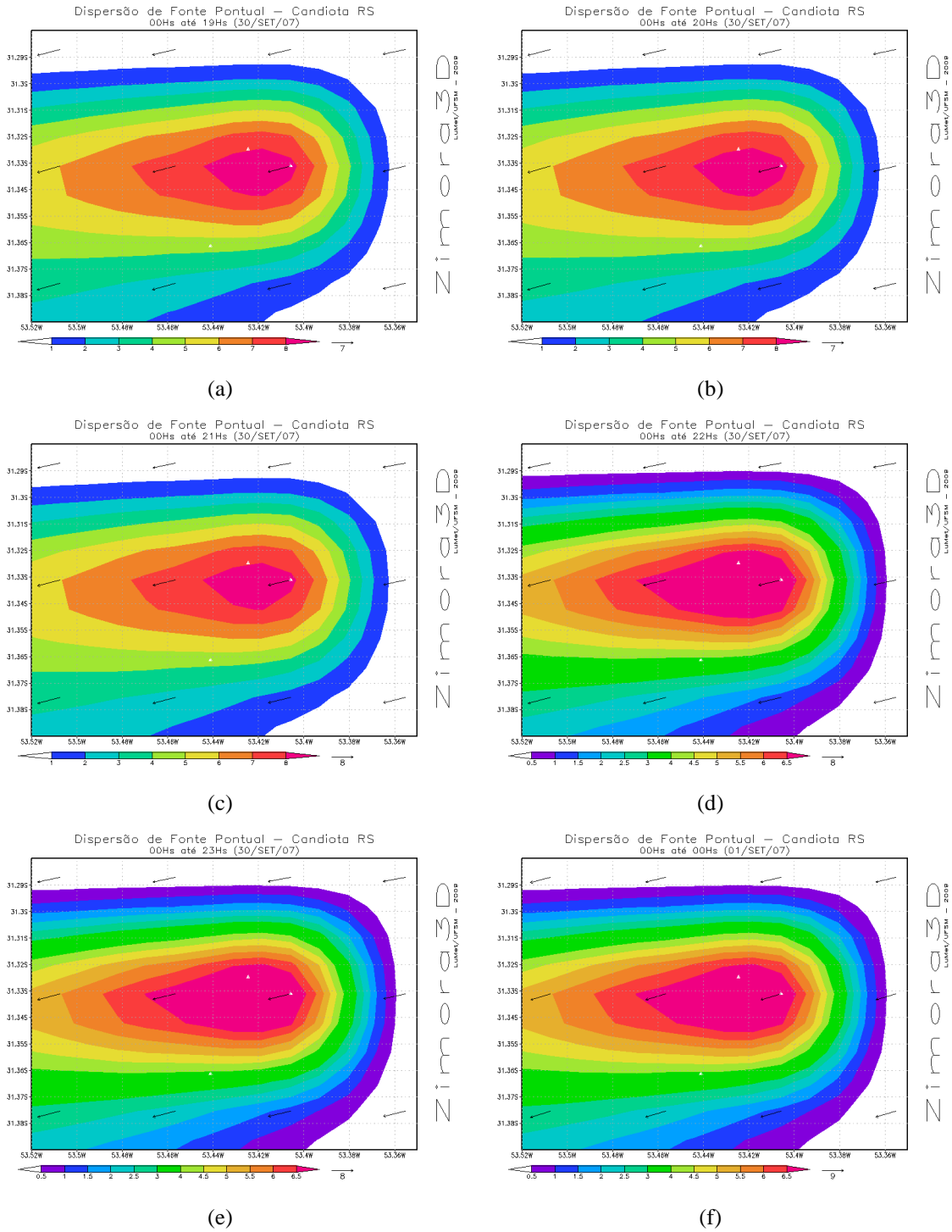


Figura B.27: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 30/09/2007 - Período 24h (18h-24h) - Ampliação sobre as estações

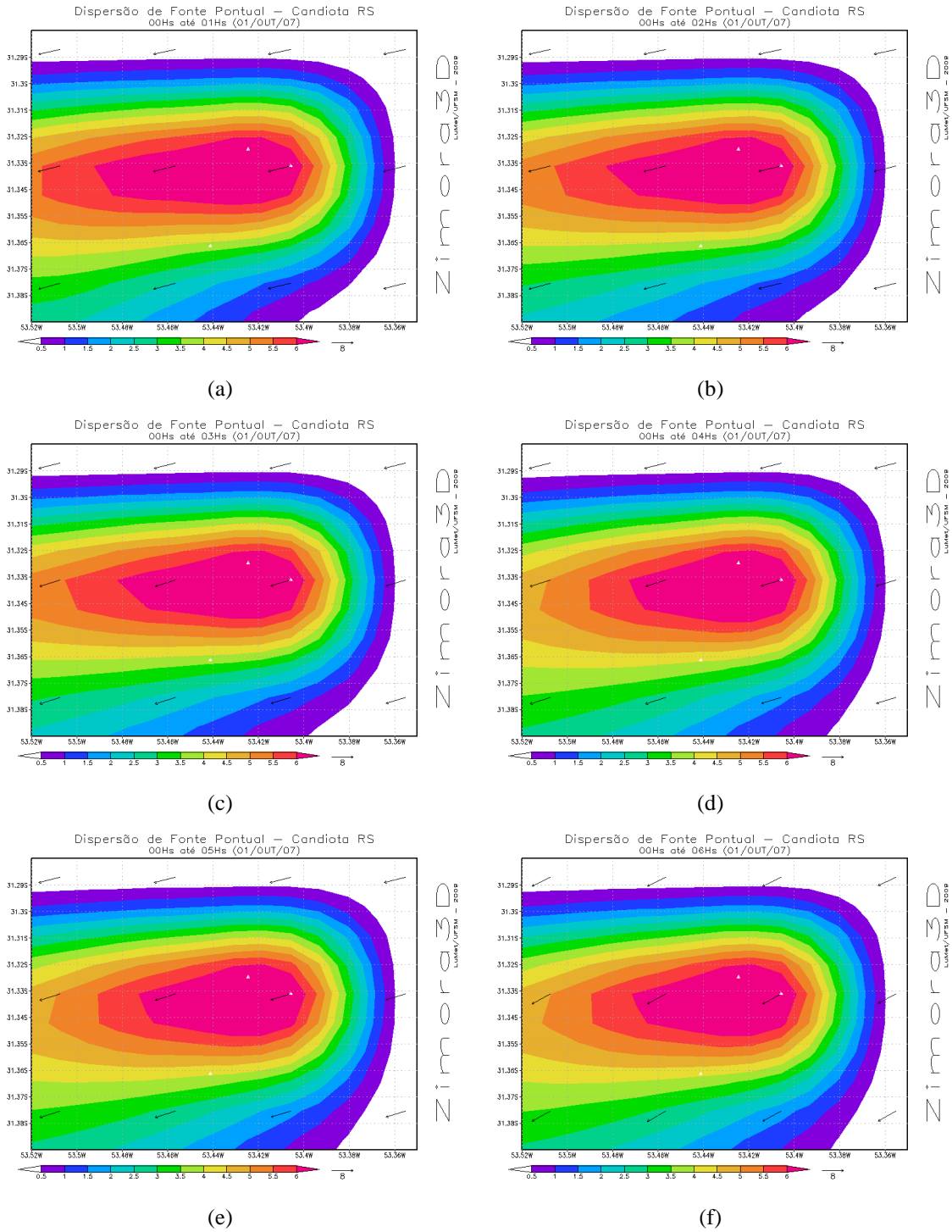


Figura B.28: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 06h (00h-06h) - Ampliação sobre as estações

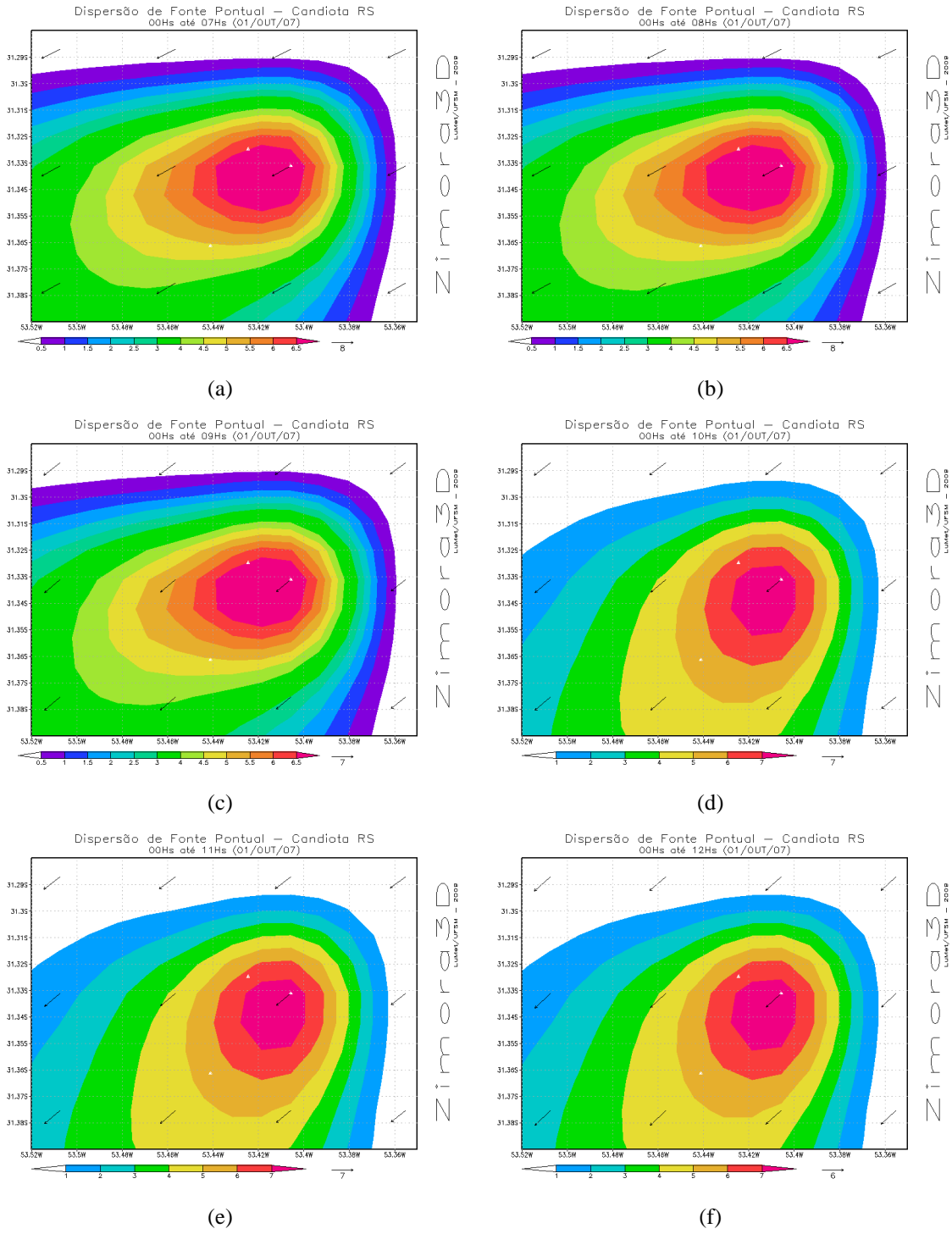


Figura B.29: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 12h (06h-12h) - Ampliação sobre as estações

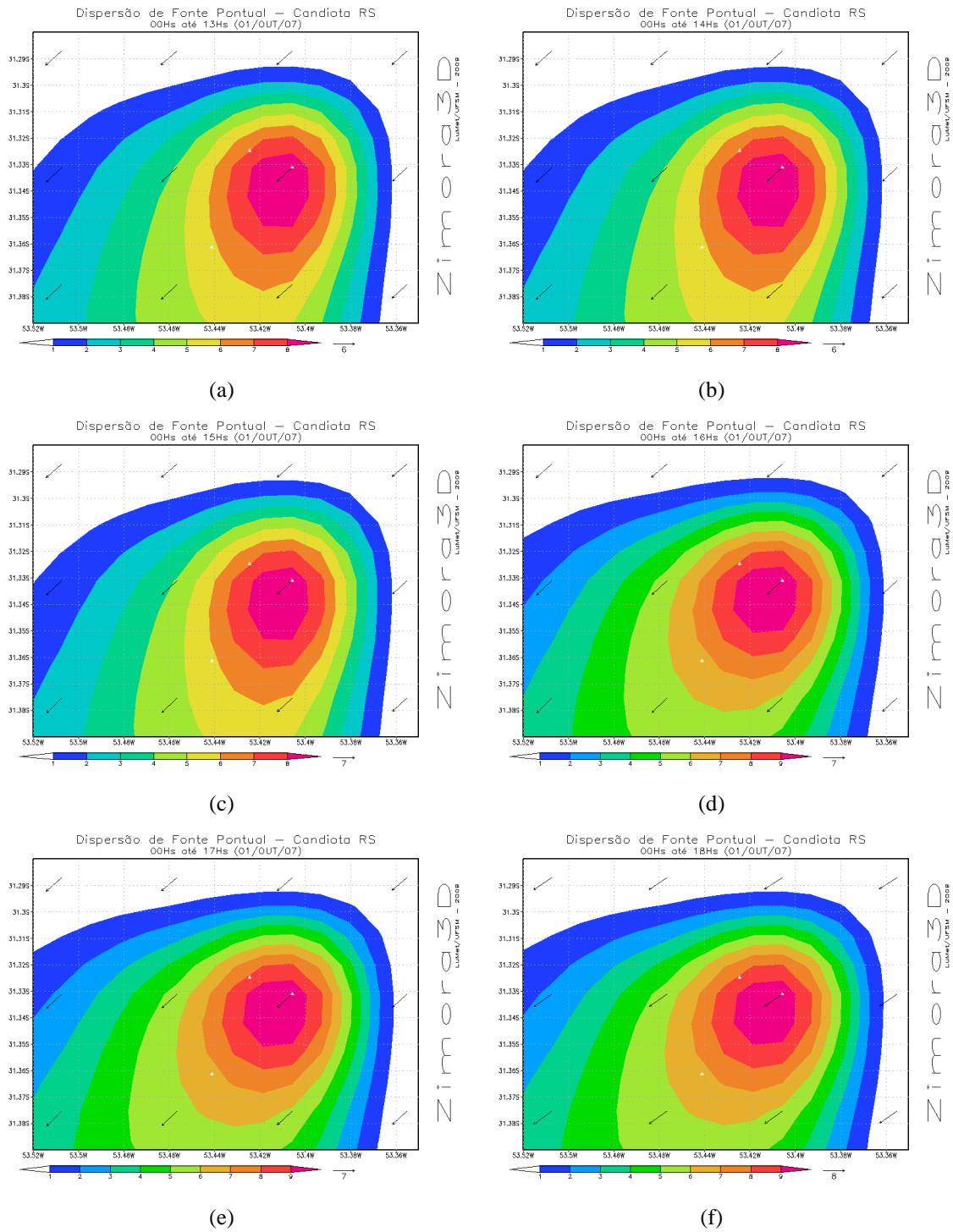


Figura B.30: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 18h (12h-18h) - Ampliação sobre as estações

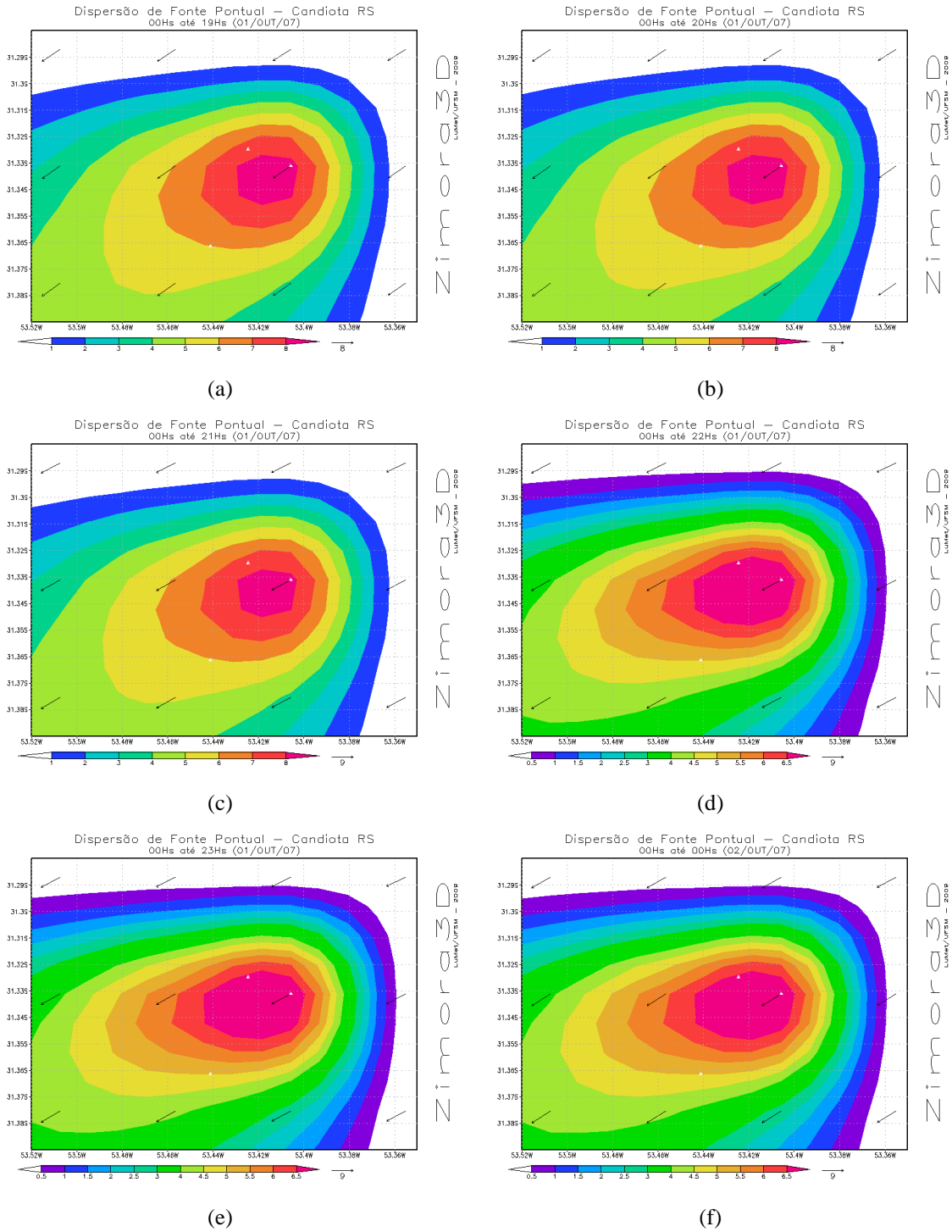


Figura B.31: Simulação da evolução horária de concentração  $SO_2$  no dia 01/10/2007 - Período 24h (18h-24h) - Ampliação sobre as estações

## ***APÊNDICE C – BRAMS***

O BRAMS (*Brazilian Regional Atmospheric Modeling System*) é um modelo meteorológico que foi desenvolvido por pesquisadores brasileiros, através de um projeto conjunto da ATMET, IME/USP, IAG/USP e o CPTEC/INPE, financiado pela FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos), com o objetivo de desenvolver uma nova versão do RAMS (Regional Atmospheric Modeling System) adaptado aos trópicos, tendo em vista um modelo único para a previsão de Tempo regional.

O modelo RAMS surgiu da união de três modelos existentes na Universidade do Colorado: o modelo de nuvens/mesoescala (Tripoli e Cotton, 1982 [59], Walko e Tremback 2001 [61]); uma versão hidrostática do modelo de nuvens (Tremback, 1990 [56]) e o modelo de brisa marítima descrito por Mahrer e Pielke (1977) [36]. As principais características deste modelo foram descritas em detalhes por diversos autores a saber: Tripoli e Cotton (1980) [58], Tremback (1990) [56] e Pielke et al. (1992) [48], entre outros.

Os modelos BRAMS e RAMS são bem semelhantes, diferindo em alguns módulos, desenvolvidos para uma melhor representação do estado da atmosfera do Brasil.

O RAMS é um modelo de mesoescala altamente flexível e versátil, sendo possível ativar e desativar as diversas opções e parametrizações contidas em seu código, conforme o interesse do trabalho a ser desenvolvido [1].

O BRAMS/RAMS é um modelo de previsão numérica de Tempo, desenvolvido para simular circulações atmosféricas, utilizado mais frequentemente na simulação de fenômenos de mesoescala (que compreende escalas horizontais de 2 a 2000km). É um modelo de grande versatilidade, podendo ser utilizado também em outras escalas (desde a microescala até simulações de grandes turbilhões e fenômenos climáticos), desde que se faça os ajustes pertinentes ao estudo de interesse, possibilitando diferentes tipos de estudos, tendo com finalidade fornecer informações de previsão do Tempo, bem como suporte à pesquisa científica.

As equações usadas no BRAMS são aquelas para uma atmosfera não hidrostática, descritas por Tripoli e Cotton (1982) [59], que permite descrever processos físicos nos quais a



velocidade vertical é intensa. Os processos de superfície são representados numericamente de forma bem detalhada e simula aqueles associados à difusão turbulenta, radiação solar, a formação e interação de nuvens, precipitação de hidrometeoros na fase líquida e gelo, convecção de cumulus, troca de calor sensível e latente entre a superfície e atmosfera (incluindo o papel da vegetação) e transporte de calor no solo [1].

O modelo possui equações prognósticas para todas as variáveis de estado, incluindo  $u$ ,  $v$ ,  $w$ , temperatura potencial  $\theta_{il}$ , razão de mistura  $r_n$  e função de Exner  $\pi'$ . Seguindo [47], o modelo utiliza a formulação de diferenças finitas de segunda ordem no espaço e no tempo, resolvidas em forma explícita devido aos requerimentos computacionais, sendo que os termos de advecção são colocados na forma de fluxo de maneira tal que a massa, momento e energia sejam conservados.

O modelo BRAMS resolve numericamente as equações governantes da evolução da atmosfera, utilizando o procedimento de Reynolds, que consiste em decompor uma certa variável atmosférica  $\alpha(x, t)$  em uma parte média  $\bar{\alpha}(x, t)$  e uma parte turbulenta  $\alpha'(x, t)$ , sendo essa decomposição de escalas de Reynolds definida por

$$\alpha(x, t) = \bar{\alpha}(x, t) + \alpha'(x, t) \quad (\text{C.1})$$

Desta forma a evolução da atmosfera é representada por um novo conjunto de equações, que são expressas em termos médios e turbulentos, das variáveis atmosféricas  $u$ ,  $v$ ,  $w$ ,  $\pi'$ ,  $\theta_{il}$ ,  $r_n$ , que são especificados a seguir.

As equações prognósticas do modelo RAMS são descritas abaixo, primeiro para uma atmosfera não hidrostática, e em seguida para uma atmosfera hidrostática, onde o significado das variáveis estão representados na Tabela C.1. As médias de Reynolds são aplicadas sobre o volume em torno do ponto de grade, sendo omitida a notação de média (barra) apenas por simplicidade.

As equações não hidrostáticas são:

Equações de movimento:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} - w \frac{\partial u}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial x} + fv + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_m \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_m \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_m \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (\text{C.2})$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - w \frac{\partial v}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial y} - fu + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_m \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_m \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_m \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (\text{C.3})$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -u \frac{\partial w}{\partial x} - v \frac{\partial w}{\partial y} - w \frac{\partial w}{\partial z} - \theta \frac{\partial \pi'}{\partial z} - \frac{g\theta'_v}{\theta_0} + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_m \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_m \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_m \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (\text{C.4})$$

Estas três equações podem ser escritas na forma tensorial como:

$$\underbrace{\frac{\partial u_i}{\partial t}}_I = \underbrace{u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_II - \underbrace{\delta_{i3} g}_{III} - \underbrace{\varepsilon_{ijk} f_j u_k}_{IV} - \underbrace{\theta \frac{\partial \pi}{\partial x_i}}_V - \frac{1}{\rho_0} \underbrace{\frac{\partial \rho_0 \overline{u'_j u'_i}}{\partial x_j}}_{VI} \quad (\text{C.5})$$

onde:

*I* representa o termo de armazenamento

*II* descreve a advecção.

*III* descreve a ação vertical da gravidade.

*IV* descreve a influência da rotação da Terra (efeito de Coriolis).

*V* descreve as forças do gradiente de pressão.

*VI* representa a divergência do fluxo turbulento

Equação termodinâmica:

$$\frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} = -u \frac{\partial \theta_{il}}{\partial x} - v \frac{\partial \theta_{il}}{\partial y} - w \frac{\partial \theta_{il}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_h \frac{\partial \theta_{il}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_h \frac{\partial \theta_{il}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_h \frac{\partial \theta_{il}}{\partial z} \right) + \left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{rad} \quad (\text{C.6})$$

onde  $\theta_{il}$  é temperatura potencial da água sólida e gelo, dado por :

$$\theta_{il} = \theta + L \frac{q_l}{c_p} + L' \frac{q^i}{c_p} \quad (\text{C.7})$$

Na forma tensorial, a equação da termodinâmica, em termos da temperatura potencial de água líquida e gelo, fica

$$\underbrace{\frac{\partial \theta_{il}}{\partial t}}_I = \underbrace{u_j \frac{\partial \theta_{il}}{\partial x_j}}_{II} - \frac{1}{\rho_0} \underbrace{\frac{\partial \rho_0 \overline{u'_j \theta'_{il}}}{\partial x_j}}_{VI} + \underbrace{\left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{con} + \left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{rad} + \left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{microf}}_{VII} \quad (C.8)$$

Os termos I,II e VI são semelhantes aos apresentados na equação anterior e os termos representados por VII, cujos índices *con*, *rad* e *microf* denotam as contribuições devido ao transporte convectivo não resolvido, convergência de radiação e parametrização de microfísica respectivamente.

Equação da continuidade razão de mistura das espécies de água:

$$\frac{\partial r_n}{\partial t} = -u \frac{\partial r_n}{\partial x} - v \frac{\partial r_n}{\partial y} - w \frac{\partial r_n}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( K_h \frac{\partial r_n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_h \frac{\partial r_n}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_h \frac{\partial r_n}{\partial z} \right) \quad (C.9)$$

Na forma tensorial, temos

$$\underbrace{\frac{\partial r_t}{\partial t}}_I = \underbrace{u_j \frac{\partial r_t}{\partial x_j}}_{II} - \frac{1}{\rho_0} \underbrace{\frac{\partial \rho_0 \overline{u'_j r'_t}}{\partial x_j}}_{VI} + \underbrace{\left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{con} + \left( \frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} \right)_{microf}}_{VIII} \quad (C.10)$$

O significado dos termos I, II, VI e VIII é semelhante ao apresentado nas equações anteriores.

Equação da continuidade de massa:

$$\frac{\partial \pi'}{\partial t} = -\frac{R\pi_0}{c_v \rho_0 \theta_0} \left( \frac{\partial \rho_0 \theta_0 u}{\partial x} + \frac{\partial \rho_0 \theta_0 v}{\partial y} + \frac{\partial \rho_0 \theta_0 w}{\partial z} \right) \quad (C.11)$$

Na opção hidrostática do RAMS substitui-se a equação de movimento vertical e a equação de continuidade de massa com:

Equação hidrostática:

$$\frac{\partial \pi}{\partial z} = -\frac{g}{\theta_v} + g(r_t - r_v) \quad (C.12)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0 \quad (C.13)$$

A função de exner é dada por:  $\pi = c_p \left( \frac{p}{p_0} \right)^{\frac{R}{c_p}}$

Tabela C.1: Significado dos símbolos usados nas equações gerais do modelo BRAMS

Simbolo	Definição
$u$	componente zonal (Leste-Oeste) do vento
$v$	componente meridional (Norte-Sul) do vento
$w$	componente vertical do vento
$f$	parâmetro de Coriolis
$K_m$	coeficiente de viscosidade turbulenta para o momentum
$K_h$	coeficiente de viscosidade turbulenta para o calor e umidade
$\theta_{il}$	temperatura potencial para a água líquida e gelo
$r_n$	razão de mistura para as espécies de água
$\rho$	densidade
$\rho_0$	densidade no estado básico
rad	denota tendência para a parametrização de radiação
$g$	gravidade
$r_t$	razão de mistura para água total
$r_v$	razão de mistura para vapor d'água
$c_v$	calor específico a volume constante
$c_p$	calor específico a pressão constante
$\pi$	função de Exner total
$\pi'$	perturbação da função de Exner
$\pi_0$	função de Exner no estado básico
$\theta$	temperatura potencial do ar
$\theta_0$	temperatura potencial do estado básico (ambiente)
$\theta_v$	temperatura potencial virtual

### C.0.1 Parametrizações

Alguns fenômenos físicos não são resolvidos pelo modelo, sendo necessário parametrizá-los. Os principais fenômenos parametrizados contidos no código do modelo, que podem ser ativadas e desativadas conforme objetivo da análise, são os seguintes:

- Parametrização de radiação (solar e terrestre)
- Parametrização de Convecção
- Parametrização de Microfísica de nuvens
- Parametrização de turbulência
- Parametrização solo/vegetação

## **Parametrização da radiação**

Os efeitos produzidos na atmosfera e no solo devido a radiação solar e terrestre (onda curta e onda longa respectivamente), assim como a interação dessas radiações com os diferentes constituintes da atmosfera (oxigênio, ozônio, dióxido de carbono, vapor d'água, água líquida das nuvens, etc), seguem duas opções de esquemas de radiação, a proposta por Mahrer e Pielke (1977) [36] e a descrita por Chen e Cotton (1983) [8].

O RAMS possui duas opções de parametrizações de radiação para ondas longas e duas opções para ondas curtas. Os esquemas de Mahrer e Pielke (1977) [36], para onda longa e onda curta, é mais simples e eficiente, porém não leva em conta os efeitos das nuvens, assim, tem um menor tempo computacional. Os esquemas de Chen e Cotton (1983) [8], engloba a quantidade de material condensado presente para a simulação atmosférica, portanto possui um custo computacional mais alto.

O esquema de radiação de onda curta descrito por [36], é um esquema simples que avalia o espalhamento pelo oxigênio, ozônio e dióxido de carbono de uma maneira empírica e considera a absorção pelo vapor da água, mas não considera nuvens ou material condensado de nenhuma maneira.

O esquema de onda longa de [36], é um esquema simples que considera a emissão infravermelha e a absorção do vapor de água e do dióxido de carbono, sem considerar nuvens ou material condensado de nenhuma maneira.

O modelo de radiação de onda longa descrito por [8], é uma solução satisfatória para a equação de transferência radiativa usando uma aproximação de emissividade. O efeito de condensação é considerado neste esquema.

O esquema de onda longa descrito por [8], é um esquema de três bandas, que parametriza os efeitos das nuvens.

## **Parametrização de convecção**

Os esquemas de convecção tratam de simular nos modelos, os efeitos que têm na atmosfera a condensação do vapor de água e os intercâmbios produzidos pelas fortes correntes verticais convectivas [47].

O problema mais complexo em mesoescala, sinótica e modelagem global, é a parametrização de convecção. Infelizmente, os termos de convecção são uns dos mais significantes termos de forçantes nas equações que descrevem os movimentos da atmosfera, nas grandes

escalas. Além disso, o fato de não haver muitos estudos observacionais dos efeitos da convecção sobre as grandes escala (principalmente nas latitudes médias), combina-se as dificuldades do problema.

Vários tipos de esquemas de parametrização de convecção tem sido apresentado nos últimos anos. Os dois esquemas mais utilizados atualmente em modelos de mesoescala são o esquema Tipo Kuo (1974)[25] e o Fritsch e Chappell (1980a) [13]. Ambos os esquemas são versões modificadas implementadas dentro do RAMS na Univesidade do Colorado (Tremback,1990)[56] nas décadas passadas.

A parametrização mais utilizada, é a do Tipo Kuo (1974)[25] com adaptações descritas por Molinari (1985)[39]. O esquema Tipo Kuo é baseado no equilíbrio da atmosfera, na qual a convecção atua para eliminar a instabilidade convectiva gerada nas grandes escalas.

A formulação matemática para a tendência da equação termodinâmica devido a parametrização convectiva, é dada por:

$$\left(\frac{\partial \theta_{il}}{\partial t}\right)_{con} = L(1-b)I\pi^{-1} \left(\frac{Q_1}{\int_{z_b}^{z_t} Q_1 dz}\right) \quad (C.14)$$

Para a tendência da equação da umidade, tem-se:

$$\left(\frac{\partial r_T}{\partial t}\right)_{con} = bI \left(\frac{Q_2}{\int_{z_b}^{z_t} Q_2 dz}\right) \quad (C.15)$$

onde  $L$  é o calor latente de vaporização,  $Q_1$  e  $Q_2$  são os perfis verticais de aquecimento e umedecimento convectivo, respectivamente,  $I$  é a taxa com que a escala solúvel abastece de umidade uma "nuvem",  $z_t$  é a altura do topo da nuvem, nível acima do qual a temperatura potencial da adiabática úmida, que passa pelo nível de livre convecção, é menor do que a temperatura potencial do ambiente (representada no ponto de grade). Segundo Molinari e Corsetti (1985)[40],  $I$  é parametrizada através do fluxo vertical de vapor de água no nível de condensação por levantamento - NCL. Desta quantidade uma fração  $b$  de  $I$  é usada para aumentar a umidade na coluna atmosférica e a fração restante,  $(1-b)$  de  $I$ , precipita, sendo que a fração  $(1-b)$  é denominada de eficiência de precipitação.

### Parametrização de microfísica de nuvens

A parametrização de microfísica no RAMS, descrita por Walko *et al.*(1995)[60], aplica-se a qualquer categoria de hidrometeoros, tais como: vapor, chuva, gota de nuvem, granizo, neve, cristais de pristina (*pristine ice*), agregados e "graupel". São considerados os diferentes

processos microfísicos, como: colisão, nucleação, sedimentação, coalescência e conversão de uma categoria para outra. Para uma descrição mais detalhada dos processos microfísicos utilizados pelo modelo, ver Meyers e Cotton (1992)[38].

A parametrização de microfísica descreve a evolução das categorias de hidrometeoros no tempo, os mecanismos de interação entre as mesmas e a permanente troca de vapor e calor com a fase gasosa.

Esta parametrização garante que o usuário do modelo tenha uma certa versatilidade, permitindo que o experimento numérico seja conduzido dentro de certas restrições estabelecida por ele. É possível, por exemplo, que o diâmetro médio de uma das categoria de hidrometeoros seja determinado a partir de um valor padrão encontrado no código do modelo ou sugerido pelo usuário.

Na equação termodinâmica a seguir estão representados os termos dos processos microfísicos presentes na atmosfera,

$$\frac{\partial \theta_{il}}{\partial t} = ADV(\theta_{il}) + TURB(\theta_{il}) - \left( \frac{\theta_{il}^2}{\theta} \right) \left( \frac{[L_{lv}PR_r + L_{iv}(PR_i + PR_g)]}{c_p MAX(T, 253)} \right) + \frac{Q}{c_p} \quad (C.16)$$

O termo PR representa a tendência de precipitação e os índices  $r$ ,  $i$  e  $g$  indicam em qual fase da água está ocorrendo a transformação,  $\theta_{il}$  é a temperatura potencial da água líquida e gelo,  $L_{lv}$  e  $L_{iv}$  representam o calor latente de vaporização e de sublimação respectivamente,  $c_p$  é o calor específico a pressão constante. O termo diabático  $Q/c_p$  representa a única forçante externa do modelo.

### Parametrização de turbulência

A turbulência está associada ao movimento aparentemente caótico que se manifesta de forma irregular em flutuações aleatórias na velocidade, temperatura e concentração de escalares em torno de um valor médio. Na *camada Limite Planetária* (CLP) os movimentos são essencialmente turbulentos, onde a turbulência é gerada de duas formas; **mecânica** devido à presença de grandes cisalhamentos necessários para satisfazer a condição de não-deslizamento, sendo a mais pronunciada próximo à superfície e **térmica**, associada ao aquecimento da superfície terrestre e posterior transferência de calor para a atmosfera, dessa forma a energia é transferida pelos processos convectivos e/ou de mistura, e como esses processos ocorrem em escalas muito pequenas para serem resolvidas por modelos de mesoescala devem ser parametrizados [4].

No modelo BRAMS há quatro opções distintas para a parametrização dos coeficientes

de difusão turbulenta, dividida em duas classes em função da relação do espaçamento de grade, horizontal ou vertical.

A teoria da turbulência é utilizada na parametrização da turbulência no modelo BRAMS, onde os termos das variáveis prognósticas que não podem ser resolvidos explicitamente (efeito de sub-grade), são avaliados como o produto de um coeficiente turbulento e o gradiente da quantidade transportada, ou seja:

$$\overline{u'_i \phi'} = -K_{h_i} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) \quad (\text{C.17})$$

onde  $K_{h_i}$  é o coeficiente de difusão turbulento para o escalar  $\phi$  na direção  $i$ . A componente do fluxo não resolvível para o momentum pode ser expressa como  $\overline{u'_i u'_j}$ , assim como  $\overline{u'_i \phi'}$  é para um escalar, onde  $u_i$  é a componente da velocidade que transporta e  $u_j$  é a componente da velocidade transportada e o coeficiente de mistura turbulenta para o momentum é dado por  $K_{m_i}$ , onde a média de Reynolds é representada pela barra, e ' indica o desvio em relação a média.

A parametrização baseada na formulação de Smagorinsky (1963) [53] para os coeficientes de difusão horizontal, que emprega uma grade anisotrópica (o espaçamento horizontal é muito maior que a vertical), cujos fluxos turbulentos são parametrizados utilizando a teoria do fluxo-gradiente conhecida como Teoria  $K$ . A Teoria  $K$ , contém em um fechamento de 1ª ordem onde os fluxos turbulentos são proporcionais aos gradientes locais da correspondente quantidade média transportada [4].

Na formulação de Smagorinsky, os coeficientes de difusão são calculados como o produto da taxa de deformação horizontal (gradientes horizontais da velocidade do vento) e do quadrado da escala da escala de comprimento, onde a escala de comprimento  $l$  é o produto do espaçamento da grade horizontal  $\Delta x$ , por um fator de multiplicação que irá depender das dimensões da grade utilizada. Para avaliar os coeficientes de difusão turbulenta na vertical, segue-se o esquema de Mellor e Yamada (1982) [37], que utiliza a Energia Cinética Turbulente (ECT) prognosticada pelo modelo.

Uma segunda opção que pode ser utilizada para a parametrização, consiste na utilização da mesma parametrização dos coeficientes horizontais usados na opção anterior, e para os coeficientes verticais utiliza-se um análogo unidimensional do esquema de Smagorinsky. A deformação vertical obtém-se dos gradientes verticais do vento horizontal (cisalhamento vertical) e a escala de comprimento é o espaçamento vertical local multiplicado por um fator que dependerá das dimensões da grade utilizada.

Numa terceira opção, os coeficientes de difusão da horizontal e na vertical são calculados



como um produto entre tensor tensão de cisalhamento em três dimensões e o quadrado da escala de comprimento [47] *apud* Kosovic, 1997 [23].

Uma quarta opção utiliza o esquema de Deardorff (1978) [10] e faz uso da ECT para o cálculo dos coeficientes de difusão horizontal e vertical. Este esquema é destinado somente para a finalidade específica de Simulações de Grandes Turbilhões (LES) os quais consideram que os movimentos turbulentos resolvidos pelo modelo realizam a maior parte do transporte turbulento [47].

### **Parametrização solo/vegetação**

O modelo hidrológico utilizado, acoplado ao modelo atmosférico, é o modelo LEAF-3 (*Land Ecosystem-Atmosphere Feedback model*)(Walko e Tremback, 2001)[61], possibilitando a análise da interação atmosfera-vegetação-solo. O LEAF-3 é uma das parametrizações que tem sido desenvolvidas na Universidade do Colorado como parte do RAMS. A versão LEAF-3 é uma representação dos aspectos da superfície incluindo vegetação, solo, lagos e oceanos e suas influências sobre a atmosfera. LEAF-3 inclui equações prognósticas para temperatura do solo e umidade em múltiplas camadas, temperatura da vegetação e água na superfície incluindo orvalho e precipitação interceptada, energia termal para múltiplas camadas, temperatura e razão de mistura do vapor da água do ar do dossel. Os termos de troca nestas equações prognósticas incluem trocas turbulentas, condução de calor, difusão de água e percolação nas camadas do solo, transferências radiativas de onda curta e onda longa, transpiração e precipitação.

O fluxo de umidade entre camadas é parametrizado baseado no modelo de multicamada descrito por Tremback e Kessler (1985)[57]. O fluxo de umidade é dado por:

$$F_{wgg} = -\rho_w K_\eta \frac{\partial(\Psi + z)}{\partial z} \quad (C.18)$$

onde  $\rho_w$  é a densidade da água líquida,  $K_\eta$  (m/s) é a condutividade hidráulica,  $\Psi$  é a umidade potencial ou tensão, e  $z$  a altura (m).

Como o LEAF-3 realiza o transporte de água somente na vertical, é necessária a utilização de algum recurso para representar o transporte lateral da água no solo. Para esta tarefa, o LEAF-3 utiliza o TOPMODEL (Beven et. al., 1984 [7]; Sivapalan et. al., 1987 [51]).

TOPMODEL é um modelo hidrológico que representa o transporte lateral inclinado da água dentro de regiões saturadas do solo. Este modelo baseia-se na teoria de contribuição variável para a formação do escoamento e estima o déficit hídrico no solo e área fonte satu-

rada (área de contribuição direta) a partir de características topográficas e do solo.

O acoplamento entre estes dois modelos pode simultaneamente representar, tanto o transporte vertical como o horizontal e suas interações. O transporte de água dentro do solo é relativamente lento, com um deslocamento lateral de somente uns poucos metros por dia ou menos. Conseqüentemente TOPMODEL representa o transporte de água em escalas muito mais finas do que as típicas dimensões das células de grade horizontal no RAMS.

O acoplamento mais apropriado é o TOPMODEL trocar a umidade do solo entre “*patches*” mais do que entre células de grade. Assim, na região de interesse do TOPMODEL, um “*patch*” é identificado como uma região na qual pode-se ganhar ou perder umidade do solo, devido ao transporte lateral. A troca de água vertical no LEAF-3 responde a distribuição de água e as taxas de transporte calculadas pelo TOPMODEL.