

6 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS SIMULADOS COM OUTROS MODELOS

Além do modelo utilizado neste trabalho (descrito no capítulo 3), existem outros modelos de dispersão de poluentes na atmosfera muito usados operacionalmente. Fazem parte destes modelos os de pluma gaussianos, que utilizam diferentes parâmetros de dispersão σ_y e σ_z para o cálculo de concentração de contaminantes na superfície.

6.1 Modelos de pluma gaussianos

Os modelos gaussianos são muito utilizados, porém, aplicam-se somente no limite de grandes tempos de difusão para condições homogêneas e estacionárias, para as quais o problema da difusão pode ser tratado de forma mais simples.

A função distribuição normal ou gaussiana fornece uma solução fundamental da equação de difusão, e tem sido assumida como um modelo de difusão em muitos trabalhos. Ela apresenta a seguinte forma:

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-0.5 \left(\frac{h_e}{\sigma_z}\right)^2\right) \exp\left(-0.5 \left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right) + R_s \quad (86)$$

onde Q é a intensidade de uma fonte pontual contínua, h_e é a altura efetiva da fonte dada por $h_e = H_s + \Delta h$, onde H_s é a altura da emissão do

poluente, Δh é o termo de correção devido a ascensão da pluma e R_s é o termo associado a reflexão do topo da camada de mistura.

A concentração integrada lateralmente é definida por:

$$\bar{c}^y(x, z) = \int_0^{\infty} c(x, y, 0) dy \quad (87)$$

6.2 Modelos de “puff” gaussianos CALPUFF

Modelos de “puff” gaussianos foram desenvolvidos para aplicações de emissões não estacionárias (condições meteorológicas variando) em condições de dispersão não homogêneas, (Zannetti, 1990). Estes modelos têm uma vantagem adicional de poderem ser aplicados à condições de calmaria ou de ventos fracos, onde os modelos gaussianos não podem ser aplicados.

Estes tipos de modelos representam a pluma através de um número muito grande de “puffs” discretos de material poluente, e, assumem que cada emissão de poluentes injeta na atmosfera uma determinada quantidade de massa m . O centro do “puff” contendo esta massa, é transportado de acordo com o vetor velocidade do vento local, enquanto se expande de maneira gaussiana no tempo através dos coeficientes de dispersão σ_x, σ_y e σ_z . Estes coeficientes são dependentes do tempo, e os responsáveis pelo crescimento de cada “puff”. Se, em um tempo t , o centro de um “puff” está localizado em $p(t) = (x_p, y_p, z_p)$, então a

concentração devido aquele “puff” no receptor $r=(x_r, y_r, z_r)$ pode ser calculada utilizando a fórmula de “puff” gaussiana básica:

$$\Delta c = \frac{\Delta m}{(2\pi)^{3/2} \sigma_h^2 \sigma_z} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x_p - x_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_p - y_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z_p - z_r}{\sigma_h}\right)^2\right] \quad (88)$$

que é freqüentemente expandida para incorporar os termos de reflexão (reflexão da pluma no solo) e deposição/decaimento (precipitação dos poluentes e transformação química). Se integrarmos a equação (88) considerando condições de transporte homogêneo e estacionário teremos a equação da pluma gaussiana clássica.

6.3 Comparação dos resultados simulados com os de um modelo gaussiano e com os de um modelo “puff” gaussiano CALPUFF

Nesta seção, faz-se a comparação dos resultados simulados pelo modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar (capítulo 5) com os resultados simulados por um modelo gaussiano e por um modelo “puff” gaussiano CALPUFF (Mangia, 2003). As comparações dos resultados simulados serão feitas pelos índices estatísticos, onde o modelo (I) representará o modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar, o modelo (II) representará o modelo gaussiano, e, finalmente o modelo (III) representará o modelo “puff” gaussiano CALPUFF.

Os resultados simulados pelo modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar que serão utilizados nas comparações serão os das tabelas 5.6, 5.12 e 5.22, pois, estes resultados são os simulados para a uma turbulência gerada por efeitos térmicos e mecânicos ($kc+ks$). Estes resultados serão usados, pois, os resultados simulados pelos modelos gaussiano e “puff” gaussiano CALPUFF também são para uma turbulência gerada por efeitos térmicos e mecânicos (Mangia, 2003).

Na tabela 6.1, abaixo, são apresentados os índices estatísticos simulados pelos três modelos para o experimento de Copenhagen.

Tabela 6.1: Índices estatísticos simulados pelos três modelos para o experimento de Copenhagen.

Modelo	Nmse	Cor	Fa2	Fb
I	0.090	0.833	0.957	0.020
II	0.130	0.740	0.960	0.030
III	0.120	0.790	0.960	-0.070

Pela tabela 6.1, podemos observar que os melhores resultados ocorrem para o modelo (I), pois o erro quadrático médio normalizado é o mais baixo (0.090), o coeficiente de correlação é o que apresenta o maior valor (0.833) e o desvio fracional apresenta o menor valor (0.020).

Na tabela 6.2, abaixo, são apresentados os índices estatísticos simulados pelos três modelos para o experimento de Prairie Grass.

Tabela 6.2: Índices estatísticos simulados pelos três modelos para o experimento de Prairie Grass.

Modelo	Nmse	Cor	Fa2	Fb
I	0.090	0.981	0.720	-0.070
II	0.460	0.817	0.914	-0.066
III	0.870	0.852	0.830	-0.474

Pela tabela 6.2, podemos observar que os melhores resultados ocorrem para o modelo (I), pois o erro quadrático médio normalizado é o mais baixo (0.090) e o coeficiente de correlação é o que apresenta o maior valor (0.981).

Na tabela 6.3, abaixo, são apresentados os índices estatísticos simulados pelos três modelos para o experimento de Kinkaid.

Tabela 6.3: Índices estatísticos simulados pelos três modelos para o experimento de Kinkaid.

Modelo	Nmse	Cor	Fa2	Fb
I	1.10	0.697	0.675	-0.448
II	0.86	0.370	0.660	-0.175
III	1.21	0.190	0.480	-0.422

Finalmente, através da tabela 6.3 podemos observar que os melhores resultados ocorrem para o modelo (I), pois o coeficiente de correlação é o que apresenta o maior valor (0.697) e o fator de dois apresenta o maior valor (0.675), e, para o modelo(II) pois o erro quadrático médio normalizado apresenta o menor valor (0.86) e o desvio fracional também apresenta o valor mais próximo de zero.

7 CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

A equação da difusão-advecção tem sido largamente aplicada em modelos operacionais de dispersão de contaminantes atmosféricos para reproduzir o campo de concentração médio na CLP. Em princípio desta equação é possível obter um modelo teórico da dispersão de uma fonte pontual contínua dadas as condições iniciais e de contorno apropriadas e um conhecimento do campo de velocidade média e dos fluxos turbulentos de concentração.

Muitas pesquisas em turbulência foram desenvolvidas para descrever os fluxos turbulentos com o objetivo de se encontrar uma solução da equação da difusão-advecção: este procedimento, algumas vezes, é chamado como fechamento do problema de difusão turbulento. O método principal de fechamento da equação é expressar os fluxos turbulentos de concentração através dos gradientes de concentração médios empregando coeficientes de difusão turbulentos.

No presente trabalho foram apresentados coeficientes de difusão turbulentos para uma turbulência gerada por efeitos térmicos e mecânicos. As parametrizações dos termos turbulentos nos coeficientes de difusão turbulentos forneceram valores contínuos para todas as elevações da CLP ($z_o \leq z \leq h, z_i$) e para todas as condições de estabilidade do regime instável ao estável. Os coeficientes de difusão turbulentos para uma turbulência gerada por efeitos térmicos e mecânicos foram substituídos no modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar para simular as concentrações dos

experimentos de Copenhagen, Prairie Grass e Kinkaid. Estas simulações foram comparadas com as concentrações observadas nos experimentos para efetuar a validação do referido modelo.

Os resultados simulados pelo modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar tiveram uma boa concordância com os dados observacionais.

Finalmente, foi aplicado um conjunto de índices estatísticos aos dados, os quais foram comparados com os índices estatísticos gerados por um modelo gaussiano e por um modelo “puff” gaussiano CALPUFF. Com base na análise estatística derivada deste confronto pode-se concluir que os melhores resultados simulados para o experimento de Copenhagen foram obtidos pelo emprego do modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar. Da mesma forma, os melhores resultados simulados para o experimento de Prairie Grass também foram obtidos pelo emprego do modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar. E, os melhores resultados simulados para o experimento de Kinkaid foram obtidos pelo emprego do modelo Euleriano semi-analítico de poluição do ar e pelo modelo gaussiano.

Portanto, pode-se sugerir que o modelo de dispersão Euleriano semi-analítico de poluição do ar forneceu os melhores resultados para os experimentos de Copenhagen e Prairie Grass porque ele varia com a altura, (a altura da CLP é discretizada em N subintervalos) ou seja, os coeficientes de difusão variam com a altura. Além disso, o modelo vale também para condições não homogêneas da turbulência, enquanto que o modelo gaussiano vale somente para condições

homogêneas e estacionárias da turbulência. Outro fator que pode explicar os bons resultados do modelo é que os coeficientes de difusão turbulentos levam em conta o efeito de memória e também contém os parâmetros físicos descritos em função da teoria de difusão estatística clássica de Taylor, das propriedades espectrais observadas e das características observadas dos grandes turbilhões.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANGEL, J. K.: **Lagrangian-Eulerian time-scale relationship estimated from constant volume ballon flights past a tall tower**, Advances in Geophysics, 18 A, Academic Press, 419-432. 1974
- ARYA, S. P.: **Modelling and Parameterization of Near-Source Diffusion in Weak Winds**, J. Appl Meteor., 34, 1112-1122. 1995
- BARAD, M. L.: **Project Prairie Grass, a Field Program in Diffusion**, Geophys. Res. Pap., n. 59, vols. 1 and 2, Geophysics Research Directorate, Air Force Cambridge Research Center, 1958
- BATCHELOR, G. K.: **Diffusion in a Field of Homogeneous Turbulence, I: Eulerian Analysis**, Aust. J. Sci. Res. 2, 437-450. 1949
- BERKOWICZ, R. R. AND PRAHM, L. P.: **Spectral representation of the vertical structure of turbulence in the convective boundary layer**, Q. J. R. Meteorol. Soc., 110, 35-52. 1984
- _____; OLESEN, H. R. AND TORP, U.: **The Danish Gaussian air Pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications**, Air pollution modeling and its application. Edited by C. De Wispelaere, F. A. Schiermeirier and N. V. Gillani, Plenum Publishing Corporation, pp. 453-480. 1986
- BLACKADAR, A., K.: **The vertical distribution of wind and turbulent exchange in a neutral atmosphere**, Journal of Geophysical Research 67, 3095-3102. 1962

- BRIGGS, G. A.: **Plume Rise Predictions**, Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses, D. A. Haugen ed., American Meteorological Society, Boston, MA, pp. 59-111. 1975
- CAUGHEY, S. J. AND PALMER, S. G.: **Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer**, Q. J. R. Meteorol. Soc., 105, 811-827. 1979
- ____ : **Observed Characteristics of the atmospheric boundary layer. In: Nieuwstadt, F. T. M. and van Dop, H. (eds.), Atmospheric turbulence and air pollution modelling**, Reidel Publishing Company, Dordrecht, 107-158. 1982
- CHAMPAGNE, F. H.; FRIEHE, J. C.; LA RUE, J. C. AND WYNGAARD, J. C.: **Flux measurements, flux estimation techniques, and fine-scale turbulence measurements in the unstable surface layer over land**, J. Atmos. Sci., 34, 515-530. 1977
- DEARDORFF, J. W.: **Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layer**, J. Atmos. Sci., 29, 91-115. 1972
- DEGRAZIA, G. A.: **Anwendung von Ähnlichkeitsverfahren auf die turbulente Diffusion in der konvektiven und stabilen Grenzschicht**, Wissenschaftlicher Bericht des instituts für Meteorologie und Klimatologie der Universität Karlsruhe, 12, 98pp.. 1989
- ____ AND MORAES, O. L. L.: **A Model for Eddy Diffusivity in a Stable Boundary Layer**, Boundary-Layer Meteorol. 58, 205-214. 1992

- _____, CAMPOS VELHO, H. F. AND CARVALHO, J. C.: **Nonlocal Exchange Coefficients for the Convective Boundary Layer Derived From Spectral Properties**, Beitr. Phys. Atmosph., 70, 57-64. 1997
- _____ AND ANFOSSI, D.: **Estimation of the Kolmogorov constant C_0 from classical statistical diffusion theory**, Atmos. Environm., 32, 3611-3614. 1998
- _____; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J. C.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T. AND CAMPOS VELHO, H. F.: **Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions**, Atmos. Environm., 34, 3575-3583. 2000
- _____ AND MOREIRA, D. M.: **Derivation of an Eddy Diffusivity Depending on Source Distance for Vertically Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer**, American Meteorological Society, 40, 1233-1240. 2001
- DELAGE, Y.: **A numerical study of the nocturnal atmospheric boundary layer**, Q. J. R. Meteorol. Soc., 100, 351-364. 1974
- GARRATT, J. R.: **The Atmospheric Boundary Layer**, Cambridge, 316 pp. 1992
- GRYNING, S. E.: **Elevated source SF6-tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**, Risoe-R-446. 1981
- GRYNING, S. W. AND LYCK, E.: **Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations**, J. Climate Appl. Meteor., 23, 651-660. 1984

- GRYNING, S. E., HOLTSLAG A. A. M., IRWIN J. S. AND SIVERSTEN B., *Atmos. Environ.*, 21, 79. 1987
- HANNA, S. R.: **A method of estimating vertical eddy transport in the planetary boundary layer using characteristics of the vertical velocity spectrum**, *Journal of Atmospheric Science* 25, 1026. 1968
- _____: **Lagrangian and Eulerian Time-Scale in the Daytime Boundary Layer**, *J. Appl. Meteorol.* 20, 242-249. 1981
- _____: **Applications in air pollution modeling. Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling**, F. T. M. Nieuwstad and H. von Dop, Eds., D. Reidel Publishing, 275-310. 1982
- _____: **Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods**, *Atmos. Environ.*, 23, 1385-1395. 1989
- ____ AND PAINE, R. J.: **Hibrid Plume Dispersion Model (HPDM) development and evaluation**, *J. Appl. Meteorol.* 28, 206-224. 1989
- HEYDARIAN, M. AND MULLINEAUX, N.: **Solution of parabolic partial differential equations**, *Appl. Math. Modelling*, bf 5, 448-449. 1989
- HOJSTRUP, J.: **Velocity spectra in the unstable boundary layer**, *J. Atmos. Sci.*, 33, 2152-2169. 1982
- KAIMAL, J. C., WYNGAARD, J. C., HAUGEN, D. A., COTE, O. R., IZUMI, Y., CAUGHEY, S. J. AND READINGS C. J.: **Turbulence structure in the convective boundary layer**, *J. Atmos. Sci.*, 33, 2152-2169. 1976

- LUHAR, A. AND BRITTER, R.: **A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer**, Atmos. Environ., 23, 1911-1923. 1989
- MANGIA, C., SCHIPA, I., DEGRAZIA, G. A., TIRABASSI, T. AND RIZZA, U.: **A model for the estimation of dispersion coefficients for use in a Gaussian model in different stability conditions**. 2003
- MOENG, C. H. AND SULLIVAN, P. P.: **A comparison of shear and buoyancy driven planetary boundary layer flows**, J. Atmos. Sci., 51, 999-1022. 1994
- NIEUWSTADT, F. T. M.: **An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer**, Atmos. Environ., 14, 1361-1364. 1980
- _____: **The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer**, J. Atmos. Sci., 41, 2202-2216. 1984
- OLESEN, H. R., LARSEN, S. E. and HOJSTRUP, J.: **Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer**, Boundary-Layer Meteorol., 29, 285-312. 1984
- PASQUILL, F.: **Atmospheric Diffusion**, Wiley & Sons, 429 pp.. 1974
- _____, AND SMITH, F. B.: **Atmospheric Diffusion**, Wiley & Sons, 437 pp.. 1983
- _____, AND SMITH, F. B.: **Atmospheric Diffusion**, Ellis Horwood Ltd., Chichester, 437pp. 1983

- PANOFSKY, H. A. AND DUTTON, J. A.: **Atmospheric turbulence**, Wiley, New York, 397 pp.. 1984
- PAULSEN, C. A.: **The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer**, J. Appl. Meteorol. 9, 857-861. 1975
- SORBJAN, Z.: **Structure of the Atmospheric Boundary Layer**, Prentice Hall, NJ, 317 pp.. 1989
- STROUD, A. H. AND SECREST, D.: **Gaussian Quadrature Formulas**, Englewood Cliffs, N. J., Prentice Hall, Inc. 1966
- STULL, R. B.: **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic Publishers, Boston, 666 pp. 1988
- TAYLOR, G. I.: **Diffusion by continuous movements**, Proceedings London Mathematical Society, Series 2, vol. 20, 196-211. 1921
- TENNEKES, H.: **Similarity relations, scaling laws and spectral dynamics**, In: Nieuwstadt, F. T. M., Van Dop, H. (Eds.), Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling Reidel, Dordrecht, pp. 37-68. 1982
- VILHENA, M. T. AND BARICHELLO, L. B.: **A new analytical approach to solve the neutron transport equation**, Kerntechnik, vol. 56, n.5, 334-336. 1991
- VILHENA, M. T. AND STRECK, E. E.: **An approximate analytical solution of the one-group neutron transport equation**, Kerntechnik, vol. 57, n.3, 196-198. 1992
- WANDEL, C. F. AND KOFOED-HANSEN, O.: **On the Eulerian-Lagrangian transform in the statistical theory of turbulence**, J. Geophys. Res., 76, 3089-3093. 1962

- WEIL, J. C.: **Assessment of plume rise and dispersion models using lidar data, PPSP-MP-24**, Prepared by Environmental Center, Martin Marietta Corporation, for Maryland Department of Natural Resources. 1979
- WILLIS, G. E. AND DEARDORFF, J. W.: **A laboratory model of the unstable planetary boundary layer**, J. Atmos. Sci., 31, 1297-1307. 1974
- WYNGAARD, J. C., COTE, O. R. and RAO, K. S.: **Modelling of the atmospheric boundary layer**, Advances in Geophysics, Vol. 18A. Academic Press, New York, pp.193-212. 1974
- ZANNETTI, P.: **Air pollution modeling**, Van Nostrand, Reinhold. 1990