

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

**PROBLEMAS INVERSOS EM FÍSICA DA
ATMOSFERA**

TESE DE DOUTORADO

Débora Regina Roberti

**Santa Maria, RS, Brasil
2005**

PROBLEMAS INVERSOS EM FÍSICA DA ATMOSFERA

por

Débora Regina Roberti

Tese a ser apresentada ao Curso de Doutorado em Física do Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Fenomenologia Clássica e suas Aplicações, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de
Doutor em Física.

Orientador: Gervásio Annes Degrazia

Santa Maria, RS, Brasil

2005

**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

**PROBLEMAS INVERSOS EM
FÍSICA DA ATMOSFERA**

elaborada por
Débora Regina Roberti

Como requisito parcial para obtenção do grau de
Doutor em Física

COMISSÃO EXAMINADORA:

Dr. Gervásio Annes Degrazia
(Presidente/Orientador)

Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho (Co-Orientador-INPE)

Dr. Antônio José da Silva Neto (IPRJ-UERJ)

Dr. Osvaldo Luis Leal de Moraes (UFSM)

Dr. Celso Arami Marques da Silva(UFSM)

Santa Maria, 08 de abril de 2005.

Aos meus pais e ao Rodrigo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus orientadores Dr. Gervásio Annes Degrazia e Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho pelo incentivo constante, orientação paciente e grande amizade.

Ao orientador do estágio no ISAC-CNR Turim, Dr. Domenico Anfossi pelas agradáveis discussões e a todos do ISAC por proporcionarem *sei mesi di belli ed indimenticabili giorni*.

Ao L μ met – UFSM por proporcionar que eu tivesse contato com outros problemas em física da atmosfera, em especial aos prof. Dr. Osvaldo Moraes e Dr. Otávio Acevedo.

Ao LAC-INPE – São José dos Campos pelo ambiente de trabalho produtivo.

Ao pesquisador Dr. Ezzat Chalhoub e ao doutorando Roberto P. Souto, ambos do LAC-INPE, pelo auxílio na implementação do método de otimização Levenberg –Marquardt e *Simulated Annealing*, respectivamente. Ao Roberto agradeço ainda o auxílio na implementação paralela do modelo LAMBDA.

Aos meus amigos dos diversos lugares onde passei que sempre tornaram a minha estada muito agradável.

A minha família, em especial.

Ao Rodrigo, sempre tão próximo, apesar da distância!

Este trabalho foi financiado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) – Projeto 200046/2004-7

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	9
2. PROBLEMA DIRETO EM POLUIÇÃO ATMOSFÉRICA	15
2.1. Modelo Euleriano.....	15
2.1.1. Modelo Euleriano unidimensional.....	18
2.2. Modelo Lagrangeano.....	19
2.2.1. Modelo de Partículas Avançado.....	22
2.2.2. Modelo de Partículas Regressivo.....	26
2.2.3. Cálculo da Concentração com um Modelo de Partículas.....	28
2.2.4. O modelo tridimensional LAMBDA.....	30
2.3. Parametrização da Turbulência.....	33
2.4. Aproximações para o termo de contra-gradiente.....	37
2.4.1. Desempenho da nova formulação do termo de contra-gradiente.....	39
2.5. Modelo Fonte-Receptor.....	41
2.5.1. Comparação entre as integrações avançada e regressiva num Modelo de Partículas.....	43
3. PROBLEMAS INVERSOS EM FÍSICA DA ATMOSFERA	52
3.1. Métodos Explícitos.....	53
3.2. Soluções Regularizadas.....	56
3.3. Métodos de Otimização.....	58
3.3.1. Método de Levenberg-Marquardt.....	60
3.3.2. Método Quase-Newton.....	62

3.3.3. Método do Recozimento Simulado – <i>Simulated Annealing</i>	63
4. ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS TURBULENTOS	65
4.1. Estimação do coeficiente de difusão vertical.....	66
4.2. Estimação do termo de contra-gradiente.....	80
5. ESTIMAÇÃO DE FONTES DE POLUIÇÃO NA ATMOSFERA	86
5.1. Dificuldade em se utilizar dados experimentais.....	87
5.2. CASO 1: Estimação da intensidade de emissão para o experimento de Karlsruhe.....	96
5.3. CASO 2: Estimação da intensidade de emissão no experimento de Copenhague.....	100
5.3.1. Simulação numérica para o experimento de Copenhague.....	100
5.3.2. Estimação da intensidade da fonte.....	108
5.4. CASO 3: Estimação de duas fontes pontuais contínuas na mesma posição, mas em diferentes alturas.....	110
5.5. CASO 4: Estimação da intensidade de uma fonte de área e de uma de fonte linha.....	115
5.6. CASO 5: Estimação da intensidade de fontes que variam espacial e temporalmente.....	120
5.7. CASO 6: Estimação da intensidade e localização de fontes.....	124
5.8. CASO 7: Estimação da dimensão horizontal de uma fonte de área.....	131
6. CONCLUSÕES	134
6.1. Metodologia de Problema Inverso no ciclo de CO ₂ atmosférico.....	135
6.2. Trabalhos Futuros.....	136
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	138
ANEXO A	147

RESUMO

Tese de Doutorado

Programa de Pós-Graduação em Física

Universidade Federal de Santa Maria, RS, Brasil

PROBLEMAS INVERSOS EM FÍSICA DA ATMOSFERA

AUTORA: DÉBORA REGINA ROBERTI

ORIENTAÇÃO: Dr. GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA e Dr. HAROLDO FRAGA DE
CAMPOS VELHO

Local e Data da Defesa: Santa Maria, 08 de abril de 2005.

Neste estudo apresentam-se técnicas para estimar termos desconhecidos em fluxos atmosféricos, tais como coeficiente de difusão turbulento e termo de contra-gradiente. O método é também usado para a estimação de termos de fonte em poluição atmosférica. O esquema adotado é baseado na metodologia de problema inverso. O problema inverso é formulado como um problema de otimização não linear, onde a função objetivo é definida como a diferença quadrática entre dados experimentais e dados obtidos através de um modelo matemático de transporte. Para a estimação de propriedades de fluxo atmosféricos, uma estratégia de inversão implícita foi utilizada, onde um modelo eurliano foi empregado como modelo matemático. Para a estimação do termo de fonte de poluição, um procedimento de inversão empregando a técnica fonte-receptor foi testado em diversos cenários físicos. Para simulação da dispersão de poluentes na atmosfera foi empregado um modelo lagrangeano. Em alguns casos tornou-se necessário aplicar técnicas de regularização na obtenção da solução inversa. Regularização de Tikhonov e em entrópicas foram empregadas, quando necessário. Três diferentes métodos de otimização são utilizados: Levenberg-Marquardt e quase-Newton (determinísticos) e recozimento simulado (estocástico). Os resultados comprovam a robustez do método de inversão nas diversas situações testadas.

Palavras chaves: problema inverso, estimação de fontes, estimação de parâmetros atmosféricos

ABSTRACT

Tese de Doutorado

Programa de Pós-Graduação em Física

Universidade Federal de Santa Maria, RS, Brasil

INVERSE PROBLEM IN ATMOSPHERIC PHYSICS

AUTORA: DÉBORA REGINA ROBERTI

ORIENTAÇÃO: Dr. GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA e Dr. HAROLDO FRAGA DE CAMPOS VELHO

Local e Data da Defesa: Santa Maria, 08 de abril de 2005.

Techniques for estimating unknown terms - such as eddy diffusivity and counter-gradient - in atmospheric flow are presented in this study. The method is also used to identify the source term in atmospheric pollution. The scheme adopted is based on inverse problem methodology. The inverse problem is formulated as a non-linear optimization problem, where the objective function is defined as the square difference between observational data and data from a transport mathematical model. For estimating the properties of the atmospheric flux, an implicit strategy was used, and an Eulerian model was used as forward model. The estimation of the pollutant source term was tested employing a source-receptor technique. In the pollutant dispersion simulation, a Lagrangian model was applied. For some inversions, regularized solutions should be searched. The Tikhonov and entropy regularizations were considered. Three different optimization methods were used: Levenberg-Marquardt, quasi-Newton (deterministic) e simulated annealing (stochastic). The results show a good performance of the proposed methodology in many tested situations.

Key words: inverse problem, source estimation, atmospheric parameters estimation

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Problemas inversos (PI) é uma área de intensa pesquisa, devido a sua importância científica, econômica, social e inclusive política. Exemplos de aplicação de problemas inversos são encontrados nas mais diversas áreas do conhecimento. O estudo da radiação cósmica de fundo em micro-ondas (RCFM), que muitos acreditam validar a hipótese do *Big-Bang*, (teoria mais aceita da origem do universo) trata da representação da flutuação de temperatura no universo observado em harmônicos esféricos. Diferentes composições destes harmônicos estão ligados à razão entre massa de bárions e fótons do universo, sua curvatura entre outras propriedades. Estimar quais harmônicos irão compor o mapa de RCFM é um problema inverso. A construção e interpretação de mapas de RCFM são consideradas como um dos problemas centrais em cosmologia.

O projeto tecnológico que resultou na construção do telescópio espacial Hubble levou 10 anos com um custo superior a US\$ 10 bilhões, no entanto as imagens originalmente obtidas eram desfocadas ou embaçadas. A correção das imagens era conseguida (para posterior análise) através de técnica de tratamento que usa metodologias de problemas inversos, conhecidas como restauração de imagens. Outro importante exemplo é o desenvolvimento da tomografia computadorizada, onde a reconstrução de propriedades físicas é realizada a partir de dados de sensores que captam informações provenientes de um corpo material. Esta constitui uma das aplicações mais relevantes de problemas inversos, com enorme impacto para a sociedade.

Da maneira com que a sociedade se estruturou no século XX, o combustível fóssil petróleo representa um elemento energético fundamental para a manutenção das sociedades industriais modernas. Para tanto, a atividade fundamental está ligada a prospecção deste combustível, que é uma aplicação clássica de PIs. Várias técnicas foram desenvolvidas para prospecção deste importante recurso natural. Um destes métodos de prospecção é conhecido como inversão magneto-telúrica. Um nome importante no desenvolvimento deste método é o

do matemático russo Andrei N. Tikhonov, o primeiro a formalizar uma teoria geral para solução de PIs. Todavia, na segunda metade do século XX começou-se perceber os efeitos negativos proveniente do uso de combustíveis fósseis sobre a saúde do planeta, com conseqüências principalmente na diminuição da camada de ozônio e no efeito estufa. A poluição atmosférica tem preocupado cientistas e líderes das nações do mundo. O protocolo de Quioto, que tenta impor regras à emissão de gases do efeito estufa, é uma das tentativas de se manter a questão do desequilíbrio ecológico (ou climatológico) sob controle. O inventário de fontes e sumidouros destes gases ligados ao efeito estufa (ou outros agentes poluidores) é um tipo de problema inverso (voltaremos a este assunto no decorrer do texto).

O objetivo do presente trabalho é aplicar técnicas de problemas inversos para identificar propriedades na baixa atmosfera, onde o contato da atmosfera com uma fronteira física (solo ou águas naturais – como oceano, lagos e rios) faz aparecer uma camada delgada na atmosfera onde a turbulência não pode ser desconsiderada. Tal camada é chamada de Camada Limite Planetária (CLP).

Turbulência é um fenômeno geral observado na natureza e representa um estado físico de sistemas de fluidos extremamente complexo. Particularmente, o fluido que compõe a CLP encontra-se geralmente em um estado turbulento. Matematicamente, o escoamento de um fluido é descrito por equações de conservação: momentum (equações de Navier-Stokes), massa (equação da continuidade), calor (primeira lei da termodinâmica), conservação de uma quantidade escalar genérica, além da equação de estado (lei do gás ideal). Em um escoamento turbulento, as várias quantidades físicas apresentam uma variação aleatória no espaço e tempo.

Basicamente, existem duas aproximações para a modelagem do transporte turbulento em fluidos. A primeira é a aproximação Lagrangeana, onde investiga-se a posição (x, y, z) de uma partícula de fluido em um tempo t relativo a sua posição (x_0, y_0, z_0) em um tempo de referência inicial t_0 . A segunda é a aproximação Euleriana, onde o comportamento das variáveis turbulentas é descrito em relação a um sistema de coordenadas fixas. Uma forma de solucionar um modelo Euleriano é resolver numericamente o sistema de equações que descreve o escoamento turbulento através de uma simulação numérica direta (*Direct Numeric Simulation*: DNS). A análise das escalas de comprimento do escoamento turbulento atmosférico mostra que situações típicas na Camada Limite são associadas com escalas de movimento turbulento variando de 300 m a 1 mm. Como conseqüência, para uma turbulência com número de Reynolds da ordem de 10^7 , que será resolvida numa grade numérica de, por

exemplo, $10 \text{ km} \times 10 \text{ km} \times 1 \text{ km}$, requererá aproximadamente 10^{20} pontos de grade (para resolver em escalas de 1 mm, tem-se uma grade computacional com: $10^7 \times 10^7 \times 10^6 = 10^{20}$ pontos de grade) para resolver todas as flutuações.

A análise acima mostra claramente que, na prática, é impossível resolver diretamente os escoamentos turbulentos geofísicos presentes na CLP. Um método para descrever o campo turbulento emprega a operação de média de Reynolds. Nesta aproximação, as variáveis turbulentas são decompostas em um valor médio determinístico e uma componente flutuante. O processo de média sobre conjunto gera uma equação que descreve uma variável aleatória e que contém um termo desconhecido que deve ser parametrizado. Conseqüentemente, esta parametrização deve levar em conta todos os graus de liberdade do movimento turbulento, ou seja, o intervalo espectral completo associado ao campo turbulento deve ser considerado na parametrização dos fluxos turbulentos. Uma parametrização muito empregada em problemas de Física da Atmosfera e em Engenharia é conhecida como a Teoria K. Neste particular modelo assume-se que os fluxos turbulentos são representados pelo produto de um coeficiente de difusão por um gradiente de uma quantidade média. Além disso, existem ocasiões em que o movimento pode ser contrário ao transporte por gradiente, e um termo representando o contra-gradiente deve ser adicionado. Desta forma, os coeficientes de difusão e o termo de contra gradiente devem ser ainda parametrizados

Para o coeficiente de difusão as parametrizações podem ser obtidas através de métodos empíricos (Sorbjan, 1989) ou baseados em uma teoria semi-empírica, como a teoria da similaridade de Monin Obukov (Panchev, 1985), a teoria estatística da turbulência de Taylor (Taylor, 1921; Degrazia e Moraes, 1992; Degrazia et al., 2000), simulação de grandes vórtices (Holtslag e Moeng, 1991), entre outras. Por outro lado, o termo de contra gradiente é descrito em diversos artigos na literatura (Deardorff, 1966; Holtslag e Boville, 1993; Cuijpers e Holtslag, 1998). Adicionalmente, uma técnica de PI pode também ser empregada para estudar as propriedades do transporte e difusão turbulenta (Campos Velho et al., 2000; Lodovici et al., 1991).

Um dos objetivos deste estudo é estimar os coeficientes de difusão turbulenta para condições de atmosfera convectiva e neutra através do uso de uma técnica de PI apresentada por Campos Velho et al. (2000). Uma inovação descrita no presente trabalho é a estimação do termo de contra-gradiente utilizando a metodologia de PI. Além disso, a metodologia é desenvolvida para o estudo em problemas de poluição atmosférica. Particularmente, conhecer fonte(s) de contaminante na baixa atmosfera (inventário de fontes) é um problema difícil e de grande importância prática.

A determinação de fontes poluidoras é algo relevante e, em alguns casos, de interesse internacional. No episódio da explosão da usina nuclear de Chernobyl em 1986, desejava-se descobrir como a pluma radioativa iria se dispersar. A questão relevante é conhecer a intensidade de material radioativo liberado para a atmosfera durante o acidente. No caso dos gases do efeito estufa, poder-se-ia desejar estimar como os continentes e oceanos contribuem gerando ou absorvendo gases, como o gás carbônico (CO₂), metano, óxido nítrico, clorofluorcarbonetos, e outros. Para que se possa conhecer os Países que mais contribuem para a emissão destes gases, metodologias de PI podem ser aplicadas. Há hoje no mundo uma tentativa de reduzir ou reverter a tendência de aumento das emissões dos gases do efeito estufa, este é o foco das propostas contidas no Tratado de Quioto (segundo o qual os países industrializados reduziram suas emissões combinadas de gases de efeito estufa em pelo menos 5% – em relação aos níveis de 1990 – até o período entre 2008 e 2012). O mapeamento das fontes e sumidouros de gases ligados ao efeito estufa e a metodologia de cálculo é matéria importante e potencialmente controversa.

A metodologia de problema inverso é uma maneira eficiente de se estimar cientificamente a intensidade de fontes poluidoras. Neste sentido, diversas metodologias de problema inverso vêm sendo investigadas pela comunidade científica internacional (Kasibhatla et al., 2000; Enting, 2002; Seibert, 2001). Além de inventário de fontes industriais, o ciclo biogeoquímico do CO₂ tem recebido especial atenção devido ao aumento sistemático da sua concentração na atmosfera (Projeto TRASCOM). De 160.000 A.C. até o final do século XIX, sua concentração na atmosfera oscilou entre 200 e 280 ppm (partes por milhão de ar seco) (Sarmiento & Gruber, 2002). A partir da revolução industrial (final do século XIX), a matriz energética mundial passou a utilizar o combustível fóssil para a obtenção da energia necessária para a sustentação da vida contemporânea. Como resultado, o material orgânico das reservas geológicas vem sendo extraído e queimado, produzindo quantidades cada vez maiores de CO₂, até atingirmos os valores observados atualmente de aproximadamente 370 ppm. Assim, durante o último século, a concentração de CO₂ na atmosfera aumentou em torno de 1 ppm por ano. Previsões dão conta de que no final deste século, a concentração de CO₂ na atmosfera deve alcançar valores entre 600 e 800 ppm, que é mais de duas vezes os níveis pré-industriais (Cox et al. 2000). O CO₂ é um importante regulador do balanço de energia no sistema terra-atmosfera, por ser um bom absorvedor e emissor de ondas longas (4,28 – 3,90 μ m), assim um desequilíbrio neste sistema pode acarretar em sérias mudanças climáticas globais.

Aproximadamente 760 GtC (Gigatonelada de Carbono ou 760×10^{12} kg) existem na atmosfera terrestre. As emissões de CO₂ provenientes das atividades de queima de combustíveis fósseis têm contribuído para um aumento de 5 GtC por ano. O desmatamento tem contribuído com uma adição na atmosfera de 2 GtC por ano. Entretanto, o crescimento estimado na massa de CO₂ é de 3Gt por ano, portanto acredita-se que em torno de 4GtC estão sendo acumulados em alguma parte do Planeta (oceanos ou superfície). Este sumidouro natural tem “seqüestrado” cerca da metade do CO₂ emitido pela queima de combustíveis fósseis no último século (Schlesinger, 1991). Todavia, até agora sabe-se muito pouco sobre estes sumidouros. Nos falta conhecer onde estão localizados, como eles seqüestram o CO₂, por quanto tempo eles ainda continuarão a remoção e ainda, se há algo que podemos fazer para que estes sumidouros removam CO₂ de forma mais eficiente e por mais tempo.

Os problemas inversos são caracterizados como problemas matematicamente mal postos, pois não asseguram existência, unicidade e estabilidade da solução (Tikhonov e Arsenin, 1977; Tarantola, 1988). O mal condicionamento de problemas inversos está no fato de que os autovalores associados ao modelo matemático direto podem apresentar alguns valores nulos ou quase nulos, o que torna a inversão direta difícil ou matematicamente inviável. A presença de ruídos e/ou erros de modelagem acentuam a natureza mal condicionada do operador matemático inverso. Portanto, mal condicionamento é um problema intrínseco do Problema Inverso. A presença de ruído nos dados experimentais torna a inversão instável, levando a soluções que se traduzem por oscilações espúrias (muitas vezes não físicas) nos parâmetros estimados. A fim de tornar o problema bem posto inúmeras técnicas de regularização têm sido desenvolvidas destinadas a produzir soluções suaves (Tikhonov e Arsenin, 1977; Ramos et al., 1999).

A adoção de um modelo de transporte e difusão Euleriano ou Lagrangeano constitui a base do que se convencionou problema direto em física da atmosfera. Nestas condições pode-se dizer que dadas as causas (posição e intensidade das fontes/sumidouro, propriedade do escoamento e do domínio físico) acham-se os efeitos (campo de concentração) através das equações associadas a cada metodologia. Uma vez que o problema direto esteja estabelecido na descrição da dispersão de poluentes e sendo conhecidas as concentração de contaminantes em sensores observacionais, pode-se descrever como incógnitas alguns parâmetros atmosféricos (parâmetros turbulentos ou não), ou mesmo as fontes poluidoras envolvidas no problema. A determinação destas quantidades constituirá o problema inverso em física da atmosfera e poluição do ar.

A técnica de problema inverso utilizado nesta tese foi formulada como um problema de otimização, onde a função objetivo é a norma-2 da diferença entre dados de concentração medidos/observados e dados de um modelo matemático, associados a um operador de regularização. O problema de otimização foi resolvido por técnicas determinísticas (método Quase-Newton e Levenberg-Marquardt) e estocástica (recozimento simulado - *Simulated Annealing*). Para a estimação de parâmetros atmosféricos o procedimento utilizado faz uso de uma inversão implícita, onde em cada iteração do método de otimização o modelo direto (Eureliano) é reajustado para a avaliação da concentração com o novo vetor de parâmetros. Na estimação do termo de fonte, o procedimento de inversão utiliza-se do modelo fonte-receptor (Lagrangeano). Neste modelo a concentração é obtida através do produto de uma matriz de transição (contendo todos os parâmetros atmosféricos) e o termo de fonte.

No Capítulo 2 apresentaremos a descrição dos modelos matemáticos de transporte e dispersão (modelos diretos) e de uma parametrização da turbulência baseada na teoria estatística de Taylor, além de uma nova aproximação para o termo de contra gradiente. Uma descrição da teoria de problemas inversos com o método de regularização e alguns algoritmos de otimização são descritos no Capítulo 3. A metodologia de problema inverso é aplicada na estimação de parâmetros turbulentos (coeficiente de difusão e termo de contra-gradiente) no Capítulo 4, com o uso do procedimento implícito. Resultados da estimação do termo de fonte em vários cenários físicos são apresentados no Capítulo 5, onde o procedimento de inversão utiliza o modelo fonte-receptor. O Capítulo 6 é endereçado as conclusões do trabalho e sugestões de trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

PROBLEMA DIRETO EM POLUIÇÃO ATMOSFÉRICA

2.1 Modelo Euleriano

O transporte euleriano de um contaminante (um escalar passivo) na atmosfera pode ser obtido a partir da equação que descreve o princípio da conservação de massa. A expressão para esta aproximação, considerando um fluido incompressível, é (usando a notação de Einstein):

$$\frac{\partial c(\vec{x}, t)}{\partial t} + u_i \frac{\partial c(\vec{x}, t)}{\partial x_i} = v_c \frac{\partial^2 c(\vec{x}, t)}{\partial x_i^2} + S, \quad (2.1)$$

onde $c(\vec{x}, t)$ é a concentração na posição \vec{x} no tempo t ; u_i é a velocidade do vento (u, v, w para $i = 1, 2, 3$ respectivamente); x_i são os componentes do vetor posição \vec{x} (x, y, z para $i = 1, 2, 3$ respectivamente) e v_c é a difusividade molecular do contaminante. O segundo termo do lado esquerdo da eq. (2.1) representa a advecção do contaminante pelo vento e o primeiro termo do lado direito representa a difusão molecular. S é o termo de fonte ou remoção da concentração em relação a outros processos não presentes na eq. (2.1), como por exemplo, reações químicas.

A eq. (2.1) é uma equação Euleriana porque descreve a concentração de um contaminante $c(\vec{x}, t)$ em um dado ponto fixo no espaço, como uma função de valores locais de u_i e S (Longhetto 1978). Numa aproximação Lagrangeana, $c(\vec{x}, t)$ não está relacionado à velocidade em um ponto fixo, mas à velocidade da partícula que se move com o fluido (Longhetto, 1978).

A velocidade do fluido que é usado na eq. (2.1), u_i , precisa satisfazer a equação dinâmica do movimento (equação de Navier-Stokes). Na baixa atmosfera o fluxo é turbulento, o que torna impossível a solução analítica da equação do movimento. A solução pode representar a velocidade u_i como a soma de uma componente média, U_i , e uma flutuação, u_i' ,

$$u_i = U_i + u_i'. \quad (2.2a)$$

A mesma representação pode ser usada para a concentração:

$$c(\bar{\mathbf{x}}, t) = C(\bar{\mathbf{x}}, t) + c'. \quad (2.2b)$$

Substituindo as eqs. (2.2a) e (2.2b) em (2.1) e tomando a média sobre *ensemble*, temos:

$$\frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial t} = -U_i \frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_i} - \frac{\partial(\overline{u_i' c'})}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_i^2} + \bar{S}. \quad (2.3)$$

O segundo termo do lado direito da eq. (2.3) introduz três novos termos desconhecidos:

$\frac{\partial(\overline{u_i' c'})}{\partial x}$, $\frac{\partial(\overline{v_i' c'})}{\partial y}$, $\frac{\partial(\overline{w_i' c'})}{\partial z}$. A quantidade $\overline{(u_i' c')}$ é o fluxo turbulento do contaminante

denominado também de correlação dupla ou segundo momento estatístico. Para eliminar este problema pode-se derivar uma equação para $\overline{(u_i' c')}$ a partir da eq. (2.3) (Stull, 1988).

Infelizmente, esta nova equação contém uma correlação tripla (terceiro momento) adicional

$\overline{(u_i' u_j' c')}$. Como pode-se esperar, escrevendo uma equação para o terceiro momento, tem-se

um termo de quarta ordem associado e assim por diante. Uma forma de fechamento da eq.

(2.3) é dada pela conhecida teoria-K ou teoria do transporte por gradiente. Nesta

aproximação, o fluxo turbulento de uma propriedade, num ponto do espaço, pode ser

considerado proporcional ao gradiente local da propriedade em transferência. Os coeficientes

de difusão, K_{ij} , são positivos por definição, pois assume-se que o transporte ocorre no sentido

contrário ao gradiente (de forma a desaparecer esse gradiente).

$$\overline{u'_i c'} = -K_{ij} \left(\frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_j} \right) \quad (2.4)$$

Substituindo-se a eq. (2.3) na eq. (2.4), uma nova equação pode ser escrita assumindo-se:

(a) $K_{ij} = 0$ se $i \neq j$;

(b) difusão molecular muito menor que a difusão turbulenta ($\nu \approx 1,5 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ para o ar);

(c) contaminante é um escalar passivo ($\bar{S} = S$).

$$\frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial t} = -U_i \frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ii} \frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_i} \right) + S \quad (2.5)$$

A eq. (2.5) pode ser integrada analiticamente ou numericamente, bastando para tanto valores de U_i , K_{ii} e S , juntamente com condições iniciais e de contorno para $C(\bar{\mathbf{x}}, t)$.

A principal dificuldade na utilização deste tipo de modelo (baseado na eq. (2.5)) é a determinação dos coeficientes de difusão K_{ii} . Além disso, numa atmosfera real, existem ocasiões em que o transporte pode ser contrário ao transporte por gradiente, isto é, contra o gradiente. O principal exemplo é a Camada Limite Convectiva (CLC). A região intermediária da CLC é neutra com temperatura potencial constante, portanto o seu gradiente é nulo, o que à luz desta teoria, implicaria um fluxo turbulento nulo, ou valores de K infinitos. Por outro lado, a camada superior da CLC (próximo à zona de entranhamento) é ligeiramente estável e o fluxo turbulento é positivo, o que resultaria em valores negativos de K . Esta região mostra a existência de transporte vertical no sentido do gradiente e que é intrinsecamente contraditório à teoria- K . Este transporte é uma evidência de transporte não-local, que é efetuado pelas correntes ascendentes ou termas de dimensão da própria CLC e levou ao aparecimento de várias teorias entre as quais as não-locais, denominadas contra-gradiente. Sob estas condições, o fluxo turbulento do contaminante pode ser expresso por:

$$\overline{u'_i c'} = -K_{ij} \left(\frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_j} - \gamma_j \right), \quad \text{com} \quad \gamma_i = \begin{cases} \gamma_z & i = 3 \\ 0 & i \neq 3 \end{cases} \quad (2.6)$$

onde γ_i são as componentes do termo de contra-gradiente. Para tanto, a eq. (2.5) é escrita como:

$$\frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial t} = -U_i \frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ii} \frac{\partial C(\bar{\mathbf{x}}, t)}{\partial x_i} - \gamma_i \right) + S \quad (2.7)$$

2.1.1 Modelo Euleriano Unidimensional

Nesta tese utilizaremos um modelo euleriano unidimensional (vertical), dado pela eq. (2.7). Neste modelo, despreza-se o primeiro termo da eq. (2.7) (termo que representa a advecção pelo vento médio) e estuda-se a difusão vertical de uma fonte de área instantânea (o termo de fonte, S , não existe):

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz}(z) \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} - \gamma \right), \quad (2.8)$$

assumindo-se $\gamma = \gamma_z$ e K_{zz} como uma função da posição ($K_{zz}(z)$). A discretização numérica para a resolução da eq. (2.8) é feita através do método das diferenças finitas, centrado no espaço e o método de Euler explícito no tempo (usando $C(z, t) = C$ e $K_{zz}(z) = K$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &\cong \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + O(\Delta t) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial C}{\partial z} - \gamma \right) &\cong \left[K_{i+1/2} \left(\frac{C_{i+1}^n - C_i^n}{\Delta z} - \gamma_{i+1/2} \right) - K_{i-1/2} \left(\frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta z} - \gamma_{i-1/2} \right) \right] \frac{1}{\Delta z} \\ &\quad + O(\Delta z^2) \end{aligned}$$

onde os sub-índices n e i representam a discretização no tempo e no espaço, respectivamente. A estabilidade numérica do método é garantida se:

$$0 \leq \frac{\max[K_{zz}(z)]\Delta t}{\Delta z^2} \leq \frac{1}{2}$$

A condição de contorno representa o fluxo turbulento, eq. (2.4), nulo no solo e no topo da Camada Limite Planetária, o que implica em:

$$\frac{\partial C}{\partial z} \cong \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z} + O(\Delta z^2) = 0 \quad \text{para} \quad z = 0 \quad \text{e} \quad z = h, \quad (2.9a)$$

e como condição inicial, a concentração do contaminante, em unidades de $[\text{kgm}^{-1}]$ é máxima no centro da Camada Limite e diminui linearmente a zero no topo da camada e no solo:

$$C(z,0) = \begin{cases} a z & \text{se } 0 < z \leq h/2 \\ b - a z & \text{se } h/2 < z < h \end{cases} \quad (2.9b)$$

para uma Camada Limite Planetária com altura de $h=100\text{m}$, $a = 0,1 \text{ kgm}^{-2}$ e $b = 100 \text{ kgm}^{-2}$.

Este modelo, será utilizado na Seção 2.3 para o teste do desempenho de uma formulação para o termo de contra-gradiente e no Capítulo 4 como modelo direto para a estimação do termo de contra-gradiente γ e da difusividade turbulenta vertical K_{zz} .

2.2 Modelo Lagrangeano

Na modelagem lagrangeana, a abordagem estatística implica na necessidade de se determinarem as funções densidade de probabilidades (FDP) associadas à distribuição espacial das parcelas de fluido que compõem o escoamento turbulento. A expressão geral para a evolução espacial e temporal da concentração média de um contaminante em uma parcela de fluido, $C(\bar{\mathbf{x}}, t)$, pode ser escrita como:

$$C(\bar{\mathbf{x}}, t) = \int_{-\infty}^t S(\bar{\mathbf{x}}_0, t_0) P(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0) d\bar{\mathbf{x}}_0 dt_0 \quad (2.10)$$

onde $P(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0)$ representa a FDP da parcela de fluido que está na posição $\bar{\mathbf{x}}_0$, no instante t_0 , vir a ocupar a posição $\bar{\mathbf{x}}$ no instante t . $S(\bar{\mathbf{x}}_0, t_0)$ representa uma função que descreve a

distribuição espacial e temporal da fonte em termos da massa do poluente, por unidade de volume, entre as posições $\bar{\mathbf{x}}$ e $\bar{\mathbf{x}}_0$ e os instantes t e t_0 (Seinfeld, 1986; Zannetti, 1990).

O parâmetro chave na Eq. (2.10) é a FDP, $P(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0)$. Este parâmetro pode ser estimado numericamente, mediante a determinação da trajetória de um conjunto suficientemente grande de partículas contidas no escoamento (Zannetti, 1990; Baldochi, 1992). Uma forma de se estimar essas trajetórias é utilizando-se de um modelo lagrangeano de partículas baseado na equação de Langevin. Nesta equação, o movimento das partículas em um escoamento turbulento é descrito de forma análoga ao movimento browniano. Essa analogia permite tratar a aceleração sofrida por uma partícula como a soma de acelerações do tipo determinística e aleatória.

Os modelos de partículas usam um certo número de partículas computacionais (fictícias) para descrever a dinâmica da atmosfera. As partículas fictícias permitem compreender os processos físicos que atuam nas partículas reais.

Tanto num modelo Lagrangeano quanto num modelo Euleriano, a relação entre fonte e concentração no sensor pode ser calculada de duas diferentes formas em relação à integração temporal: avançado ou *forward* e regressivo ou *backward*. Num modelo Lagrangeano, a integração avançada é feita com a emissão das partículas a partir do volume da fonte e as trajetórias são calculadas do tempo t_0 até o tempo t , enquanto que numa integração regressiva as partículas são emitidas do volume do sensor e as trajetórias são calculadas a partir do tempo t para o tempo t_0 . A Figura 2.1 ilustra estas duas integrações quanto às trajetórias das partículas.

Em algumas situações práticas, uma ou outra formulação pode apresentar vantagens. Em geral, um modelo Lagrangeano avançado é bastante custoso computacionalmente. Por exemplo, considere uma extensa fonte de área que emite um contaminante; apenas as partículas que passarem por um volume de sensor, V_s , ($V_s > 0$, um volume em que possam ser, estatisticamente, encontradas as partículas), estarão contribuindo para o cálculo da concentração neste sensor e todas as outras são desprezadas. No entanto, um número bastante grande de partículas deve ser emitido pelo modelo para que o cálculo da concentração no sensor seja estatisticamente correta. Numa integração regressiva, um número muito menor de partículas pode ser emitido a partir do volume do sensor, que pode ter volume infinitesimal (ou bastante próximo do volume de um sensor real) sendo que apenas as partículas que tocarem a área da fonte contribuirão para o cálculo da concentração no sensor.

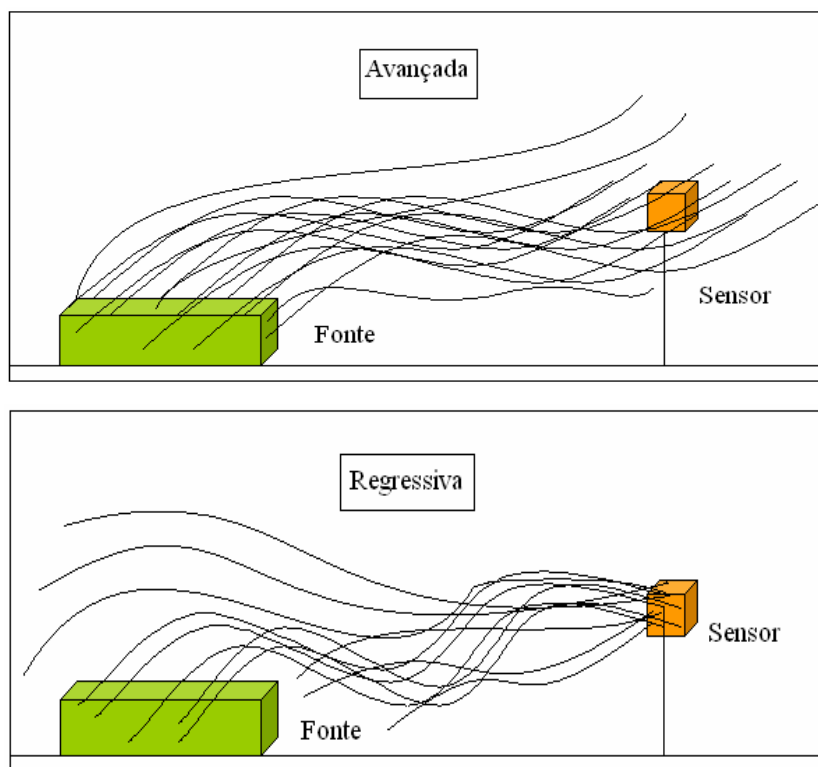


Figura 2.1 – Ilustração das trajetórias de partículas nas integrações avançada e regressiva.

Flesch et al. (1996) utilizaram a integração regressiva em modelagem Lagrangeana como ferramenta para determinar características (“pegadas” ou *footprint*) de medidas de fluxo micrometeorológicos. A modelagem *footprint*, incluindo a metodologia regressiva, tem se estabelecido no campo da micrometeorologia para a interpretação de fluxos e quantidades escalares e no planejamento de medidas (Schimid, 2002; Khjun et al. 2003)

Nas seções 2.2.1 e 2.2.2 apresentam-se uma breve descrição teórica das aproximações avançada e regressiva, respectivamente, num modelo de partículas lagrangeano tridimensional, conforme a derivação de Thomson (1987), descrita em Flesch et al. (1995). O modelo numérico de partículas Lagrangeano LAMBDA (baseado em Thomson, 1987), é apresentado na Seção 2.2.3 e na Seção 2.5.1 faz-se uma comparação entre as aproximações avançada e regressiva no cálculo da concentração com o modelo LAMBDA.

2.2.1 Modelo de Partículas Lagrangeano Avançado

Como já mencionado, um modelo de partículas lagrangeano utiliza a equação de Langevin para o cálculo da velocidade da partícula. Numa forma tridimensional, a velocidade e a posição de cada partícula são descritas da seguinte forma:

$$du_i = a_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)dt + b_{i,j}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)dW_j(t) \quad (2.11a)$$

e

$$dx_i = (U_i + u_i)dt, \quad (2.11b)$$

onde $i, j = 1, 2, 3$, $\bar{\mathbf{x}}$ é o vetor deslocamento, U_i é a velocidade do vento médio, $\bar{\mathbf{u}}$ é o vetor velocidade Lagrangeano, $a_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$ é um coeficiente associado ao arraste viscoso da partícula, $b_{ij}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$ representa a difusão turbulenta e $dW_j(t)$ é o processo Wiener, um incremento aleatório de uma distribuição Gaussiana tendo média zero e variância dt .

O primeiro termo do lado direito da eq. (2.11a) é um termo determinístico e representa a medida da “perda de memória” da velocidade no tempo. O segundo termo é estocástico e representa as acelerações aleatórias devidas as flutuações de pressão e modela um processo de Markov, no qual o passado e o futuro são estatisticamente independente quando o presente é conhecido (Rodean, 1996). Tendo-se uma descrição de $a_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$ e $b_{ij}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$, a trajetória das partículas é calculada através da eq. (2.11b).

Thomson (1987) estabeleceu alguns critérios para a seleção de modelos de trajetórias de partículas. O principal critério para que um modelo de partículas seja representativo da realidade física é a boa mistura ou *well-mixed*, ou seja, se a distribuição das partículas de um contaminante é inicialmente uniforme, em um escoamento turbulento, permanecerá desta maneira. O critério da boa mistura é satisfeito considerando que a função densidade de probabilidade da velocidade euleriana (FDP), $P_E(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$, satisfaça a equação de Fokker-Planck correspondente ao sistema (2.11):

$$\frac{\partial P_E}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i P_E) - \frac{\partial}{\partial u_i}(a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j}(B_{i,j} P_E) \quad (2.12)$$

onde $B_{i,j} = \frac{1}{2} b_{i,k} b_{j,k}$ e $P_E = P_E(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$. Os termos do lado direito representam a advecção, a convecção e a difusão, respectivamente.

Um segundo critério requer que o modelo de partículas forneça resultados corretos no subintervalo inercial. Desta forma, o coeficiente $b_{i,j}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$ é determinado comparando-se a função estrutura da velocidade Lagrangeana, derivada da eq. (2.11a),

$$\overline{(du_i)^2} = 2 \overline{B_{i,j}} dt, \quad (2.13)$$

com aquela determinada de acordo com a teoria de Kolmogorov de isotropia local no subintervalo inercial (Rodean 1996):

$$\overline{(du_i)^2} = \delta_{ij} C_0 \varepsilon dt. \quad (2.14)$$

Substituindo eq. (2.14) na eq. (2.13), obtém-se:

$$B_{i,j} = \delta_{ij} \frac{C_0 \varepsilon}{2}, \quad (2.15)$$

onde C_0 é a constante de Kolmogorov e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. Também é possível escrever a expressão para o coeficiente $b_{i,j}$, eq. (2.15), em função da escala de decorrelação Lagrangeana τ_L :

$$b_{i,j} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \varepsilon} = \delta_{ij} \sqrt{\frac{2\sigma_i^2}{\tau_{Li}}}, \quad (2.16)$$

onde σ_i^2 é a variância das flutuações de velocidade. Esta expressão é consistente com a teoria do subintervalo inercial.

Uma expressão para o coeficiente determinístico, $a_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$, pode ser obtido da eq. (2.12):

$$a_i P_E = \frac{\partial}{\partial u_j} (B_{i,j} P_E) + \phi_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t) \quad (2.17a)$$

sendo,

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P_E) \quad (2.17b)$$

e

$$\phi_i \rightarrow 0 \text{ quando } \bar{\mathbf{u}} \rightarrow \infty. \quad (2.17c)$$

Segundo Thomson (1987), o sistema (2.17) não apresenta uma solução única para modelos multidimensionais. No entanto, uma solução particular pode ser assumida considerando que a FDP é uma Gaussiana. O coeficiente determinístico a_i é obtido a partir da equação (2.17a) como:

$$a_i = -B_{i,j} V_{i,k}^{-1} (u_k - U_k) + \frac{\phi_i}{P_E}, \quad (2.18)$$

$$V_{i,k} = \langle (u_i - U_i)(u_k - U_k) \rangle$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i}{P_E} &= \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_{i,j}}{\partial x_j} \\ &+ \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{(\mathbf{V}^{-1})_{i,m}}{2} \left(\frac{\partial V_{j,m}}{\partial t} + U_k \frac{\partial V_{j,m}}{\partial x_k} \right) \right] (u_j - U_j) \\ &+ \frac{1}{2} (\mathbf{V}^{-1})_{i,m} \frac{\partial V_{k,m}}{\partial x_j} (u_j - U_j)(u_k - U_k). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Este modelo pode ser aplicado fisicamente em situações de turbulência estacionária, homogênea e distribuição de velocidade Gaussiana. Esta situação ocorre geralmente na direção horizontal do fluxo turbulento. Considerando-se que a turbulência não-homogênea ocorre apenas na direção vertical, Thomson (1987) obteve uma solução para $a(z, w)$ usando uma FDP não-Gaussiana ou assimétrica no sistema (2.17). As FDPs não-Gaussianas mais utilizadas são a bi-Gaussiana (Baerentsen & Berkowicz, 1984) e a Gram-Charlier de terceira ou quarta ordem (Anfossi et al. 1996; Ferrero & Anfossi 1998b).

Nesta tese, usa-se a FDP não-Gaussiana dada pela função Gram-Charlier truncada na terceira ordem. A expressão para esta FDP é a seguinte (Kendall & Stuart, 1977):

$$P_E = \frac{e^{-(\chi^2/2)}}{\sqrt{2\pi}}(1 + C_3 H_3) \quad (2.20)$$

onde H_3 é um polinômio de Hermite e C_3 seu coeficiente, cuja expressão é:

$$H_3 = \chi^3 - 3\chi \quad (2.21a)$$

$$C_3 = \frac{\overline{\mu^3}}{6} \quad (2.21b)$$

e $\overline{\mu^3}$ é o momento padronizado de w (velocidade vertical) e $\chi = w/\sigma_w$. No caso de turbulência Gaussiana, a eq. (2.20) reduz-se à distribuição normal (C_3 torna-se nulo). Resolvendo a equação (2.18) para a componente vertical, com P_E dado pela eq. (2.20), a seguinte expressão para o coeficiente determinístico, $a(z, w)$, é obtida (Ferrero & Anfossi, 1998b):

$$a(z, w) = \sigma_w \frac{\frac{1}{\tau_{Li}}(T_1) + \frac{\partial \sigma_w}{\partial z}(T_2)}{T_3} \quad (2.22)$$

onde

$$T_1 = -3C_3 - \chi + 6C_3\chi^2 - C_3\chi^4 \quad (2.23a)$$

$$T_2 = 1 - \chi^2 - 2C_3\chi^3 + C_3\chi^5 \quad (2.23b)$$

$$T_3 = 1 - 3C_3\chi + C_3\chi^3 \quad (2.23c)$$

2.2.2 O Modelo de Partículas Lagrangeano Regressivo

Conforme apresentado por Flesch et al. (1995), suponhamos dois observadores O e O' ; o observador O segue a trajetória de partículas usando as coordenadas $(\bar{\mathbf{x}}, t)$ e vê a velocidade das partículas como $u_i = dx_i / dt$. O observador O' segue as mesmas partículas nas mesmas coordenadas de posições $\bar{\mathbf{x}}$ que o observador O , mas usa a coordenada temporal $t' = t_0 - t$, onde t_0 é uma constante de transformação arbitrária. A velocidade da partícula de acordo com O' é:

$$u'_i = \frac{dx_i}{dt'} = \frac{dx_i}{-dt} = -u \quad (2.24)$$

A equação para a velocidade e deslocamento da partícula associada ao sistema de coordenadas $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}', t')$

$$du'_i = a'_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}', t') dt' + b'_{i,j}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}', t') dW_j(t) \quad (2.25a)$$

$$dx'_i = u'_i dt'. \quad (2.25b)$$

Como na eq. (2.11a), o problema aqui é determinar os coeficientes $a'_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}', t')$ e $b'_{i,j}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}', t')$.

Considera-se a probabilidade de um contaminante viajando entre $\bar{\mathbf{x}}_1$ e $\bar{\mathbf{x}}_2$. O observador O vê uma densidade de probabilidade condicional $P^a(\bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{u}}_2, t_2 | \bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{u}}_1, t_1)$, que é a probabilidade da partícula, movendo-se de forma avançada de $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{u}}_1)$ no tempo t_1 , ser encontrada em $(\bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{u}}_2)$, no tempo t_2 ($t_2 > t_1$). O observador O' vê o mesmo evento mas escreve $P^r(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{u}}_1, t'_1 | \bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{u}}_2, t'_2)$ para partículas movendo-se de forma regressiva de $(\bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{u}}_2, t'_2)$ para $(\bar{\mathbf{x}}_1, \bar{\mathbf{u}}_1, t'_1)$. A evolução de P^r com t'_1 (para os valores fixos de $(\bar{\mathbf{x}}_2, \bar{\mathbf{u}}_2, t'_2)$) é dada pela equação de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial}{\partial t'} P^r = -\frac{\partial}{\partial x_{1,i}} \left(u'_{1,i} P^r \right) - \frac{\partial}{\partial u'_{1,i}} (a'_i P^r) + \frac{\partial^2}{\partial u'_{1,i} \partial u'_{1,j}} \left(B'_{i,j} P^r \right) \quad (2.26)$$

Uma equação similar a de Fokker-Planck é válida para a função densidade de probabilidade incondicional de distribuição do contaminante no espaço de fase $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}})$, $P_E'(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}', t')$ (Gardiner, 1985):

$$\frac{\partial}{\partial t'} P_E' = -\frac{\partial}{\partial x'_i} (u'_i P_E') - \frac{\partial}{\partial u'_i} (a'_i P_E') + \frac{\partial^2}{\partial u'_i \partial u'_j} (B'_{i,j} P_E') \quad (2.27)$$

Esta equação pode ser expressa no sistema de coordenada $(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$, notando que $P_E'(\bar{\mathbf{x}}, -\bar{\mathbf{u}}', -t') = P_E(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$, $\bar{\mathbf{u}}' = -\bar{\mathbf{u}}$, $\partial / \partial t' = -\partial / \partial t$, assim:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_E = -\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P_E) - \frac{\partial}{\partial u_i} (a'_i P_E) - \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} (B'_{i,j} P_E) \quad (2.28)$$

onde a'_i e b'_i são calculados em $(\bar{\mathbf{x}}, -\bar{\mathbf{u}}', -t') = (\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}, t)$. Se a'_i e b'_i satisfazem a equação de Fokker-Planck (2.28), o modelo regressivo satisfaz a condição de boa mistura. A eq. (2.28) difere da eq. (2.12) apenas por um sinal no último termo do lado direito. A solução para o coeficiente determinístico a'_i pode ser obtida modificando-se a eq. (2.17a):

$$a'_i P_E = -\frac{\partial}{\partial u_j} (B_{i,j} P_E) + \phi_i(x, u, t) \quad (2.29)$$

O coeficiente a'_i difere de a_i apenas por uma troca de sinais no primeiro termo do lado direito (termo de advecção). Como a magnitude da flutuação da velocidade aleatória de um elemento de fluido deve ser o mesmo para ambos os sistemas de referência temporais, então $b'_{ij} = b_{ij}$ e $B'_{ij} = B_{ij}$.

2.2.3 Cálculo da Concentração com um Modelo Lagrangeano

Integração Avançada

A concentração média de um contaminante na posição $\bar{\mathbf{x}}$ e tempo t , devido a uma fonte com uma taxa de emissão arbitrária S ($\text{kg m}^{-3}\text{s}^{-1}$), pode ser escrita com:

$$C(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^t \int_{-\infty}^{\infty} S(\bar{\mathbf{x}}_0, t_0) P^a(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0) d\bar{\mathbf{x}}_0 dt_0 \quad (2.30)$$

onde $P^a(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0)$ é a densidade de probabilidade de transição avançada, definida de forma que $P^a(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0) d\bar{\mathbf{x}}$ é a probabilidade que um elemento de fluido inicialmente em $(\bar{\mathbf{x}}_0, t_0)$ é encontrada no tempo t e volume $d\bar{\mathbf{x}}$ centrada em $\bar{\mathbf{x}}$. O cálculo de $P^a(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0)$ é uma função do modelo Lagrangeano avançado. Considerando que a taxa da emissão, S , é uniforme no volume da fonte, pode-se escrever:

$$S(\bar{\mathbf{x}}_0, t_0) = SW(\bar{\mathbf{x}}_0) \quad (2.31)$$

onde $W(\bar{\mathbf{x}}_0)$ é uma função de localização adimensional (0 ou 1) que vai a zero fora da fonte. Para uma turbulência estacionária e uma fonte estacionária, a concentração média é independente do tempo e a P^a depende de $t - t_0$, então:

$$C(\bar{\mathbf{x}}, t) = S \int_{t=0}^{\infty} \int_{\bar{\mathbf{x}}_0=-\infty}^{\infty} W(\bar{\mathbf{x}}_0) P^a(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, 0) d\bar{\mathbf{x}}_0 dt \quad (2.32)$$

Em um modelo avançado, o cálculo prático da concentração média é feita sobre um sensor de volume V_s

$$C^v(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{S}{V_s} \int_{V_s} \int_{t=0}^{\infty} \int_{\bar{\mathbf{x}}_0=-\infty}^{\infty} W(\bar{\mathbf{x}}_0) P^a(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, 0) d\bar{\mathbf{x}}_0 dt d\bar{\mathbf{x}} \quad (2.33)$$

A $C^v(\mathbf{x})$ é determinada a partir do cálculo do “tempo de residência” médio das partículas no volume V_s

$$\overline{T^f}(\mathbf{x}, V_s | \mathbf{x}_0) = \int_{V_s} \int_{t=0}^{\infty} P^a(\mathbf{x}', t | \mathbf{x}_0, 0) dt d\mathbf{x}', \quad (2.34)$$

então:

$$C^v(\mathbf{x}) = \frac{S}{V_s} \int_{\mathbf{x}_0=-\infty}^{\infty} W(\mathbf{x}_0) \overline{T^a}(\mathbf{x}, V_s | \mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0 \quad (2.35)$$

considerando que a fonte ocupa um volume V_f , a integral acima fica:

$$C^v(\mathbf{x}) = \frac{S}{V_s} \int_{V_f} \overline{T^a}(\mathbf{x}, V_s | \mathbf{x}_0) d\mathbf{x}_0. \quad (2.36)$$

Na prática, $C^v(\mathbf{x})$ pode ser calculado de uma amostra média de tempos de residência de partículas individuais:

$$C^v(\mathbf{x}) = S \frac{V_f}{V_s} \frac{1}{N_{EVF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \overline{T_i^a}(\mathbf{x}, V_s | V_f) \quad (2.37)$$

onde N_{PVS} é o número de partículas no volume do sensor e N_{EVF} é o número de partículas emitidas a cada passo no tempo a partir do volume da fonte.

Integração Regressiva

Na integração regressiva as partículas são emitidas em (\mathbf{x}, t) e analisadas em (\mathbf{x}_0, t_0) , dando uma estimativa da densidade de probabilidade condicional regressiva no tempo. Sob condições de fluxo incompressível (Lundgren, 1981; Egbert e Baker, 1984), e uma atmosfera com características estacionárias (Flesch et al. 1995), a densidade de probabilidade condicional regressiva, $P^r(\mathbf{x}_0, t_0 | \mathbf{x}, t)$, é a mesma obtida para uma integração avançada:

$$P^r(\bar{\mathbf{x}}_0, t_0 | \bar{\mathbf{x}}, t) = P^a(\bar{\mathbf{x}}, t | \bar{\mathbf{x}}_0, t_0) \quad (2.38)$$

Num modelo avançado, P^a é calculado pela média sobre *ensemble* do tempo de residência no volume de um sensor, V_s , de partículas liberadas do volume de uma fonte, V_f . Num modelo regressivo, um correspondente tempo de residência pode ser expresso pelo tempo gasto no volume da fonte V_f (centrada em $\bar{\mathbf{x}}_0$) por partículas emitidas do volume do sensor, V_s , seguindo regressivamente.

Para a aproximação regressiva, a equação (2.34) pode ser escrita como:

$$\overline{T^r}(\bar{\mathbf{x}}_0, V_f | \bar{\mathbf{x}}) = \int_{V_f} \int_{t=0}^{\infty} P^r(\bar{\mathbf{x}}', t' | \bar{\mathbf{x}}, 0) dt' d\bar{\mathbf{x}}' \quad (2.39)$$

Substituindo-se o tempo de residência regressiva na equação (3.35) temos

$$C^v(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{S}{V_s} \int_{V_s} \overline{T^r}(\bar{\mathbf{x}}_0, V_s | \bar{\mathbf{x}}) d\bar{\mathbf{x}}, \quad (2.40)$$

ou, na prática,

$$C^v(\bar{\mathbf{x}}) = S \frac{1}{N_{EVS}} \sum_{i=1}^{N_{PVF}} \overline{T_i^r}(\bar{\mathbf{x}}_0, V_f | \bar{\mathbf{x}}) \quad (2.41)$$

onde N_{PVF} é o número de partículas no volume da fonte e N_{EVS} é o número de partículas emitidas a partir do volume do sensor.

2.2.3 O Modelo Tridimensional LAMBDA

O modelo de dispersão estocástico Lagrangeano LAMBDA foi desenvolvido para estudar os processos de transporte e difusão de poluentes sobre terreno plano (Ferrero et al. 1995, Ferrero & Anfossi 1998 a-b). Este modelo é baseado na forma tridimensional da Equação de Langevin para a velocidade aleatória, seguindo a derivação de Thomson (1987). A aproximação avançada no tempo tem sido alvo de vários estudos, produzindo resultados

satisfatórios na simulação de campos de concentração de experimentos reais (Ferrero et al. 1995, Ferrero & Anfossi 1998 a-b, Ferrero et al. 2000; Carvalho et al. 2002). Com o modelo LAMBDA é possível estudar a dispersão de poluentes inertes em condições complexas (caracterizadas pela não-homogeneidade das variáveis que determinam a difusão), emitidos de qualquer tipo de fonte: pontual (chaminé), área (cidade) e linha (auto-estrada).

As equações básicas resolvidas pelo modelo LAMBDA (avanzado no tempo) são as equações do Modelo de Langevin (equações 2.11). A discretização destas equações é dada por:

$$(u_i)_{n+1} = (u_i)_n + (a_i)_n \Delta t + (b_{ij})_n (\Delta W_j)_n \quad (2.42a)$$

e

$$(x_i)_{n+1} = (x_i)_n + (U_i + u_i)_{n+1} \Delta t, \quad (2.42b)$$

onde o índice n representa o n -ésimo passo no tempo. A eq. (2.42a) é discretizada com o esquema de Euler explícito e a eq. (2.42b) com um esquema implícito. Flesch et al. 1995 mostraram que o esquema implícito utilizado na eq. (2.42b) gera melhores resultados em termos da precisão da integração que a aproximação explícita.

No modelo LAMBDA, estão implementadas diferentes sub-rotinas em que é possível escolher a FDP a ser utilizada, o esquema de reflexão das partículas que tocam o solo ou o topo da camada limite e ainda há a opção de *pluma rise*. No entanto, a rotina que prevê a integração regressiva ainda não havia sido implementada, sendo essa nossa contribuição no modelo direto.

Como já foi mencionado, o modelo de partículas usa um certo número de partículas computacionais (partículas fictícias), para simular os movimentos atmosféricos provados por elementos de fluido ou contaminantes liberados na atmosfera. No modelo LAMBDA, um catálogo das posições das partículas é gerado. Com o auxílio das eq. (2.37) e (2.41), para a implementação avançada e regressiva, respectivamente, a concentração do contaminante é calculada num sensor. De forma prática, o cálculo da concentração é feito da seguinte forma para ambas integrações:

Avanzada: as partículas são emitidas a partir da fonte (\vec{x}_0, t_0) e a concentração é calculada em um sensor (\vec{x}, t) . Para tanto, divide-se o domínio em pequenos subdomínios, o subdomínio centrado em \vec{x} , representa o volume de um sensor. A concentração é calculada

através do tempo de residência de cada partícula no volume do sensor. Este tempo de residência é calculado na prática contando-se o número de partículas presentes no subdomínio no intervalo Δt . Da eq. (2.37), temos (redefinindo $C^v(\bar{\mathbf{x}}) = C(\bar{\mathbf{x}})$)

$$C(\bar{\mathbf{x}}) = S \frac{V_f}{V_s} \frac{1}{N_{PEF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \Delta t = S \frac{V_f}{V_s} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS} \quad (2.43)$$

onde N_{PEF} é o número de partículas emitidas da posição da fonte em cada passo no tempo, Δt , N_{PVS} é o número de partículas no sensor, V_s é o volume do sensor e V_f é o volume da fonte. Tendo-se N_s sensores e/ou N_f elementos de fonte, a concentração em cada sensor será calculada da seguinte forma:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} S_i \frac{V_{f,i}}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (2.44)$$

onde C_j é a concentração no j -ésimo sensor, S_i é a i -ésima fonte, $V_{f,i}$ é o volume da i -ésima fonte, $V_{s,j}$ é o volume do j -ésimo sensor, $N_{PEF,i}$ é o número de partículas emitidas da i -ésima fonte e $N_{PVS,i,j}$ é o número de partículas emitidas da i -ésima fonte e que se encontram no j -ésimo sensor.

Pode-se definir uma intensidade de emissão, cuja dimensão é $[\text{kgs}^{-1}]$, da i -ésima fonte como sendo:

$$Q_i = S_i V_{f,i}, \quad (2.45)$$

assim, a eq. (2.44) pode ser reescrita como:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} Q_i \frac{1}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (2.46)$$

Regressiva: as partículas são emitidas a partir da posição do sensor, $\bar{\mathbf{x}}$, no tempo t , e avalia-se aquelas que se encontram na posição da fonte, $\bar{\mathbf{x}}_0$, no tempo t_0 . Na prática, faz-se um

catálogo da posição das partículas e calcula-se o tempo de residência daquelas que se encontram no volume da fonte. O tempo de residência é calculado contando-se o número de partículas que ocupam o volume V_f . Da eq. (2.41) temos (redefinindo $C^v(\bar{\mathbf{x}}) = C(\bar{\mathbf{x}})$)

$$C(\bar{\mathbf{x}}) = S \frac{1}{N_{PES}} \sum_{i=1}^{N_{PVF}} \Delta t = S \frac{\Delta t}{N_{PES}} N_{PVF} \quad (2.47)$$

onde N_{PES} é o número de partículas emitidas a partir do volume do sensor e N_{PVF} número de partículas no volume da fonte. Também nesta integração a concentração pode ser calculada genericamente quando tem-se N_s sensores e/ou N_f elementos de fonte, da seguinte forma:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} S_i \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j} \quad (2.48)$$

onde C_j é a concentração no j -ésimo sensor, S_i é a i -ésima fonte, $N_{PES,j}$ é o número de partículas emitidas do j -ésimo sensor e $N_{PVF,i,j}$ é o número de partículas emitidas do j -ésimo sensor e que se encontram no volume da i -ésima fonte. Definindo-se uma intensidade de emissão, $Q_i = S_i V_{f,i}$, a eq. (2.48) pode ser escrita como:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} \frac{Q_i}{V_{f,i}} \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j} \quad (2.49)$$

Uma comparação entre estas duas formulações no cálculo do campo de concentração será feito na Seção 2.5. Antes, porém, apresentar-se-á uma parametrização para a escala de tempo de decorrelação, τ_{Li} , e a variância da velocidade σ_i^2 .

2.3 Parametrização Da Turbulência

Nesta tese utilizaremos basicamente a parametrização da turbulência (variâncias da velocidade do vento (σ_i^2), escalas de tempo de decorrelação (τ_{Li}) e coeficientes de difusão

(K_i) sugerida por Degrazia et al. (2000). Esta parametrização já foi testada com dados experimentais (Carvalho et al. 2002) e os resultados foram satisfatórios para reproduzir o processo dispersivo turbulento presente numa CLP. Degrazia et al. (2000) derivaram uma parametrização turbulenta a partir da teoria de difusão estatística de Taylor e de propriedades espectrais observadas. A descrição do transporte nesta parametrização levou em conta o efeito dos turbilhões mais energéticos originados por forçantes térmicos e mecânicos. Como consequência, a parametrização fornece valores contínuos para todas as elevações da CLP e abrange todas as condições de estabilidade. A condição para a parametrização contínua, em todas as condições de estabilidades, é garantida pelo fato de que, numa mesma posição não podem coexistir simultaneamente condições estáveis e instáveis. No entanto, efeitos estáveis e neutros podem ocorrer simultaneamente uma vez que, uma turbulência estável é gerada por forçantes mecânicos.

As expressões gerais para o desvio padrão da velocidade do vento (σ_i^2), escala de tempo Lagrangeana (τ_{L_i}) e o coeficiente de difusão (K_i) são:

$$K_i = 0,14 \sqrt{c_i} z \left\{ \frac{\left(\Psi_\varepsilon^c \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left(\frac{-\bar{L}}{z_i} \frac{z_i}{-L} \right)^{1/2} w_*}{[(f_m^*)_i^c]^{4/3}} + \frac{(\phi_\varepsilon^{n+s})^{1/3} u_*}{[(f_m^*)_i^{n+s}]^{4/3}} \right\} \quad (2.50)$$

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06 c_i \left[\Psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{2/3} w_*^2}{[(f_m^*)_i^c]^{2/3}} + \frac{2,32 c_i \left[\phi_\varepsilon^{n+s} \right]^{2/3} u_*^2}{[(f_m^*)_i^{n+s}]^{2/3}}, \quad (2.51)$$

$$\tau_{L_i} = \frac{z}{\sqrt{c_i}} \left\{ \frac{0,14 \left[\frac{-\bar{L}}{h} \frac{h}{-L} \right]^{1/2}}{\left[(f_m^*)_i^c \right]^{2/3} w_* \left[\Psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{1/3}} + \frac{0,059}{\left[(f_m^*)_i^{n+s} \right]^{2/3} \left[\phi_\varepsilon^{n+s} \right]^{1/3} u_*} \right\}, \quad (2.52)$$

onde w_* é a escala de velocidade vertical convectiva, u_* é a velocidade local de fricção, $\psi_\varepsilon^c = \varepsilon h / w_*^3$ e $\phi_\varepsilon^{n+s} = (\varepsilon \kappa z) / u_*^3$, são funções adimensionais das taxas de dissipação, associadas ao empuxo, e a produção mecânica, respectivamente, $(f_m^*)_i^c$ representa o pico de frequência espectral convectivo, $-L/h$ é o parâmetro de estabilidade da camada limite planetária convectiva, h é a altura da CLP, κ é a constante de von Karman e $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi\kappa)^{-2/3}$ com $\alpha_u = 0,5 \pm 0,05$ e $\alpha_i = 1,4; 3,4; 3,0$ para as componentes u , v e w , respectivamente.

Na parametrização, dada pelas eqs. (2.50, 2.51 e 2.52), é necessário ainda expressões para: w_* , u_* , ψ_ε^c , ϕ_ε^{n+s} , $(f_m^*)_i^c$ e $(f_m^*)_i^{n+s}$. Degrazia et al. (2000) sugerem o uso de:

- Na Camada Limite Convectiva:

$$\left(\psi_\varepsilon^c\right)^{2/3} \approx 0,75 \quad (\text{Caughey \& Palmer, 1979; Hojstrup, 1982; Wilson, 1997})$$

$$w_* = (u_*) (-h/\kappa L)^{1/3}$$

$$(f_m^*)_i^c = z / (\lambda_m)_i$$

$$(\lambda_m)_u = (\lambda_m)_v = 1,5z_i \quad (\text{Kaimal et al., 1976; Caughey, 1982; Degrazia \& Anfossi, 1998})$$

$$(\lambda_m)_w \approx \begin{cases} \frac{z}{0,55 - 0,38 \left| \frac{z}{L} \right|}, & 0 \leq z \leq |L| \\ 5,9z, & |L| \leq z \leq 0,1h \\ 1,8h \left[1 - \exp\left(-\frac{z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(-\frac{8z}{h}\right) \right], & 0,1h \leq z \leq h \end{cases}$$

onde $(\lambda_m)_i$ é o pico espectral da velocidade turbulenta do vento

- Para Camada Limite Estável ou Neutra:

$$u_*^2 = (u_*^2)_0 (1 - z/h)^{\alpha_1}$$

$\alpha_1 = 1,7$ para o caso neutro (Wyngaard et al., 1974)

$$(f_m^*)_i^{n+s} = (f_m^*)_i^n \left(1 + 0,03a_i \frac{f_c z}{(u^*)_0} + 3,7 \frac{z}{\Lambda} \right)$$

$$f_c = 10^{-4} s^{-1}$$

$$\Lambda = L(1 - z/h)^{(1,5\alpha_1 - \alpha_2)} \quad (\text{Degrazia \& Moraes, 1992})$$

$\alpha_1 = 1,5$ e $\alpha_2 = 1,0$ para o caso estável (Nieuwstadt, 1984).

$(f_m)_{us}^n = 0,045$, $(f_m)_{vs}^n = 0,16$ e $(f_m)_{ws}^n = 0,33$ (Olesen et al., 1984; Sorbjan, 1989)

$$a_w = 500 \quad (\text{Hanna, 1968; Hanna, 1981})$$

$$a_u = 3889 \text{ e } a_v = 1094$$

onde $(f_m)_{is}^n$ é a frequência do pico espectral na superfície para condições neutras, G é o vento geostrófico, f_c é o parâmetro de Coriolis e Λ é o comprimento local de Monin-Obukhov. Sob condições neutro-instável, o último termo da equação para $(f_m^*)_i^{n+s}$ torna-se nulo e sob condições neutra-estável o termo $1/(f_m^*)_i^c$ vai a zero naquela equação.

Além da parametrização para a variância da velocidade derivada por Degrazia et al. (2000), utilizaremos nesta tese parametrizações dadas por Sorbjan (1989), Holtslag & Moeng (1991) e Degrazia et al. (1997). Reproduziremos aqui apenas as equações para tais parametrizações numa CLC:

- Sorbjan (1989) – SOR89:

$$\sigma_w^2 = 1,08 \left(\frac{z}{h} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{2/3} w_*^2 \quad (2.53)$$

- Holtslag & Moeng (1991) – HM91:

$$(\sigma_w^2)^{3/2} = \left[1,6u_*^2 \left(1 - \frac{z}{h} \right) \right]^{3/2} + 1,2w_*^3 \left(\frac{z}{h} \right) \left(1 - 0,9 \frac{z}{h} \right)^{3/2} \quad (2.54)$$

- Degrazia et al. (1997) – DEA97:

$$\sigma_i^2 = 0,98c_i \left(\frac{\Psi}{(f_m^*)_i^c} \right)^{2/3} \left(\frac{z}{h} \right)^{2/3} w_*^2 \quad (2.55)$$

onde $c_u = 0,3$, $c_v = c_w = 0,4$ e $(f_m^*)_i^c$ é o mesmo de Degrazia et al. (2000)

2.4 Aproximações para o Termo de Contra-Gradiente

Desde que Deardorff (1966) deduziu a contribuição do termo de contra-gradiente em fluxos na CLP, vários trabalhos tem sido realizados com o objetivo de obter uma boa representação para este termo. Aqui apresentaremos algumas aproximações para o termo de contra-gradiente, incluindo uma forma alternativa de cálculo deste.

- Holstlag & Boville (1993) - HB93:

Uma parametrização para os fluxos turbulentos apresentada por HB93 foi comparada com observações de radiossondas. Esta formulação é baseada na aproximação de Troen & Mahrt (1986). Sob condições instáveis o termo de contra-gradiente é expresso como:

$$\gamma_c = 10 \frac{(\overline{w'c'})_0}{w_*h} \quad (2.56)$$

onde $(\overline{w'c'})_0$ é o fluxo superficial. Para a camada superficial os autores sugerem:

$$(\overline{w'c'})_0 = \frac{\kappa u_* z}{\phi_h} \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (2.57)$$

onde $\phi_h = \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{-1/2}$ em $\frac{z}{h} < 0.1$

- Cuijpers & Holtslag (1998) - CH98:

A formulação dada por CH98 parte de uma solução empírica proposta por Holtslag & Moeng (1991), a partir de resultados obtidos através de Simulação dos Grandes Vórtices (LES). Nesta formulação, o termo de contra-gradiente é representado pela equação:

$$\gamma_c = b \frac{w_* c_*}{\sigma_w^2 h} \quad (2.58)$$

sendo, b uma constante de valor 1,5 e c_* é a escala convectiva de uma quantidade genérica média (representada aqui pela concentração de um contaminante)

$$c_* \equiv \frac{1}{hw_*} \int_0^h \overline{w'c'} dz \quad (2.59)$$

Para o cálculo da equação (2.59) é necessária uma avaliação do fluxo turbulento. No entanto, pela equação (2.6), deve-se considerar o termo de contra-gradiente nulo no primeiro passo da integração no tempo, e após, tendo-se uma estimativa do fluxo turbulento, a evolução da concentração média do contaminante pode ser avaliada com o uso do termo de contra-gradiente.

Para evitar o problema de resolver uma equação integro-diferencial associada à integração da parametrização de CH98, uma nova formulação para a escala convectiva c_* é proposta. Na nova formulação, c_* é dado por

$$c_* = \overline{C} = \frac{1}{h} \int_0^h C(z) dz \quad (2.60)$$

A constante b na Eq. (2.58), levando em conta a nova formulação, eq. (2.60), vale 0,07 (Roberti et al. 2004a). Esta nova formulação descreve a escala convectiva da quantidade como sendo o valor médio desta na CLP, evitando com isso recair-se numa equação integro-diferencial. O termo de contra-gradiente expresso por eq. (2.58), onde os parâmetros c_* , como dado por eq. (2.60), e σ_w^2 expresso por eq. (2.55), representa o termo de contra-gradiente, expresso pela teoria de Taylor. Na Figura (2.2) são representadas as diferentes aproximações para o termo de contra-gradiente comentadas nesta Seção onde γ_{CH98} é o termo de contra gradiente sugerido por Cuijpers & Holstlag (1998); γ_{HB93} é a aproximação de

Holstlag & Boville (1993); γ_{DEA97} é o termo de contra-gradiente dado pelas eqs. (2.58), (2.60) e (2.55 - σ_w^2 sugerida por Degrazia et al. (1997)); γ_{SOR89} é o termo de contra-gradiente dado pelas eqs. (2.59), (2.60) e (2.53 - σ_w^2 dado por Sorbjan (1989)).

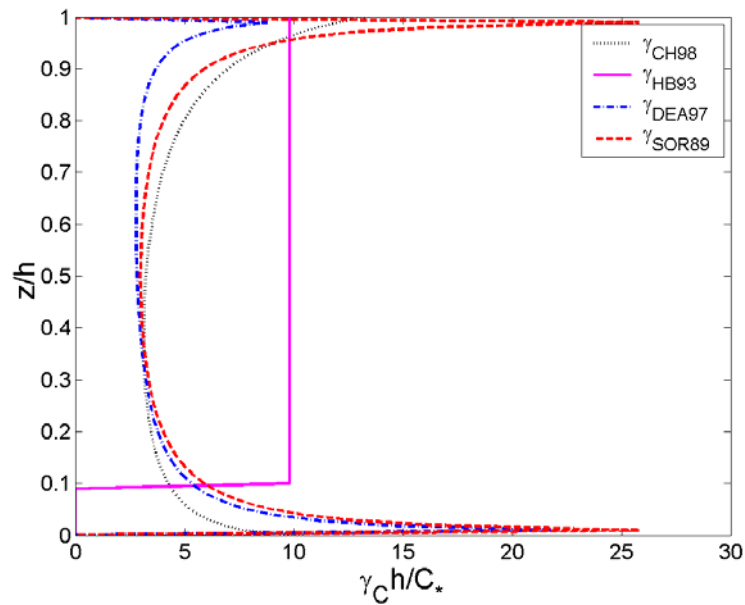


Figura 2.2 - Diferentes aproximações para o termo de contra gradiente adimensional.

2.4.1 Desempenho da Nova Formulação do Termo de Contra-Gradiente

Para verificar o comportamento da nova aproximação do termo de contra-gradiente (dado pelas equações 2.58 e 2.60) foi utilizado o modelo Euleriano Unidimensional dado pela eq. (2.8), com as condições iniciais e de contorno (eqs (2.9a) e (2.9b), respectivamente). O coeficiente de difusão utilizado é aquele apresentado na eq. (2.50) (Degrazia et al., 2000) para o caso convectivo. A altura da CLP foi de $h = 1000$ m, a escala de velocidade convectiva, $w^* = 0,6 \text{ ms}^{-1}$ e a velocidade de fricção, $u^* = 1,8 \text{ ms}^{-1}$. Na implementação numérica, os perfis verticais de $K_{zz}(z)$ e $\gamma(z)$ foram calculados a cada $\Delta z = 10$ m, num total de $N_z = 100$; o passo no tempo foi de $\Delta t = 0,4$ s em $N_t = 5000$ passos.

A Figura 2.3 representa a simulação da difusão atmosférica de um contaminante numa camada limite convectiva com e sem a presença da correção do termo de contra gradiente. O

termo de contra-gradiente utilizado é o dado pela nova formulação (eq. 2.58 e 2.60) com a variância da velocidade calculada por DEA97. Nota-se que, com o uso do termo de contra-gradiente, o contaminante difunde-se mais rapidamente próximo ao topo da CLP, enquanto que próximo ao solo o termo de contra-gradiente retarda a difusão.

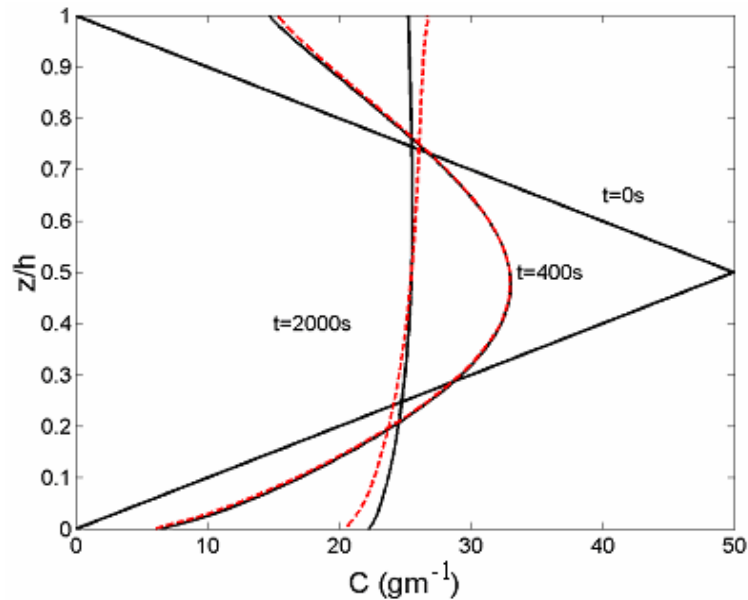


Figura 2.3 - Simulação da difusão para três diferentes passos no tempo $t = 0$ s (condição inicial), $t = 400$ s e $t = 2000$ s. A linha sólida representa a difusão sem o termo de contra-gradiente, a linha pontilhada representa o uso do termo de contra-gradiente, γ_{DEA97} .

Na Figura 2.4, a presença do termo de contra-gradiente na simulação da equação de difusão é representado por duas parametrizações, a nova aproximação e aquela dada por Cuijpers & Holtslag (1998) (eq. 2.58 e 2.59), com a variância da velocidade dada por HM91. É relevante notar que não há diferença significativa entre a concentração calculada com o termo de contra gradiente dado por Cuijpers & Holtslag (1998) e pela nova formulação, mesmo que nesta última, o termo de contra-gradiente tenha uma magnitude maior próximo ao solo e menor próximo ao topo da CLP, comparando-se com o termo de CH98.

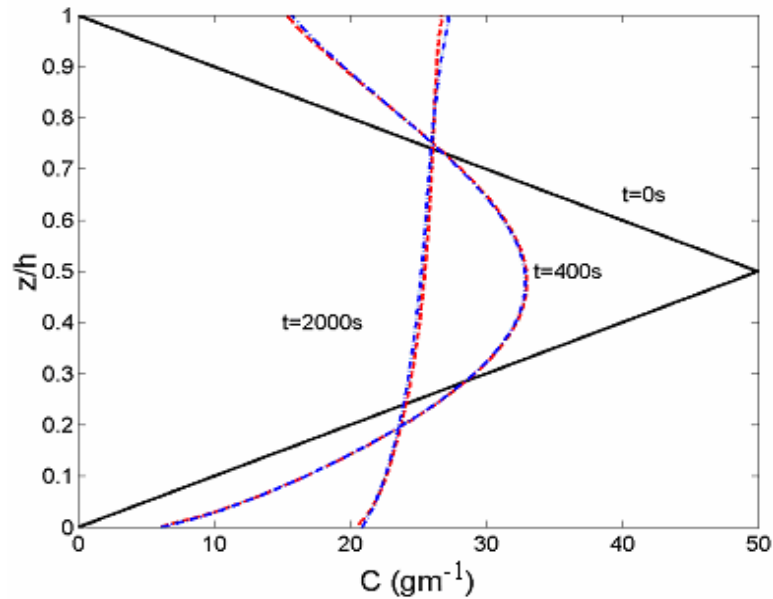


Figura 2.4 - Simulação da difusão para três diferentes passos no tempo $t = 0$ s (condição inicial), $t=400$ s e $t = 2000$ s. A linha sólida representa a difusão do termo de contra-gradiente γ_{DEA97} e a linha pontilhada representa a difusão com o auxílio do termo de contra-gradiente γ_{CH98} .

2.5 - Modelo Fonte-Receptor

Esta formulação não é uma descrição alternativa, como as modelagens discutidas nas Seções 2.1 e 2.2. Todavia, esta é uma maneira que permite reduzir significativamente o custo computacional no cálculo da concentração, pois substitui-se a integração espaço-temporal de equações diferenciais, por um produto matriz-vetor. Esta estratégia é particularmente eficiente, quando o cálculo da concentração é requerido iterativamente, como no caso da determinação de soluções inversas, quando o problema inverso é formulado de maneira implícita, como será abordado no Capítulo 3. Infelizmente, esta metodologia não é universalmente aplicada, pois nem sempre é possível estabelecer uma relação linear, como um produto matriz-vetor, entre a variável medida e a quantidade desconhecida.

Quando a quantidade desconhecida é uma fonte de poluição de N_f elementos emitindo um contaminante, que não sofre reações químicas no processo de transporte atmosférico, uma relação linear entre as N_f fontes e a concentração do contaminante medido em N_s sensores, é descrito por:

$$\vec{C} = \mathbf{M}\vec{S} \quad (2.61)$$

onde \vec{C} é um vetor cujos elementos representam as concentrações médias nos N_s sensores, $\vec{C} = (C_1, C_2, \dots, C_{N_s})$, e os elementos do vetor \vec{S} representam as intensidades das N_f fontes, $\vec{S} = (S_1, S_2, \dots, S_{N_f})$. A matriz \mathbf{M} é uma matriz de transição de estados conhecida como matriz fonte-receptor e seu cálculo é função do modelo de dispersão atmosférico. Embora esta metodologia possa ser usada para qualquer modelo de dispersão, nesta tese, a utilizaremos apenas com o modelo lagrangeano LAMBDA, pois este será usado como modelo direto na estimação de fontes de poluição.

A eq. (2.61) também pode ser escrita como:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} M_{ij} S_i \quad (2.62)$$

onde S_i é a intensidade da i -ésima fonte, C_j é a concentração da j -ésimo sensor, $j = 1, 2, \dots, N_s$ e $i = 1, 2, \dots, N_f$. O cálculo de M_{ij} para as integrações avançada e regressiva no tempo, no modelo LAMBDA, é feito utilizando-se das trajetórias calculadas neste modelo, como apresentado a seguir:

Avançada: comparando-se a eq. (2.62) com a eq. (2.44) temos a expressão para a matriz M_{ij}

$$M_{ij} = \frac{V_{f,i}}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (2.63)$$

Regressiva: comparando-se a eq. (2.62) e a eq. (2.48) temos:

$$M_{ij} = \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j} \quad (2.64)$$

2.5.1 Comparação entre as integrações avançada e regressiva num Modelo Lagrangeano de Partículas

Nesta seção, faremos uma comparação entre os resultados de concentração obtidos com as duas metodologias, avançada e regressiva, implementados no modelo Lagrangeano LAMBDA. Para tanto, consideramos um cenário computacional: uma fonte tridimensional presente num domínio físico que consiste em uma área de $1 \text{ km} \times 1,5 \text{ km}$ de um terreno plano e com altura de 1000 m. Dentro deste domínio, a fonte tridimensional, de dimensões horizontais $700 \text{ m} \times 800 \text{ m}$, centrada em (400, 500), libera um contaminante a partir do solo até uma altura de 30 m. Neste domínio, consideramos também um certo número de detectores, medindo a concentração em quatro níveis (20 m, 40 m, 60 m e 80 m). A Figura 2.5a representa o domínio físico exibindo a projeção horizontal da fonte e dos sensores; na figura 2.5b a posição vertical dos sensores são representadas. A posição de cada sensor é descrita na Tabela 2.1.

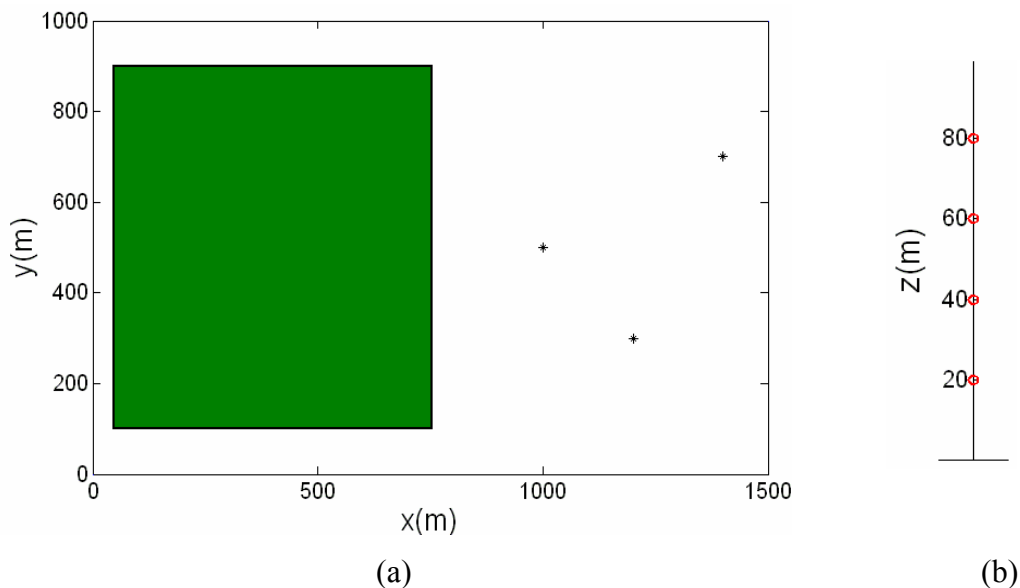


Figure 2.5 - Projeção bidimensional do domínio físico, onde * representam a posição horizontal dos sensores (a) e representação dos sensores nas posições verticais (b).

Tabela 2.1 – Posição Tridimensional de cada sensor.

N° do Sensor	x (m)	y(m)	z (m)
1	1000	500	20
2	1000	500	40
3	1000	500	60
4	1000	500	80
5	1200	300	20
6	1200	300	40
7	1200	300	60
8	1200	300	80
9	1400	700	20
10	1400	700	40
11	1400	700	60
12	1400	700	80

Para a simulação numérica de um campo de concentração no domínio físico através das metodologias avançada e regressiva no modelo LAMBDA, usamos os dados meteorológicos apresentados na Tabela 2.2. A direção do vento foi considerada constante, $\theta = 90^\circ$ (em meteorologia, $\theta = 0^\circ$ aponta para o norte), em todos os níveis verticais e para todo o intervalo de tempo. A altura da camada limite, o comprimento de Monin Obukov e a intensidade de emissão do contaminante foram consideradas constantes para todo o experimento e iguais a $h = 1120\text{m}$, $L = -71\text{m}$ e $Q = 2856\text{g/s}$.

Tabela 2.2 - Dados meteorológicos do experimento numérico.

Tempo (s)	$U_{10\text{m}}(\text{ms}^{-1})$	$U_{120\text{m}}(\text{ms}^{-1})$	$U_{200\text{m}}(\text{ms}^{-1})$
0	2,6	5,7	5,7
200	2,6	5,1	5,7
400	2,1	4,6	5,1
600	2,1	4,6	5,1

O perfil vertical da variância da velocidade vertical (σ_i^2) e a escala de tempo Lagrangeana (τ_{L_i}) foram calculados de acordo com o esquema de parametrização da turbulência derivado por Degrazia et al. (2000). O perfil vertical da velocidade do vento ($U(z)$) foi representado pelo perfil logaritmo clássico:

$$U(z) = \frac{u_*}{\kappa} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right) \quad (2.65)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, κ é a constante de von Karman e z_0 a altura da rugosidade.

A estimação de u_* foi feita através do melhor ajuste da eq. (2.65), com os dados da velocidade do vento observado para cada período nos três níveis. A velocidade do vento em todos os níveis do domínio foi obtida da eq. (2.65). Na implementação numérica, os perfis verticais foram calculados a cada $\Delta z = 2,5$ m. Para as integrações, um passo de tempo de $\Delta t = 1$ s foi utilizado e a escolhida foi a FDP Gram-Charlier truncada na terceira ordem.

Implementação Avançada:

Na implementação avançada, o número de partículas emitidas uniformemente a partir do volume da fonte foi de $N_{PEF} = 1000$, a cada passo no tempo, durante 800 passos. Após 500s de simulação (tempo suficiente para as partículas preencherem o domínio) uma concentração média em cada sensor foi construída: o valor da concentração em cada sensor foi calculado, com o auxílio da (eq. 2.46), cinco vezes num intervalo de 300s (a cada 60s):

$$C_j = \frac{1}{5} \sum_{n=1}^5 Q \frac{1}{V_{S,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS,j,n} , \quad (2.66)$$

como temos apenas uma fonte, o índice i foi suprimido da eq. (2.46); $j=1, \dots, 12$ e $N_{PVS,j,n}$ é o número de partículas que ocupam o volume do j -ésimo sensor em cada um dos 5 instantes em que a concentração é calculada. O volume de cada sensor foi de $10 \text{ m} \times 10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$ centrado nas posições apresentadas na Tabela 2.1.

Implementação Regressiva:

Para a implementação regressiva, as partículas são emitidas uniformemente dos sensores a partir do tempo $t = 800$ s e apenas as trajetórias que encontram-se no volume da fonte contribuirão para o cálculo da concentração no sensor. O volume do sensor foi de $1 \text{ m} \times 1 \text{ m} \times 1 \text{ m}$. De cada sensor, um número de partículas $N_{PES,j} = 1000$ foram liberadas a cada passo no tempo, durante 800 passos. Após 500s de simulação, uma concentração média em cada sensor foi construída: o valor da concentração em cada sensor foi calculado com o auxílio da eq. (2.49), a cada 60s num intervalo de 300 s (num total de 5 vezes):

$$C_j = \frac{1}{5} \sum_{n=1}^5 \frac{Q}{V_f} \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,j,n} \quad (2.67)$$

onde $N_{PVF,j,n}$ é o número de trajetórias que se encontram no volume da fonte em cada um dos 5 instantes em que a concentração é calculada.

O cálculo da concentração do contaminante nos sensores pelas duas metodologias, avançada e regressivo, foi realizado para três tipos de atmosfera: verticalmente homogênea e estacionária; verticalmente não-homogênea e estacionária; verticalmente não-homogênea e não-estacionária. Estes três testes são realizados para verificar em quais condições as duas metodologias dão resultados iguais ou próximos e ainda para dar uma estimativa do erro que se estabelece quando do uso destas metodologias em diferentes condições de homogeneidade vertical e estacionariedade.

1) verticalmente homogênea e estacionária:

O valor obtido pela parametrização da turbulência a 10m foi considerado constante para toda a extensão da CLP, com os dados calculados no primeiro intervalo de tempo, sendo usados para todo o experimento. A Tabela 2.3 e a Figura 2.6 apresentam o valor da concentração nos sensores obtido através das simulações utilizando as duas integrações. Quando a atmosfera é verticalmente homogênea e estacionária, os valores de concentração nos sensores para as duas metodologias são praticamente iguais, a pequena diferença observada é devida ao número de partículas utilizadas na simulação avançada. Provavelmente este número não tenha sido suficiente para o cálculo estatístico da concentração, já que a fonte

apresenta um volume bastante grande (700 m × 800 m × 30 m). As maiores divergências entre os valores calculados nas duas aproximações são encontrados nos sensores próximos ao solo, ou seja, nos sensores 1, 5, 9. O erro fracional entre os dados da simulação avançada e regressiva foi de $FB = -0,026$ (ver definição no Anexo A), representando que os resultados obtidos pela integração regressiva superestimam a avançada (pelo sinal negativo no índice FB).

Tabela 2.3 - Concentração nos sensores calculada pelas diferentes integrações do modelo Lagrangeano: avançada e regressiva, sob condições de atmosfera verticalmente homogênea e estacionária.

Nº do Sensor	Avançada C^a (gm⁻³)	Regressiva C^r (gm⁻³)
1	$3,32 \times 10^{-2}$	$3,44 \times 10^{-2}$
2	$1,60 \times 10^{-2}$	$1,56 \times 10^{-2}$
3	$4,00 \times 10^{-3}$	$3,99 \times 10^{-3}$
4	$6,96 \times 10^{-4}$	$6,84 \times 10^{-4}$
5	$2,79 \times 10^{-2}$	$2,91 \times 10^{-2}$
6	$1,49 \times 10^{-2}$	$1,52 \times 10^{-2}$
7	$4,79 \times 10^{-3}$	$4,95 \times 10^{-3}$
8	$1,01 \times 10^{-3}$	$1,07 \times 10^{-3}$
9	$2,45 \times 10^{-2}$	$2,55 \times 10^{-2}$
10	$1,42 \times 10^{-2}$	$1,45 \times 10^{-2}$
11	$5,50 \times 10^{-3}$	$5,57 \times 10^{-3}$
12	$1,42 \times 10^{-3}$	$1,46 \times 10^{-3}$

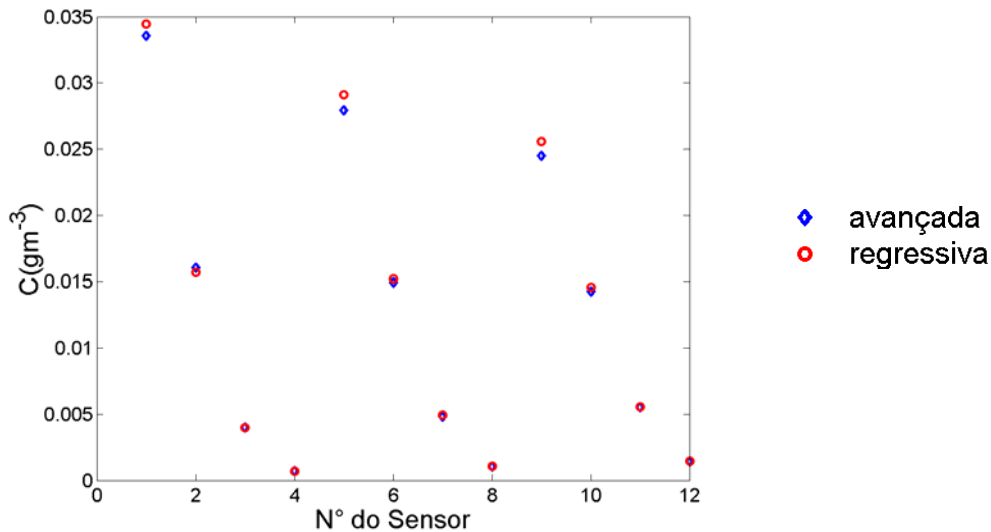


Figura 2.6 - Concentração nos sensores calculada pelas diferentes integrações do modelo Lagrangeano: Avançada e Regressiva. sob condições de atmosfera verticalmente homogênea e estacionária.

2) verticalmente não-homogênea e estacionária:

Os perfis verticais calculados pela parametrização da turbulência no primeiro intervalo de tempo foram usado para todo o experimento. A Tabela 2.4 apresenta o valor da concentração nos sensores obtido utilizando as duas integrações. Estes valores são representados graficamente na Figura 2.7. Quando a atmosfera é considerada verticalmente não-homogênea, mas estacionária, a concentração apresenta diferenças maiores no valor da concentração e também nos sensores distantes do solo. Esta diferença pode ser também devido ao número de partículas ser pequeno na integração avançada (apenas 1000 partículas são emitidas a cada passo no tempo em todo o domínio da fonte) e além disso, a divisão vertical da atmosfera deveria ser maior (usamos $N_z = 400$, sendo $\Delta z = 2,5$ m) para que a interpolação vertical (linear) nos perfis dos parâmetros turbulentos e na velocidade do vento não influencie nos resultados. De modo geral, a concentração nos sensores, calculados pela metodologia regressiva, teve uma magnitude menor do que aquela calculada com a integração avançada, exceto nos sensores a 80 m (sensores 4, 8, 12). Este resultado pode ser comprovado pelo erro fracional entre os dados da integração avançada e regressiva que é positivo, $FB = 0,096$. Este erro é maior que para o teste anterior.

Tabela 2.4 - Concentração nos sensores calculada pelas diferentes integrações do modelo Lagrangeano: Avançada e Regressiva, sob condições de atmosfera verticalmente não-homogênea e estacionária.

Nº do Sensor	Avançada C^a (gm^{-3})	Regressiva C^r (gm^{-3})
1	$2,06 \times 10^{-2}$	$1,83 \times 10^{-2}$
2	$1,14 \times 10^{-2}$	$1,00 \times 10^{-2}$
3	$5,30 \times 10^{-3}$	$4,94 \times 10^{-3}$
4	$2,40 \times 10^{-3}$	$2,47 \times 10^{-3}$
5	$1,61 \times 10^{-2}$	$1,43 \times 10^{-2}$
6	$1,02 \times 10^{-2}$	$9,14 \times 10^{-3}$
7	$5,70 \times 10^{-3}$	$5,27 \times 10^{-3}$
8	$2,98 \times 10^{-3}$	$3,05 \times 10^{-3}$
9	$1,33 \times 10^{-2}$	$1,19 \times 10^{-2}$
10	$9,32 \times 10^{-3}$	$8,36 \times 10^{-3}$
11	$5,54 \times 10^{-3}$	$5,36 \times 10^{-3}$
12	$3,34 \times 10^{-3}$	$3,39 \times 10^{-3}$

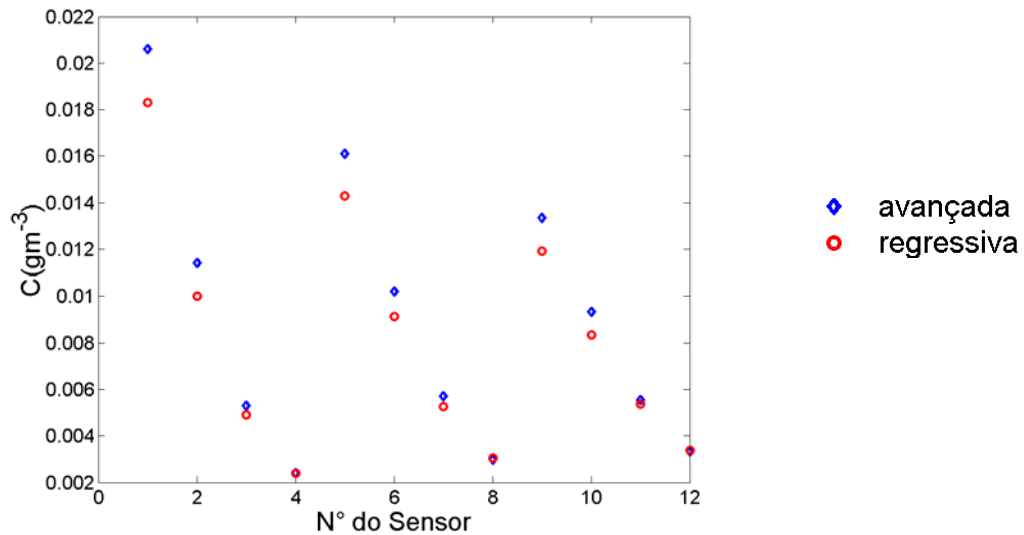


Figura 2.7 - Concentração nos sensores calculada pelas diferentes integrações do modelo Lagrangeano: Avançada e Regressiva, sob condições de atmosfera verticalmente não - homogênea e estacionária.

3) verticalmente não-homogênea e não-estacionária.

A Tabela 2.5 e Figura 2.8 apresentam os valores da concentração nos sensores obtidos utilizando as duas integrações. Para uma atmosfera não-homogênea e não-estacionária os valores de concentração diferem significativamente. Esta desigualdade pode, talvez, ser explicada pelo fato de que a igualdade entre a $P^a(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ (densidade de probabilidade de transição avançado) e $P^r(\mathbf{x}_0, t_0 | \mathbf{x}, t)$ (regressivo), eq. (2.38), vale apenas em situações de atmosfera com características estacionária.

Nos sensores próximos ao solo (1, 5, 9) a concentração calculada de forma avançada no tempo apresenta magnitudes maiores. Para os demais sensores a integração regressiva apresenta valores maiores. Já o erro fracional entre a concentração calculada pela integração avançada e regressiva é de $FB = -0,123$, representando a superestimação da integração avançada em relação à regressiva, sendo ainda para este erro é o maior para os três testes.

Tabela 2.5 - Concentração nos sensores calculada pelas diferentes integrações do modelo Lagrangeano: avançada e regressiva. sob condições de atmosfera verticalmente não-homogênea e não-estacionária.

Nº do Sensor	Avançada C^a (g/m³)	Regressiva C^r (g/m³)
1	$1,54 \times 10^{-2}$	$1,54 \times 10^{-2}$
2	$8,89 \times 10^{-3}$	$1,08 \times 10^{-2}$
3	$5,63 \times 10^{-3}$	$7,78 \times 10^{-3}$
4	$3,71 \times 10^{-3}$	$5,67 \times 10^{-3}$
5	$1,11 \times 10^{-2}$	$1,03 \times 10^{-2}$
6	$7,20 \times 10^{-3}$	$8,15 \times 10^{-3}$
7	$4,84 \times 10^{-3}$	$6,49 \times 10^{-3}$
8	$3,49 \times 10^{-3}$	$5,13 \times 10^{-3}$
9	$8,95 \times 10^{-3}$	$7,99 \times 10^{-3}$
10	$6,17 \times 10^{-3}$	$6,70 \times 10^{-3}$
11	$4,43 \times 10^{-3}$	$5,63 \times 10^{-3}$
12	$3,94 \times 10^{-3}$	$4,70 \times 10^{-3}$

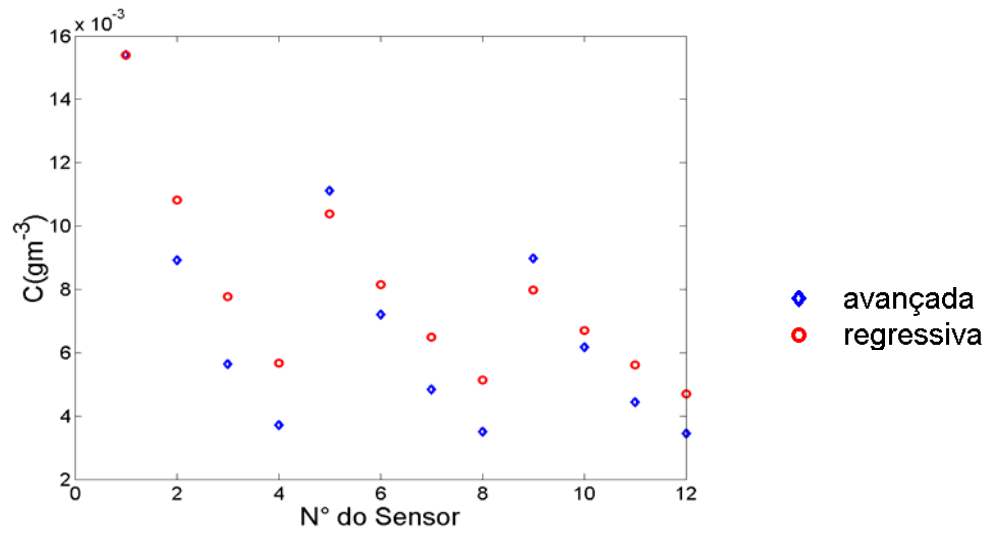


Figura 2.8 - Concentração nos sensores calculada pelas diferentes integrações do modelo Lagrangeano: avançada e regressiva. sob condições de atmosfera verticalmente não-homogênea e não-estacionária.

CAPÍTULO 3

PROBLEMAS INVERSOS

A definição de problema inverso mais conhecida e abrangente é de Engl et al. (1996), segundo o qual “Resolver um problema inverso é determinar **causas** desconhecidas a partir de **efeitos** desejados ou observados”. Os efeitos observados, em geral, são imprecisos (dados contaminados com ruídos ou erros experimentais) ou incompletos. Entretanto, um problema direto (PD) requer o conhecimento completo das causas para a determinação dos efeitos. Matematicamente, associam-se às causas um conjunto de parâmetros a serem determinados (incógnitas) e aos efeitos, um conjunto conhecido de dados observados, de forma que a utilização daqueles parâmetros no problema direto geraria os mesmos dados observados. A Figura 3.1 ilustra uma representação esquemática de problemas inverso e direto.

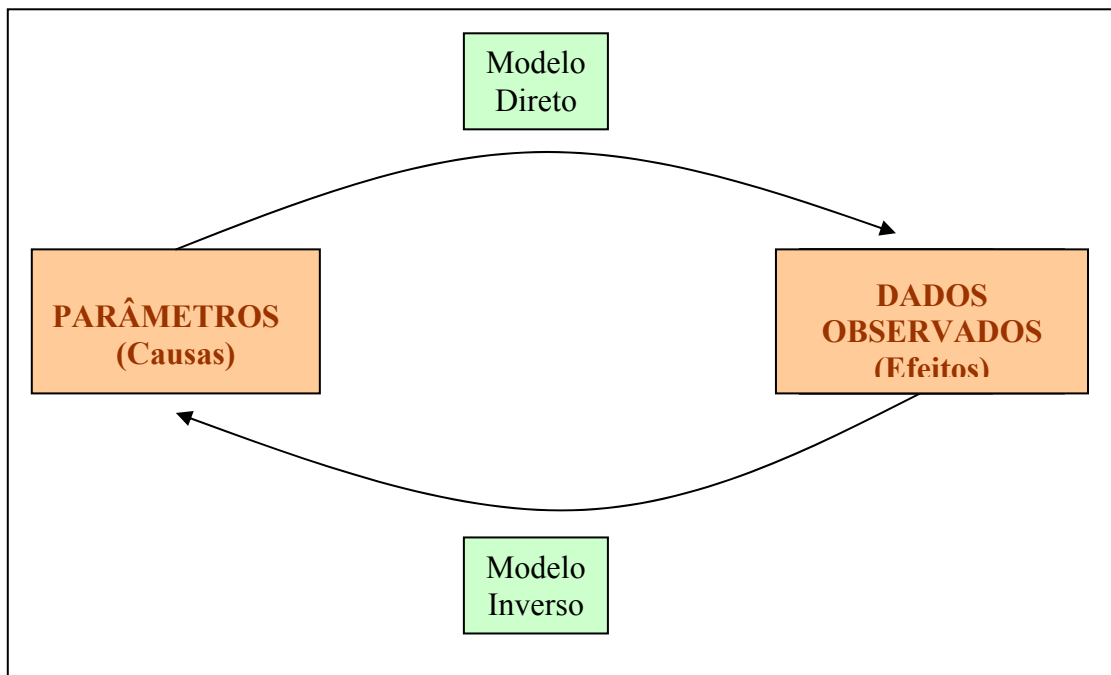


Figura 3.1 Representação esquemática problemas direto e inverso.

Os problemas inversos (PI) pertencem à classe de problemas mal postos. Segundo Hadamard, três condições são necessárias para que um problema seja bem posto: a existência da solução, a solução deve ser única e a solução deve ter dependência contínua com os dados de entrada. Se uma dessas condições for violada o problema torna-se mal posto. Em geral, uma ou mais dessas condições não são satisfeitas num PI!

Os métodos de solução de PI têm sido motivo de intensas pesquisas científicas encontrando espaço nas mais diversas áreas do conhecimento (entre elas, geofísica, meteorologia, oceanografia, transferência de calor). Novas metodologias surgem continuamente como resposta à dificuldade na solução de PI. Entre as mais conhecidas podemos citar: Inversão Direta, Decomposição em Valores Singulares, Mínimos Quadrados, Métodos de Regularização, Métodos Variacionais, Redes Neurais, Filtros Digitais, entre outras (Campos Velho, 2001). No Brasil, o Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC/INPE) é um importante centro no desenvolvimento de novas metodologias para solução de problemas inversos.

Neste capítulo, apresenta-se uma metodologia implícita, sugerida por Campos Velho et al. (2000), para a solução de problema inverso, baseada no método de Regularização. Nesta metodologia, o PI é formulado como um problema de otimização. Para a solução do problema de otimização, três métodos de são descritos: Quase-Newton e Levenbert-Marquardt, como métodos determinísticos e *Simulated Annealing*, como método estocástico. Primeiramente, apresenta-se um método de solução de PI explícito.

3.1 Método explícito

Como apresentado na Seção 2.5, uma relação linear pode ser construída entre a intensidade de emissão de uma fonte e a concentração num sensor, através de uma matriz de transição de estados, ou matriz fonte-receptor. Reescrevendo a eq. (2.61):

$$\vec{C} = \mathbf{M}\vec{S} \quad (3.1)$$

onde \vec{C} é um vetor cujos elementos representam as concentrações médias nos N_s sensores, $\vec{C} = (C_1, C_2, \dots, C_{N_s})$, os elementos do vetor \vec{S} representam as intensidades das N_f fontes, $\vec{S} = (S_1, S_2, \dots, S_{N_f})$, e \mathbf{M} é a matriz fonte-receptor.

Quando pretende-se obter as fontes de poluição na atmosfera, uma forma de estimação explícita é a inversão direta da matriz \mathbf{M} na eq. (3.1). Seibert (2000) apresenta razões pelas quais o sistema linear (eq. 3.1) não pode ser diretamente resolvido: em geral a matriz \mathbf{M} não é quadrada, mas mesmo que a dimensão de \vec{C} exceda a dimensão de \vec{S} , o problema é normalmente sub determinado pelo fato de que algumas partes do domínio podem nunca terem sido tocadas pelas trajetórias das partículas e por isso algumas trajetórias associadas a valores medidos de \vec{C} serão muito similares, o que torna o problema “mal - condicionado”, significando que qualquer solução formal pode conter características não reais causadas por autovalores quase-nulos.

Um outro método explícito para a estimação da intensidade de fontes na atmosfera faz uso de uma estimativa matemática da matriz \mathbf{M} a partir de dados calculados por um modelo matemático considerando a intensidade de emissão como um vetor unitário, $\vec{S} = \vec{1}$, a norma da eq. (3.1) é dada por :

$$\left\| \vec{C}^{Mod} (\vec{S} = \vec{1}) \right\| = \left\| \mathbf{M} \vec{1} \right\|. \quad (3.2)$$

Utilizando-se dos dados experimentais do campo de concentração, tem-se:

$$\left\| \vec{C}^{Exp} \right\| = \left\| \mathbf{M} \vec{S} \right\| \quad (3.3)$$

Manipulando as eqs. (3.2) e (3.3) utilizando a definição de norma¹, pode escrever:

$$\left\| \vec{\mathbf{C}}^{Mod} (\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{1}}) \right\| = \left\| \mathbf{M} \vec{\mathbf{1}} \right\| \leq \left\| \mathbf{M} \right\| \cdot \left\| \vec{\mathbf{1}} \right\| \quad \Rightarrow \quad \left\| \mathbf{M} \right\| \geq \left\| \vec{\mathbf{C}}^{Mod} (\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{1}}) \right\| \quad (3.4)$$

$$\left\| \vec{\mathbf{C}}^{Exp} \right\| = \left\| \mathbf{M} \vec{\mathbf{S}} \right\| \leq \left\| \mathbf{M} \right\| \cdot \left\| \vec{\mathbf{S}} \right\| \quad \Rightarrow \quad \left\| \mathbf{M} \right\| \geq \frac{\left\| \vec{\mathbf{C}}^{Exp} \right\|}{\left\| \vec{\mathbf{S}} \right\|} \quad (3.5)$$

Do resultado das eqs. (3.4) e (3.5) não se pode estabelecer uma relação para o cálculo do vetor fonte $\vec{\mathbf{S}}$. No entanto, pela definição de norma do produto de uma matriz por um escalar (ver nota de rodapé 1), se a intensidade da fonte for um escalar, S , o cálculo da matriz \mathbf{M} , pode ser obtido das equações (3.2) e (3.3):

$$\left\| \vec{\mathbf{C}}^{Mod} (S = 1) \right\| = \left\| \mathbf{M} \mathbf{1} \right\| = \left\| \mathbf{M} \right\| \cdot 1 \quad \Rightarrow \quad \left\| \mathbf{M} \right\| = \left\| \vec{\mathbf{C}}^{Mod} (S = 1) \right\| \quad (3.6)$$

$$\left\| \vec{\mathbf{C}}^{Exp} \right\| = \left\| \mathbf{M} S \right\| = \left\| \mathbf{M} \right\| \cdot |S| \quad \Rightarrow \quad \left\| \mathbf{M} \right\| = \frac{\left\| \vec{\mathbf{C}}^{Exp} \right\|}{|S|} \quad (3.7)$$

¹ **Definição de norma de matriz** - Chama-se norma de uma matriz \mathbf{A} , $\|\mathbf{A}\|$, qualquer função definida no espaço vetorial das matrizes $n \times n$, com valores em \mathfrak{R} , satisfazendo as seguintes condições:

- 1) $\|\mathbf{A}\| \geq 0$ e $\|\mathbf{A}\| = 0$ se e somente se $\mathbf{A} = 0$ (matriz nula);
- 2) $\|\omega \mathbf{A}\| = |\omega| \|\mathbf{A}\|$ sendo ω um escalar;
- 3) $\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|$;
- 4) $\|\mathbf{A}\mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{B}\|$.

sendo \mathbf{B} uma matriz $n \times n$. A condição (4) também é válida se \mathbf{B} é um vetor ($\vec{\mathbf{B}}$).

A norma de um vetor $\vec{\mathbf{x}}$ pode ser calculada da seguinte forma:

Para $1 \leq p \leq \infty$ definimos a norma p :

$$\left\| \vec{\mathbf{x}} \right\|_p = \left[\sum_{j=1}^n |x_j|^p \right]^{1/p}$$

Se $p=1$

$$\left\| \vec{\mathbf{x}} \right\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j| \quad (\text{soma das magnitudes})$$

Se $p=2$

$$\left\| \vec{\mathbf{x}} \right\|_2 = \left[\sum_{j=1}^n |x_j|^2 \right]^{1/2} \quad (\text{norma euclidiana})$$

Se $p = \infty$

$$\left\| \vec{\mathbf{x}} \right\|_\infty = \max_{1 \leq j \leq n} (|x_j|) \quad (\text{máxima magnitude})$$

Substituindo-se a matriz \mathbf{M} calculada da eq. (3.6) na eq. (3.7) pode-se ter uma estimativa da intensidade da fonte:

$$|S| = \frac{\|\vec{\mathbf{C}}^{Exp}\|}{\|\vec{\mathbf{C}}^{Mod}(S=1)\|} \quad (3.8)$$

A solução de problema inverso via método explícito é bastante limitada. Esta técnica só pode ser usada quando se tem apenas um único parâmetro para estimar e fundamentalmente ainda quando o problema pode ser escrito na forma da eq. (3.1). Além disso, a solução, eq. (3.8), impõe que o parâmetro estimado seja positivo através do módulo da solução ($|S|$).

3.2 Soluções Regularizadas

De forma a estabelecer uma análise inversa de problemas em física da atmosfera, em particular problemas ligados a poluição, assume-se que a concentração de um determinado contaminante, obtido através de modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera, é dado por $C(\vec{\mathbf{x}}, t, \vec{\mathbf{W}}) = C^{Mod}(\vec{\mathbf{x}}, t, \vec{\mathbf{W}})$, onde $\vec{\mathbf{W}}$ pode representar um parâmetro atmosférico responsável pelo transporte de contaminantes ou ainda um termo de fonte/sumidouro e $C^{Exp}(\vec{\mathbf{x}}, t)$ são dados de concentração do contaminante obtidos experimentalmente. A solução do problema inverso é uma função de $\vec{\mathbf{W}}$ que minimiza o funcional dos resíduos quadrados,

$$F(\vec{\mathbf{W}}) = \|\vec{\mathbf{R}}\|^2 = \vec{\mathbf{R}}^t \vec{\mathbf{R}} \quad (3.9)$$

onde $\vec{\mathbf{R}} = (R_1, \dots, R_{N_s})^T \in \Re^{N_s}$ representa o resíduo entre grandezas calculadas, $C(\vec{\mathbf{x}}, t, \vec{\mathbf{W}})$ e medidas, $C^{Exp}(\vec{\mathbf{x}}, t)$. Por simplicidade, assume-se que não haja dependência em $\vec{\mathbf{x}}$ e t . Então, quando o parâmetro $\vec{\mathbf{W}}$ é fixado o resíduo é dado por

$$R_i(\vec{\mathbf{W}}) = C_i(\vec{\mathbf{x}}, t, \vec{\mathbf{W}}) - C_i^{Exp}(\vec{\mathbf{x}}, t) \quad (3.10)$$

e $\vec{W} = (W_1, \dots, W_N)^t \in \mathfrak{R}^N$ é o vetor de incógnitas do problemas.

Combinando as eqs. (3.9) e (3.10), o funcional ou função objetivo é escrito da seguinte forma:

$$F(\vec{W}) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[C_i(\vec{x}, t, \vec{W}) - C_i^{Exp}(\vec{x}, t) \right]^2 \quad (3.11)$$

Para contornar o problema de mal condicionamento no funcional, eq. (3.11), é aplicado um operador regularização que representa, do ponto de vista físico, uma informação adicional *a priori* ao problema. Matematicamente, a regularização representa uma restrição sobre a solução a ser calculada. Assim esta restrição pode ser adicionada à função objetivo através de um multiplicador de Lagrange:

$$F(\alpha, \vec{W}) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[C_i(\vec{x}, t, \vec{W}) - C_i^{Exp}(\vec{x}, t) \right]^2 + \alpha \Omega(\vec{W}) \quad (3.12)$$

onde $\Omega(\vec{W})$ é o operador regularização, e α é o multiplicador de Lagrange (uma constante positiva), também chamado parâmetro de regularização. Nota-se que o funcional (3.12) é também função de α .

O parâmetro de regularização representa um papel importante nesta metodologia. Se $\alpha \rightarrow 0$, o mal condicionamento do PI pode gerar até soluções não físicas. Por outro lado, se $\alpha \rightarrow \infty$ a solução da função objetivo, (eq. 3.12), estará associada a uma solução regular, perdendo totalmente a informação de natureza física do problema a ser resolvido. Assim, o parâmetro de regularização deve realizar um balanço delicado entre suavidade e fidelidade entre os dados. O método da curva L (Hansen, 1992) determina o valor do parâmetro de regularização pelo ponto de máxima curvatura do Erro Quadrático (fidelidade) \times Regularização (suavidade) entre os dados experimentais e do modelo matemático.

O operador regularização sugerido por Tikhonov & Arsenin (1977), pode ser expresso por:

$$\Omega(\vec{W}) = \sum_{m=0}^p \left\| \vec{W}^{(m)} \right\|_2^2 \quad (3.13)$$

onde $\overline{\mathbf{W}}^{(m)}$ denota a m -ésima derivada (diferença) da função $\overline{\mathbf{W}}$. Esta regularização é chamada operador de regularização de Tikhonov- m , onde m representa a ordem da regularização.

Outra técnica de regularização é dada pelo uso do princípio da Máxima Entropia. Similar a regularização de Tikhonov, a solução por Máxima Entropia também busca soluções globalmente suaves. A entropia aqui é usada como um critério de inferência proposto por Jaynes (1957), baseado na teoria matemática da informação de Shanon (1948). Desta forma, o operador de regularização pode ser expresso por (Shanon, 1948; Jaynes, 1957; Muniz et al. 2000; Ramos et al. 1999):

$$\Omega(\overline{\mathbf{W}}) = \sum_{m=0}^p S^{(m)}(\overline{\mathbf{W}}) \quad (3.14a)$$

$$S^{(m)}(\overline{\mathbf{W}}) = -\int s(\vec{r}) \log[s(\vec{r})] d\vec{r} \quad (3.14b)$$

com

$$s(\vec{r}) = \frac{\overline{\mathbf{W}}^{(m)}(\vec{r})}{\int \overline{\mathbf{W}}^{(m)}(\vec{r}) d\vec{r}} \quad (3.14c)$$

e $\overline{\mathbf{W}}^{(m)}$ representando a m -ésima derivada (diferença, no caso discreto) da função $\overline{\mathbf{W}}$. A função S^m apresenta seu máximo global quando $s(\vec{r})$ é um valor constante, i.e., uma distribuição uniforme, enquanto que o menor valor entrópico $S_{\min}=0$ é encontrado quando a distribuição de probabilidades de $s(\vec{r})$ é uma delta de Dirac.

3.3 Métodos de Otimização

O problema inverso, eq. (3.12), pode ser resolvido como um problema de otimização em que se busca minimizar o funcional, ou seja, encontrar $\nabla F = 0$. Existem inúmeros algoritmos de otimização divididos em duas grandes classes: algoritmos determinísticos e

estocásticos. Existem também os métodos chamados híbridos (Estocásticos + Determinísticos). Na busca iterativa da solução ótima, a diferença básica entre esses métodos é a forma como o incremento no vetor de parâmetros desconhecido, \vec{W} , é escolhido,

$$\vec{W}^{n+1} = f(\vec{W}) \quad \text{com} \quad f(\vec{W}) = \vec{W}^n + \Delta \vec{W}^n \quad (3.15)$$

onde $f(\vec{W})$ é uma função determinística, se o método de otimização for determinístico e aleatória, se o método for estocástico; n é o contador de iterações.

Os métodos estocásticos necessitam de um maior tempo computacional, no entanto, conseguem fugir de mínimos locais, fornecendo soluções ótimas globais. Por outro lado, os métodos determinísticos (baseados em gradiente) apresentam um menor custo computacional, mas podem apresentar soluções que são mínimos locais e, como consequência, a solução do problema (ótimo global) não é encontrada. A Figura 3.2 representa uma função em que existem vários mínimos locais e apenas um mínimo global.

Nesta tese, utilizaremos como esquema determinístico o método Quase-Newton, implementado na rotina E04UCF, da biblioteca NAG (NAG Fortran Library, 1995) e o método de Levenberg-Marquardt, implementado na rotina DBCLSF, da biblioteca IMSL (IMSL, 1991) e, como esquema estocástico, utilizamos o algoritmo *Simulated Annealing*. A estimativa inicial será sempre zero, exceto no caso da Seção 5.8.

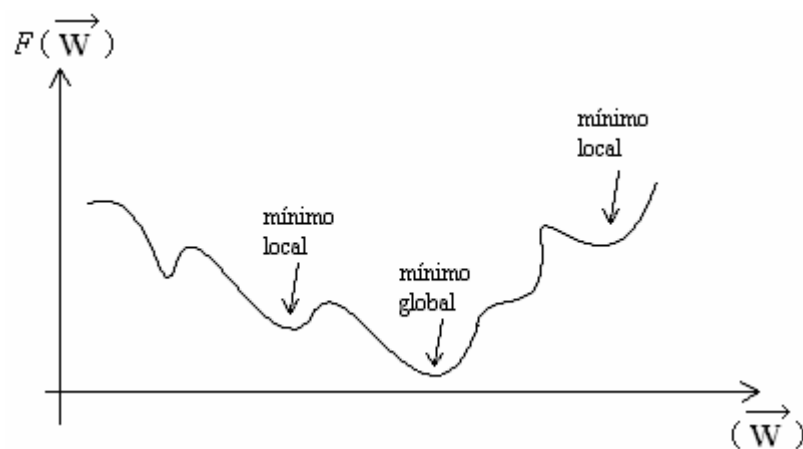


Figura 3.2 - Representação dos mínimos locais e global de uma função $F(\vec{W})$ qualquer.

3.3.1 Método de Levenberg-Marquardt

Para entender o método de Levenberg-Marquardt (LM) convém primeiramente explicarmos o método de Newton. Visando minimizar o funcional eq. (3.12), com $\alpha = 0$, busca-se o função \vec{W} tal que, $\nabla F = 0$, ou seja,

$$\frac{\partial F}{\partial W_k} = 0 \quad (3.16)$$

onde $k = 1, \dots, N$, constituindo portanto, um sistema de N equações não lineares e N incógnitas, N é o número de elementos do vetor \vec{W} . Das eqs. (3.10), (3.11) e (3.16) reescreve-se a equação acima, usando $C_i = C_i(\vec{x}, t, \vec{W})$:

$$2 \sum_{i=1}^{N_s} R_i \frac{\partial C_i}{\partial W_k} = 0 \quad (3.17)$$

onde R dado pela eq. (3.10) e N_s é o número de elementos de C_i . Para resolver a eq. (3.17) através de um método modificado de Newton, usa-se a expansão de Taylor em torno de \vec{W}^n , truncado no termo de primeira ordem:

$$R_i^{n+1} = R_i^n + \sum_{j=1}^N \frac{\partial R_i^n}{\partial W_j} \Delta W_j^n \quad (3.18)$$

onde $R_i^n = R_i(\vec{W}^n)$ e $\Delta W_j^n = W_j^{n+1} - W_j^n$. Substituindo as eqs. (3.18) na eq. (3.17) e observando que $\frac{\partial R_i}{\partial W_j} = \frac{\partial C_i}{\partial W_j}$ obtém-se:

$$\sum_{i=1}^M \left(R_i^n + \sum_{j=1}^N \frac{\partial C_i}{\partial W_k} \Big|_{W=W^n} \Delta W_j^n \right) \frac{\partial C_i}{\partial W_k} \Big|_{W=W^n} = 0 \quad (3.19)$$

Usando a definição de matriz Jacobiana (matriz das derivadas parciais primeira de \mathbf{C} em relação a $\vec{\mathbf{W}}$) com os elementos denotados por $J_{ij} = \partial C_i / \partial W_j$, o sistema (3.19) pode ser reescrito na forma conhecida como equação normal:

$$\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{J}^n \Delta \vec{\mathbf{W}}^n = -\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{R}^n. \quad (3.20)$$

Desta forma, a solução de $\Delta \vec{\mathbf{W}}^n$ é representada por

$$\Delta \vec{\mathbf{W}}^n = -\left[\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{J}^n\right]^{-1} \left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{R}^n \quad (3.21)$$

Esta é a equação para o incremento na busca da solução ótima do **método de Newton**. Pode ocorrer que a matriz $\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{J}^n$ seja mal condicionada, fazendo com que, pequenas variações em seus elementos, a cada iteração, causem grande variação no resultado de $\Delta \vec{\mathbf{W}}^n$. Além disso, esta matriz, para algum $\vec{\mathbf{W}}^n$, pode tornar-se singular.

Um segundo método para encontrar $\Delta \vec{\mathbf{W}}^n$ é o **método da máxima descida**, onde

$$\Delta \vec{\mathbf{W}}^n = -\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{R}^n. \quad (3.22)$$

Enquanto o método de Newton requer uma boa estimativa inicial, $\vec{\mathbf{W}}^0$, para sua convergência, o método da máxima descida apresenta-se mais robusto com relação à estimativa inicial, no entanto possui um custo computacional maior.

A estratégia do método de Levenberg-Marquardt é combinar a robustez do método de máxima descida no início do processo iterativo e a velocidade de convergência do método de Newton. Além disso, o procedimento leva a um melhor condicionamento da matriz $\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{J}^n$. Isto ocorre devido à adição de um termo na diagonal da matriz:

$$\left[\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{J}^n + \alpha^n \mathbf{I}\right] \Delta \vec{\mathbf{W}}^n = -\left(\mathbf{J}^n\right)^t \mathbf{R}^n, \quad (3.23)$$

onde α é um fator de amortecimento. Como a matriz $(\mathbf{J}^n)^T \mathbf{J}^n$ é positiva semi-definida (autovalores positivos), ao adicionar-se um valor positivo e pequeno a cada elemento da diagonal principal, a matriz modificada terá todos os autovalores não nulos, o que elimina a possibilidade da matriz modificada ser singular. A eq. (3.23) é similar à solução da eq. (3.12) com o método de regularização dado por Tikhonov de ordem zero (eq. (3.13) com $m = 0$), ou seja, a eq. (3.23) busca soluções regularizadas para a eq. (3.11).

A solução da eq. (3.23) para $\Delta \vec{\mathbf{W}}^n$ é:

$$\Delta \vec{\mathbf{W}}^n = - \left[(\mathbf{J}^n)^T \mathbf{J}^n + \alpha^n \mathbf{I} \right]^{-1} (\mathbf{J}^n)^T \vec{\mathbf{R}}^n. \quad (3.24)$$

Quando α^n tende a zero, $\Delta \vec{\mathbf{W}}^n$ tende à solução do método de Newton, enquanto que para valores de α^n cada vez maiores, $\Delta \vec{\mathbf{W}}^n$ aproxima-se ao método de máxima descida.

3.3.2 Método Quase-Newton

O método Quase-Newton (QN) de métrica variável utiliza uma aproximação diferente para o termo $(\mathbf{J}^n)^T \mathbf{J}^n$ na eq. (3.21). Este termo $(\mathbf{J}^n)^T \mathbf{J}^n$ pode ser denominado de matriz Hessiana \mathbf{H} , ($\mathbf{H} = \nabla^2 R(\vec{\mathbf{W}})$). Na literatura encontram-se várias aproximações para a Hessiana, entre elas a aproximação BFGS (Mahey, 1987):

$$\mathbf{H}^n = \mathbf{H}^{n-1} + \frac{\mathbf{b}^n (\mathbf{b}^n)^T}{(\mathbf{b}^n)^T \mathbf{u}^n} - \frac{\mathbf{H}^{n-1} \mathbf{u}^n (\mathbf{u}^n)^T \mathbf{H}^{n-1}}{(\mathbf{u}^n)^T \mathbf{H}^{n-1} \mathbf{u}^n} \quad (3.25)$$

onde

$$\mathbf{b}^n = \vec{\mathbf{W}}^n - \vec{\mathbf{W}}^{n-1},$$

$$\mathbf{u}^n = \nabla F(\alpha, \vec{\mathbf{W}}^n) - \nabla F(\alpha, \vec{\mathbf{W}}^{n-1}).$$

3.3.3 Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*)

A metaheurística *Simulated Annealing* (SA) corresponde a uma simulação algorítmica do processo físico de recozimento de certos materiais. Sabe-se da metalurgia que se o metal é resfriado em condições apropriadas, o material obtido apresenta uma rede cristalina bem formada, evitando estados amorfos da estrutura (Kirkpatrick et al., 1983). No recozimento, o metal é aquecido a altas temperaturas, causando uma forte vibração nos átomos. Quando o metal é resfriado de forma brusca, a microestrutura tende a um estado randomicamente instável (amorfo), porém, quando o metal é resfriado de forma suficientemente lenta, o sistema procurará um ponto de equilíbrio resultando, no final, numa microestrutura ordenada e estável.

O problema de otimização irá emular o processo de recozimento, onde a função objetivo irá substituir a função de energia do processo físico. Porém, sabe-se da Mecânica Estatística, que há uma probabilidade não nula do sistema saltar de estados intermediários meta instáveis. Este procedimento será aplicado no problema de otimização.

No algoritmo de otimização, as variáveis de um sistema (vetor de parâmetros desconhecidos) são perturbadas aleatoriamente e avalia-se a função objetivo, $F(\vec{\mathbf{W}})$, e seu gradiente $\nabla F(\vec{\mathbf{W}})$. O novo sistema é aceito com a seguinte probabilidade:

$$P = \begin{cases} 1 & \text{se } \nabla F(\vec{\mathbf{W}}) < 0 \\ e^{-\Delta F(\vec{\mathbf{W}})/T} & \text{se } \nabla F(\vec{\mathbf{W}}) \geq 0 \end{cases} \quad (3.26)$$

A probabilidade $P = e^{-\Delta F(\vec{\mathbf{W}})/T}$ é uma analogia à equação de Boltzmann ($P = e^{-\Delta E/\kappa T}$, onde ΔE é a variação de energia do sistema, κ é a constante de Boltzmann e T a temperatura do sistema). No algoritmo de otimização, se T tiver magnitude muito superior ao desvio padrão da função no intervalo, a maioria das soluções são aceita. Ao passo que, se T for igual a zero, o método se torna uma busca aleatória do mínimo. Assim, adota-se: T_0 como o valor do desvio padrão da função objetivo no intervalo estudado e T_f com a ordem de grandeza desejada para a precisão do ponto ótimo. Em cada iteração do algoritmo, a

temperatura diminui por um fator ρ , sendo que \vec{W}^n sofre n_p perturbações e n_a soluções são aceitas.

Nesta tese utilizaremos $T_0 = 2,0$ para a temperatura inicial; $T^n = \rho T^{n-1}$ como o valor da temperatura na n -ésima iteração; fator de resfriamento, $\rho = 0.9$; $n = 10N$ número de iterações, onde N é o número de incógnitas a serem estimada; $n_p = 20N$ número de perturbações na solução em cada iteração; $n_a = 2n_p$ número de soluções aceitas em cada iteração.

CAPÍTULO 4

ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS TURBULENTOS

O fenômeno de difusão turbulenta, presente na Camada Limite Planetária (CLP), representa um problema extremamente complexo na modelagem do transporte e da dispersão de contaminantes na baixa atmosfera. Neste aspecto, a grande maioria dos modelos de previsão da qualidade do ar (Modelos Eulerianos e Lagrangeanos) utilizam algum tipo de parametrização na descrição dos termos responsáveis pelo transporte turbulento. Para cada parâmetro desconhecido nos modelos de dispersão, tais como coeficiente de difusão, termo de contra-gradiente, escala de tempo lagrangeana, etc., existem inúmeras parametrizações descritas na literatura.

No presente capítulo, estima-se, o coeficiente de difusão turbulenta, sob condições de atmosfera convectiva e neutra, e o termo de contra-gradiente. Estes parâmetros são estimados através de um procedimento de inversão implícita no qual o problema inverso (PI) é formulado como um problema de otimização não-linear fazendo uso da teoria da regularização, como sugerido por Campos Velho et al. (2000) (Seção 3.2). Na determinação do coeficiente de difusão, três métodos de otimização serão empregados na solução do problema inverso: Quase-Newton (QN), Levenberg Marquart (LM) e *Simulated Annealing* (SA) (Seção 3.2). O termo de contra-gradiente é estimado com o método Quase-Newton e posteriormente é comparado com a nova formulação (Seção 2.4), onde σ_*^2 dada por Degrazia et al (1997) ou por Sorbjan (1989) e com as formulações propostas por Holstlag & Boville (1993) ou por Cuijpers & Holstlag (1998).

O procedimento padrão para o teste de uma metodologia de problemas inversos é emular dados experimentais. Os dados experimentais sintéticos podem ser obtidos a partir de uma concentração calculada pelo problema direto, adicionado de uma perturbação aleatória. Neste capítulo utiliza-se, como modelo matemático ou direto, o modelo Euleriano unidimensional apresentado na Seção 2.1.1.

4.1 Estimação do Coeficiente de Difusão Vertical

Nesta seção pretende-se estimar o coeficiente de difusão vertical ou a difusividade vertical sob condições de atmosfera convectiva e neutra, com o auxílio de uma técnica de problema inverso apresentada na Seção 3.2 (Roberti et al., 2004b). A concentração experimental utilizada foi obtida a partir da solução do modelo euleriano unidimensional, descrito na Seção 2.1.1, da seguinte maneira:

$$C^{Exp}(z,t) = C^{Mod}(z,t)[1 + \sigma\mu] \quad (4.1)$$

onde $C^{Mod}(z,t)$ é a solução do modelo euleriano, eq. (2.8), após um tempo de difusão de $t = 400$ s, $\sigma = 0,01; 0,025; 0,05$, que corresponde a níveis de ruído de 1 %, 2,5 %, 5 %, respectivamente, e μ é uma variável aleatória com Função Densidade de Probabilidade do tipo Normal com média zero e desvio padrão 1 ($N(0, 1)$). Para todas as simulações a seguinte discretização foi utilizada: $\Delta z = 10$ m (incremento na posição vertical), $N_z = 100$ (número de níveis em que a atmosfera foi discretizada), $\Delta t = 0,4$ s (passo no tempo) e $N_t = 1000$ (número máximo de passos no tempo). A altura da CLP usada foi de $h = 1000$ m, o valor da escala de velocidade convectiva e de fricção foi de $w^* = 2,0$ m s⁻¹ e $u^* = 0,8$ m s⁻¹, respectivamente e o comprimento de Obukov usado foi de $L = -10$ m sob condição convectiva e $L = 10$ m sob condição neutra. O termo de contra gradiente foi desconsiderado e o coeficiente de difusão vertical utilizado para a condição convectiva ou neutra é aquele sugerido por Degrazia et al. (2000), eq. (2.50). A Figura 4.1 ilustra estes dois coeficientes. A difusividade vertical sob condição neutra é em torno de uma ordem de grandeza menor que sob condição convectiva, significando que, para condições convectivas, este parâmetro atua de forma mais eficiente na difusão, ou ainda que o tempo de difusão para uma condição homogênea é maior sob condição de atmosfera neutra.

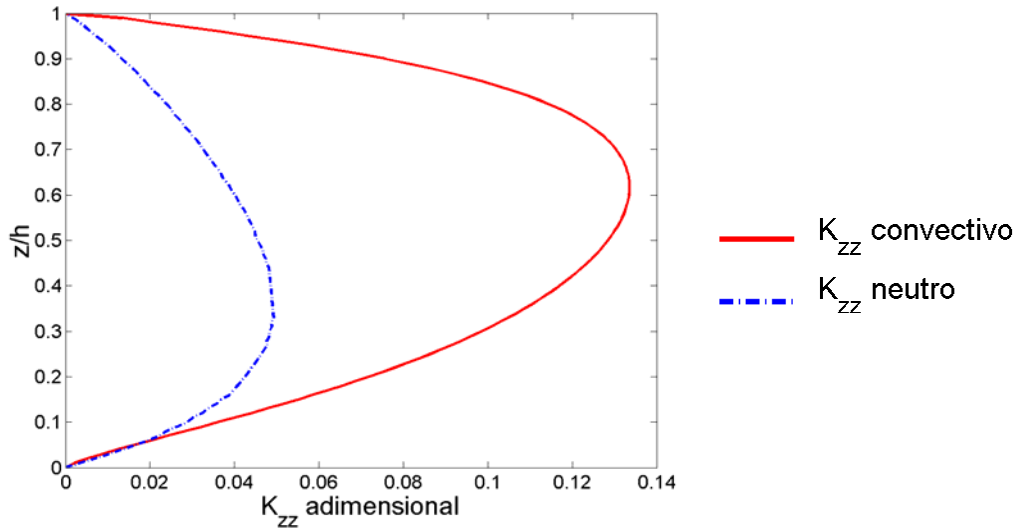


Figura 4.1 - Coeficiente de difusão adimensional sob condições de atmosfera neutra (K_{zz}/u_*h) e convectiva (K_{zz}/w_*h).

Segundo Beck et al. (1985) os problemas inversos podem ser classificados como problema de estimação de parâmetros ou de estimação de função. Neste trabalho, pretende-se estimar a função $K_{zz}(z)$. Para tanto, podem ser identificadas duas estratégias:

a) Estimando a função amostrada ou função discretizada:

$$\vec{\mathbf{K}} = [K_1, K_2, \dots, K_{Np}]^T \quad (4.2)$$

onde $K_i = K_{zz}(z_i)$

b) Estimando parâmetros:

Aproxima-se a função $K_{zz}(z)$ por:

$$K_{zz}(z) = \sum_{k=0}^{n_p} c_k \psi_k(z) \quad (4.3)$$

onde $\psi_k(z)$ são funções base conhecidas, c_k são os parâmetros da expansão. Nesta estratégia estima-se apenas os parâmetros da expansão:

$$\vec{c} = [c_1, c_2, \dots, c_{n_p}]^T \quad (4.4)$$

As duas estratégias apresentadas acima foram utilizadas na estimação do coeficiente de difusão vertical convectivo, com o método de otimização LM. Para os métodos QN e SA apenas a estratégia de estimar a função amostrada foi utilizada.

O objetivo do método LM é minimizar o seguinte funcional (eq. 3.11):

$$F(\vec{K}) = \sum_{i=1}^{N_s} [C_i^{Mod}(z, t, \vec{K}) - C_i^{Exp}(z, t)]^2 \quad (4.5)$$

onde N_s é o número de sensores em que a concentração foi medida ou calculada (neste experimento numérico, o número de sensores foi igual ao número de níveis em que a atmosfera foi discretizada, $N_s = N_z = 100$). Como apresentado na Seção 3.2.1, o método LM é formulado de tal forma que a solução é similar ao método de regularização dado por Tikhonov de ordem zero. No entanto, o fator de amortecimento é automaticamente ajustado a cada iteração, α^n , da eq. (3.23). Se o vetor coeficiente de difusão vertical convectivo, \vec{K} , na eq. (4.5), é descrito pela eq. (4.2), ou seja, pela estratégia de estimação da função amostrada, com $N_p = N_s$, o método LM é ineficiente para estimar o coeficiente de difusão para qualquer nível de ruído nos dados de concentração experimental. A Figura 4.2 ilustra o coeficiente de difusão estimado, onde a concentração experimental apresenta um ruído de 1 %. Quando, porém, o coeficiente de difusão é aproximado pela eq. (4.3) sendo a função de base, $\psi_k(z)$, dada pela base polinomial canônica,

$$\psi_k(z) = z^k, \quad (4.6)$$

e a função empregada é uma função quadrática ($n_p = 2$), o funcional, eq. (4.5), será função do vetor de parâmetros \vec{c} com apenas 3 elementos, $\vec{c} = [c_1, c_2, c_3]^T$.

Os resultados da estimação do coeficiente de difusão vertical convectivo com o método LM são satisfatórios dando uma idéia de que o método é relativamente insensível aos diferentes níveis de ruído nos dados de concentração, como mostram as Figuras, 4.3 a, b e c, sendo que na metade inferior da CLP, ($z < 0,5h$), o coeficiente estimado representa com

fidelidade o coeficiente exato. O método LM não consegue estimar da mesma forma o coeficiente para a metade superior da CLP, onde a difusividade exata vai a zero no topo, e o valor mínimo adimensional do coeficiente estimado é em torno de 0,05.

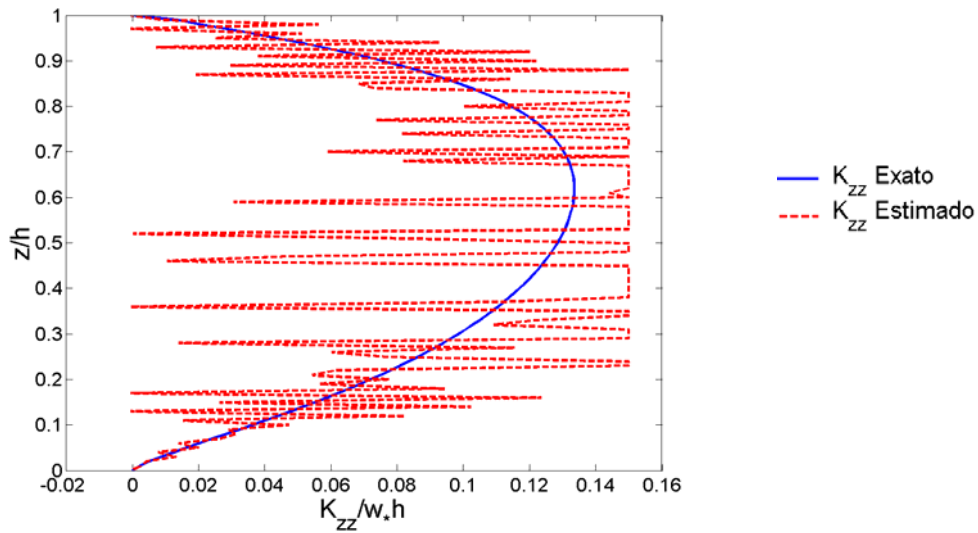


Figura 4.2 - Estimação do coeficiente de difusão vertical convectivo pelo método LM, através da estratégia de estimação de função amostrada.

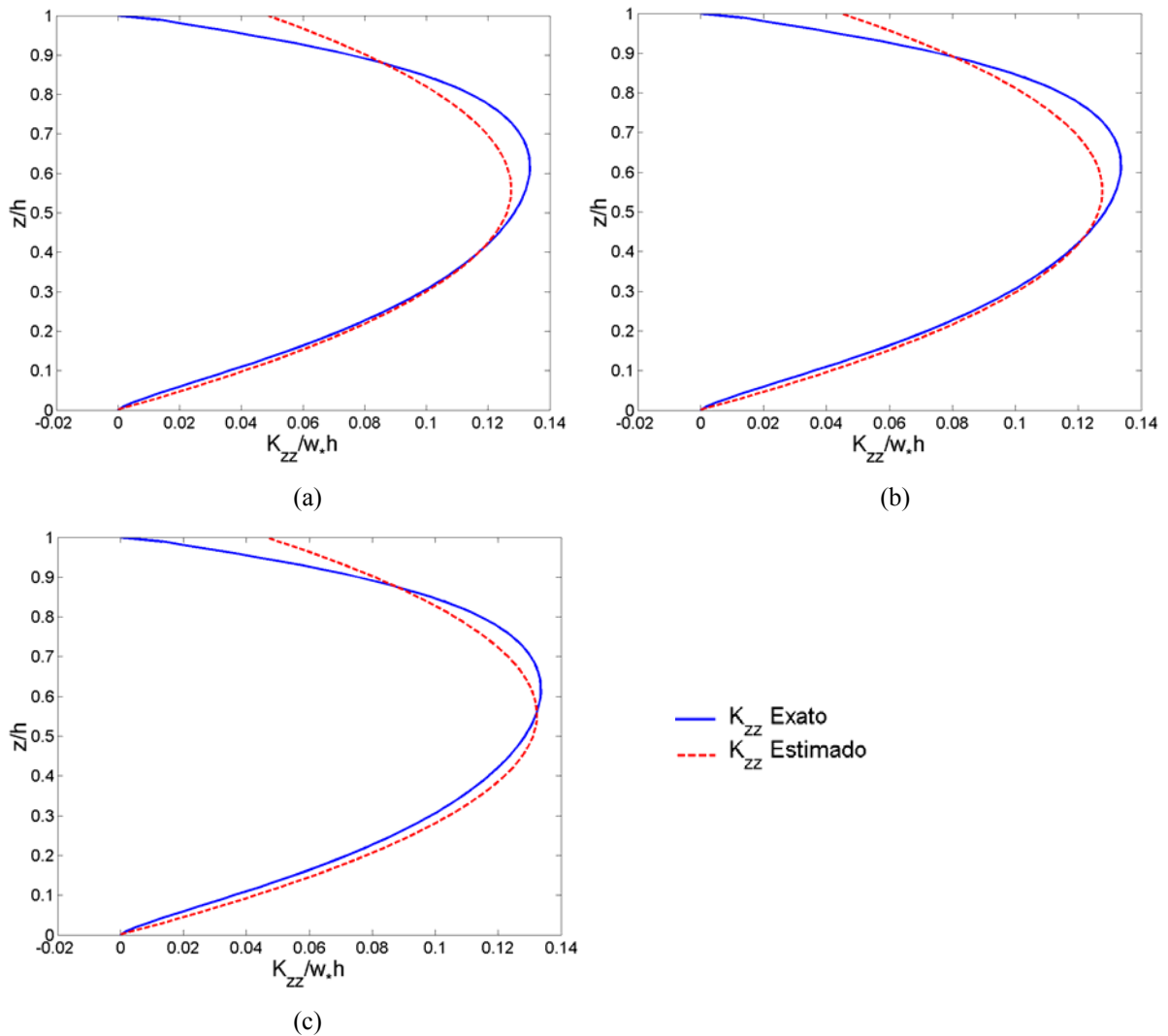


Figure 4.3 - Estimação do coeficiente de difusão vertical convectivo pelo método LM através da estratégia de estimação de parâmetros. O nível de ruído nos dados experimentais é de: (a) 1 %; (b) 2,5 % e (c) 5 %.

Através dos métodos QN e SA busca-se minimizar o seguinte funcional (eq. 3.12):

$$F(\alpha, \vec{\mathbf{K}}) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[C_i^{Mod}(z, t, \vec{\mathbf{K}}) - C_i^{Exp}(z, t) \right]^2 + \alpha \Omega(\vec{\mathbf{K}}) \quad (4.7)$$

onde α é o parâmetro de regularização, $\Omega(\vec{\mathbf{K}})$ é o operador de regularização. A estratégia adotada para estes dois métodos de otimização é a estimação da função amostrada, sendo $\vec{\mathbf{K}} = [K_1, K_2, \dots, K_{N_p}]^T$. Como apresentado anteriormente, $N_p = N_s$. O método de regularização utiliza o esquema de Máxima Entropia de ordem 2 (Seção 3.1).

As Figuras 4.4 e 4.5 apresentam a estimação da difusividade turbulenta convectiva pelos métodos QN e SA, respectivamente. Utilizando o método QN, boas soluções inversas foram obtidas, sendo que na metade inferior da CLP, ($z < 0,5h$), o coeficiente estimado por este método representa com fidelidade o coeficiente exato, reproduzindo o comportamento da solução estimada pelo método LM. Já próximo ao topo da CLP, o método não acompanhou a tendência do coeficiente de difusão exato em se anular. Quando o método de otimização utilizado é o SA as reconstruções da difusividade vertical convectiva não são satisfatórias, principalmente na zona central da CLP. De um modo geral, o aumento do nível de ruído na concentração experimental degradou a qualidade da inversão para ambos os métodos de otimização.

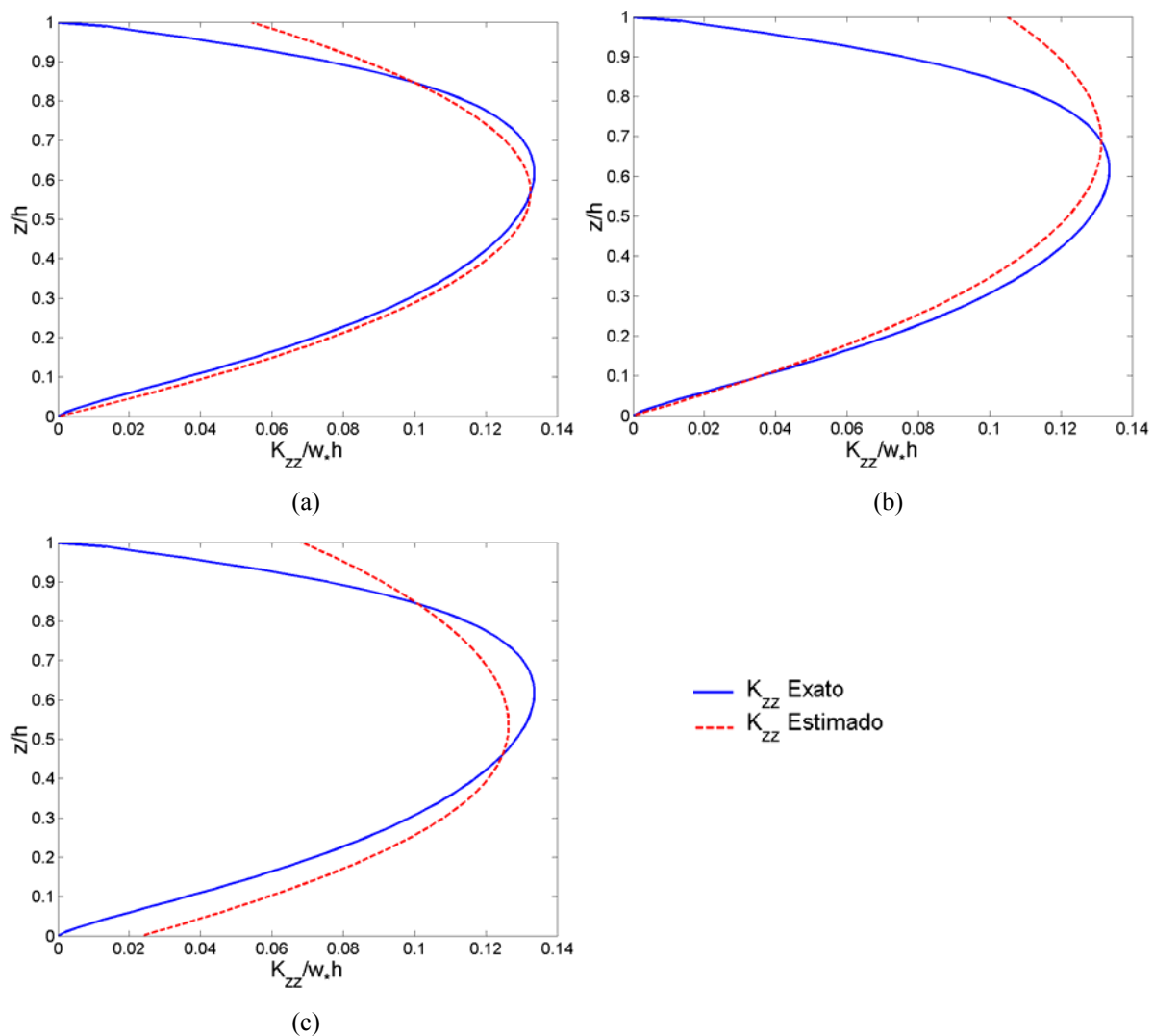


Figure 4.4 - Estimação do coeficiente de difusão vertical convectivo pelo método QN. O nível de ruído nos dados experimentais é de: (a) 1 %; (b) 2,5 % e (c) 5 %.

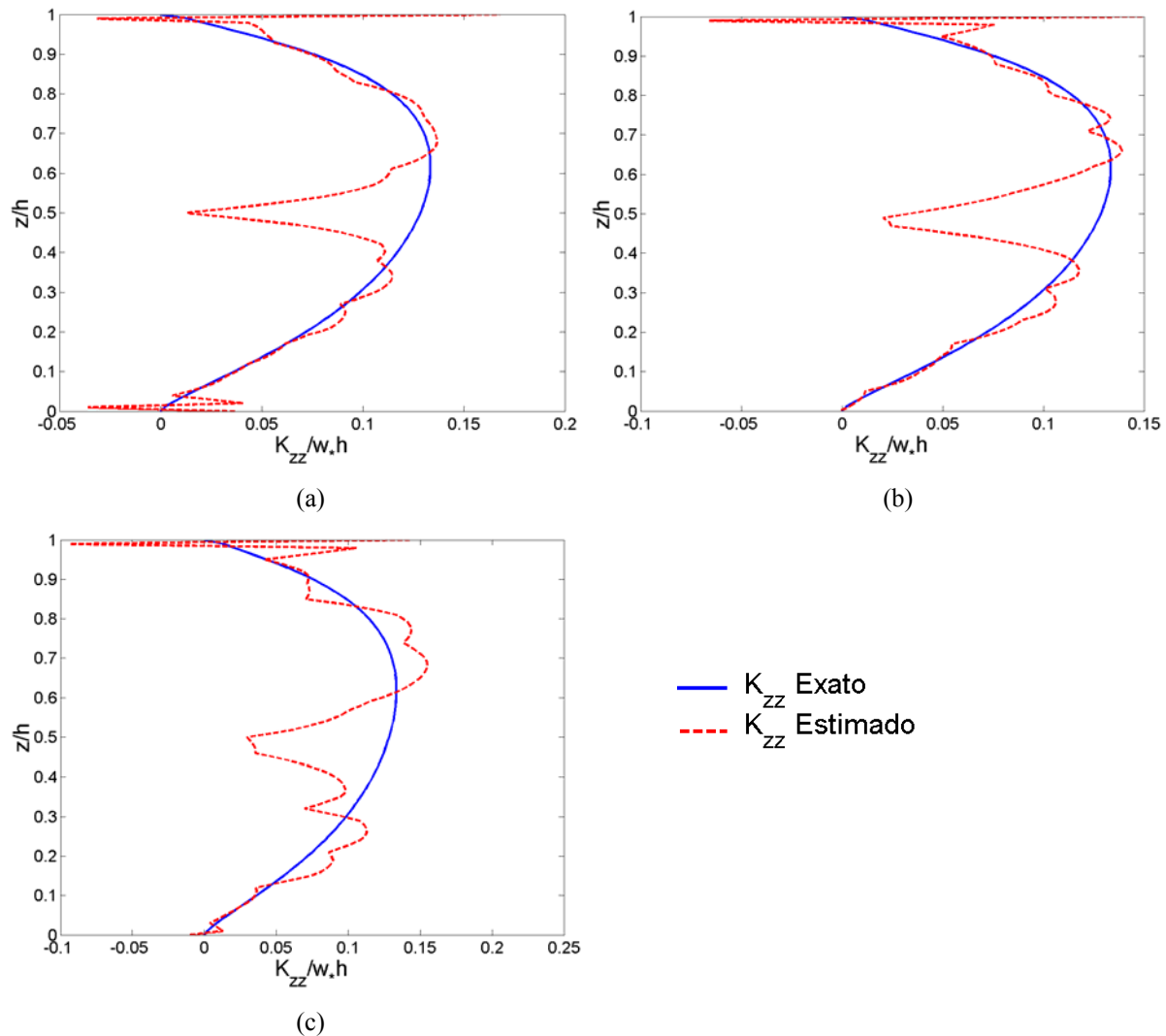


Figure 4.5 - Estimação do coeficiente de difusão vertical convectivo pelo método SA. O nível de ruído nos dados experimentais é de: (a) 1 %; (b) 2,5 % e (c) 5 %.

Uma forma quantitativa de avaliar a solução inversa é através do estudo do erro quadrático obtido entre o valor exato e o valor estimado da variável. O erro quadrático para as estimações do coeficiente de difusão convectivo vertical, para os métodos de otimização LM e QN e SA, são apresentados no Quadro 4.1. Nota-se o menor valor de erro quadrático para as soluções utilizando o método LM, no entanto este método utiliza a estratégia de estimação de parâmetros. Por outro lado, o método QN, mesmo estimando a função amostrada, apresentou um erro quadrático da mesma ordem de grandeza que o método LM para 1 % e 2,5 % de ruído nos dados experimentais. Entretanto a diferença entre estes dois métodos cresce significativamente em 5% de ruído. Dos resultados obtidos com o SA, o erro quadrático é, em geral, uma ordem de grandeza maior que para o LM e QN.

No Quadro 4.1 também é apresentado o número de iterações para a solução do problema inverso, na estimação do coeficiente de difusão convectivo vertical, para os três métodos utilizados. O método LM teve o menor custo computacional (ressalta-se que este método, aproximando o coeficiente de difusão por uma função quadrática de 2º ordem, estima apenas 3 parâmetros), enquanto que o método SA apresenta o maior custo computacional, onde o número de iteração é uma ordem de grandeza maior que o QN e quatro ordens maior que o LM. Ao analisar-se individualmente cada um dos métodos utilizados, observa-se que o custo computacional apresenta-se similar para diferentes níveis de ruído na concentração experimental.

Quadro 4.1 – Erro quadrático na estimação de K_{zz} convectivo $\left(\|K_{zz}^{exato} - K_{zz}^{estimado}\|_2^2 \right)$ e número de iterações para cada método de otimização, com diferentes níveis de ruído na concentração experimental.

Método de Otimização	$\ K_{zz}^{exato} - K_{zz}^{estimado}\ _2^2$			Número de Iterações		
	1 %	2,5 %	5 %	1 %	2,5 %	5 %
LM	436,2	397,9	396,6	73	68	78
QN	504,5	822,4	1239,7	12739	12293	15246
SA	4025,1	4852,9	5665,5	208238	174104	216054

Os mesmos procedimentos usados para a estimação do coeficiente de difusão vertical num caso de atmosfera sob condição convectiva foram usados na estimação sob condição neutra. O método LM foi utilizado para a estimar os parâmetros de uma função quadrática (a partir da eq. (4.3)) que se aproxime do coeficiente de difusão vertical neutro dado por Degrazia et al. (2000). Os métodos QN e SA foram utilizados na estimação da função amostrada. As Figuras 4.6, 4.7 e 4.8 ilustram os resultados da reconstrução do coeficiente de difusão vertical neutro comparativamente com o valor exato, quando os dados experimentais apresentam 1 %, 2,5 % e 5 % de ruído. Novamente boas estimativas foram obtidas com os métodos QN e LM, sendo os valores estimados similares. Ao contrário da solução inversa para o coeficiente de difusão vertical convectivo, onde a solução estimada representou fielmente o coeficiente exato na metade inferior da CLP para os método LM e QN, aqui uma reprodução bastante fiel ocorreu na parte superior da CLP ($z > 0,5h$) para estes dois métodos.

A tendência de K_{zz} em anular-se no solo, não foi reconstruída e a solução inversa encontrou um valor em torno de 0,02 para os dois métodos. A reconstrução com os dados obtidos com o método SA apresenta oscilações que determinaram uma estimativa pouco satisfatória do coeficiente de difusão vertical neutro. Para esta estimativa, o aumento do nível de ruído levou a uma degradação da estimativa do K_{zz} nos três métodos de otimização empregados.

O coeficiente de difusão estimado pelo método QN apresentou menor erro quadrático entre o valor exato e o valor estimado se comparado com o método LM, quando os dados experimentais apresentam um ruído de até 2,5 % (Quadro 4.2). Ao contrário, para valores de ruído de 5 % o método LM apresentou o menor erro. Já com o método SA, o erro quadrático foi de quase uma ordem de grandeza maior que os métodos QN e LM. O número de iterações utilizadas pelo método de otimização SA foi de quatro ordens de grandeza maior em relação ao LM e uma ordem maior que o QN. O método QN utiliza três ordens de grandeza mais iterações que o LM, indicando que este último apresenta um baixo custo computacional. Apesar disso, o método QN é mais eficiente para a estimativa do coeficiente de difusão vertical neutro, pois utiliza a estratégia de estimativa de função amostrada, diferentemente do método LM, que aproxima a função K_{zz} por uma função quadrática e minimiza o funcional para apenas 3 parâmetros.

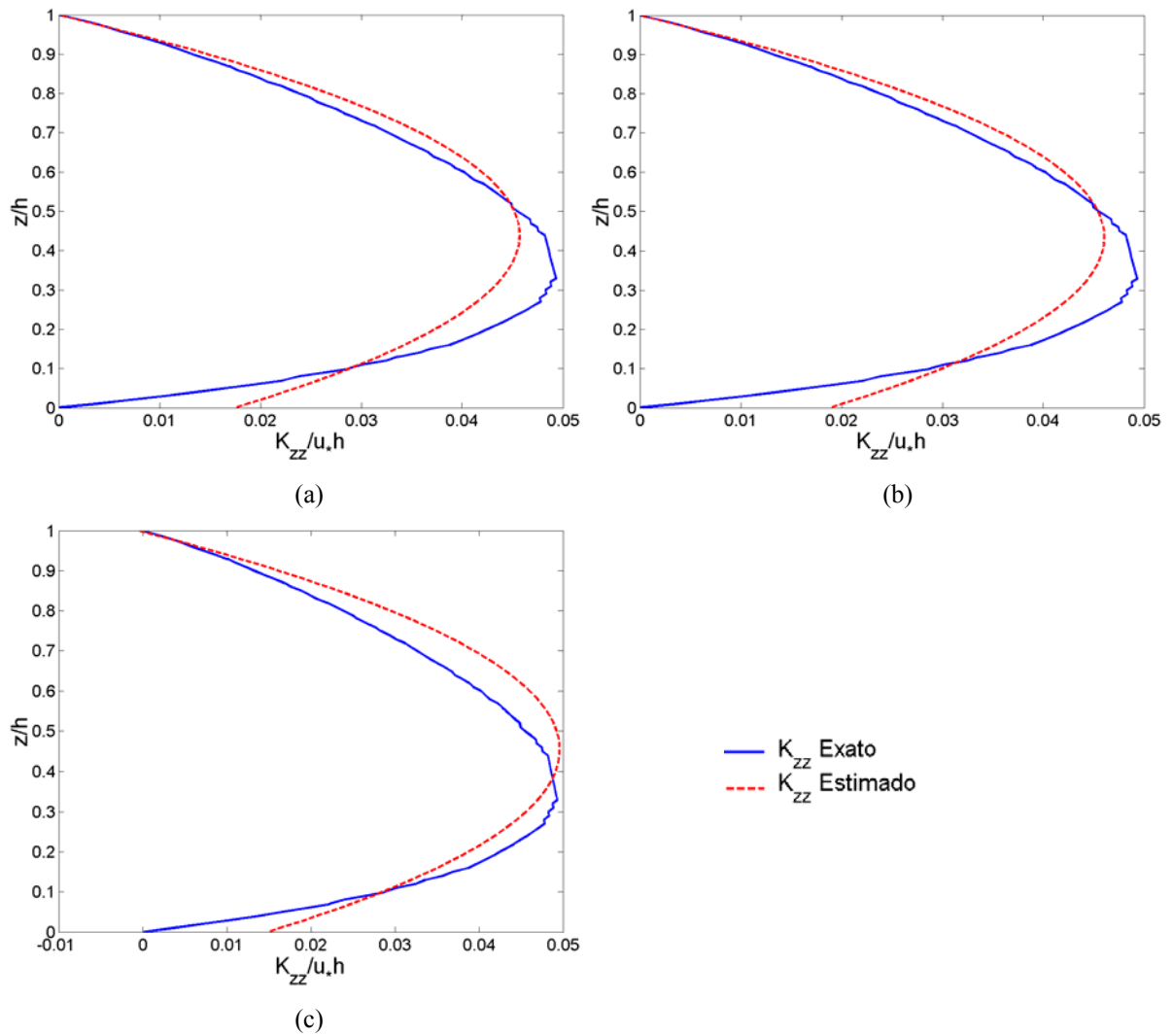


Figura 4.6 - Estimação do coeficiente de difusão vertical neutro pelo método LM. O nível de ruído nos dados experimentais é de: (a) 1%; (b) 2,5% e (c) 5%.

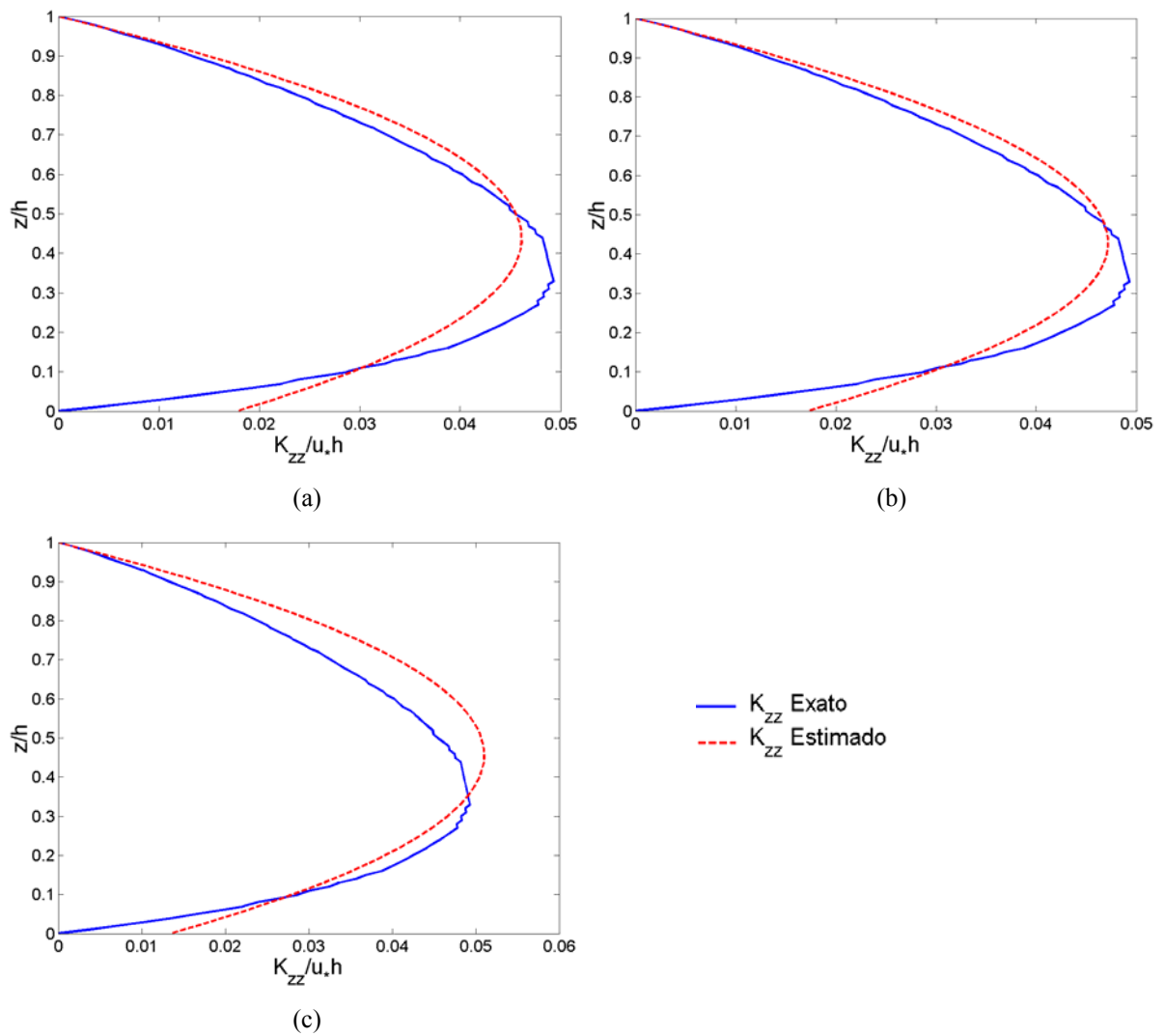


Figure 4.7 - Estimação do coeficiente de difusão vertical neutro pelo método QN. O nível de ruído nos dados experimentais é de: (a) 1 %; (b) 2,5 % e (c) 5 %.

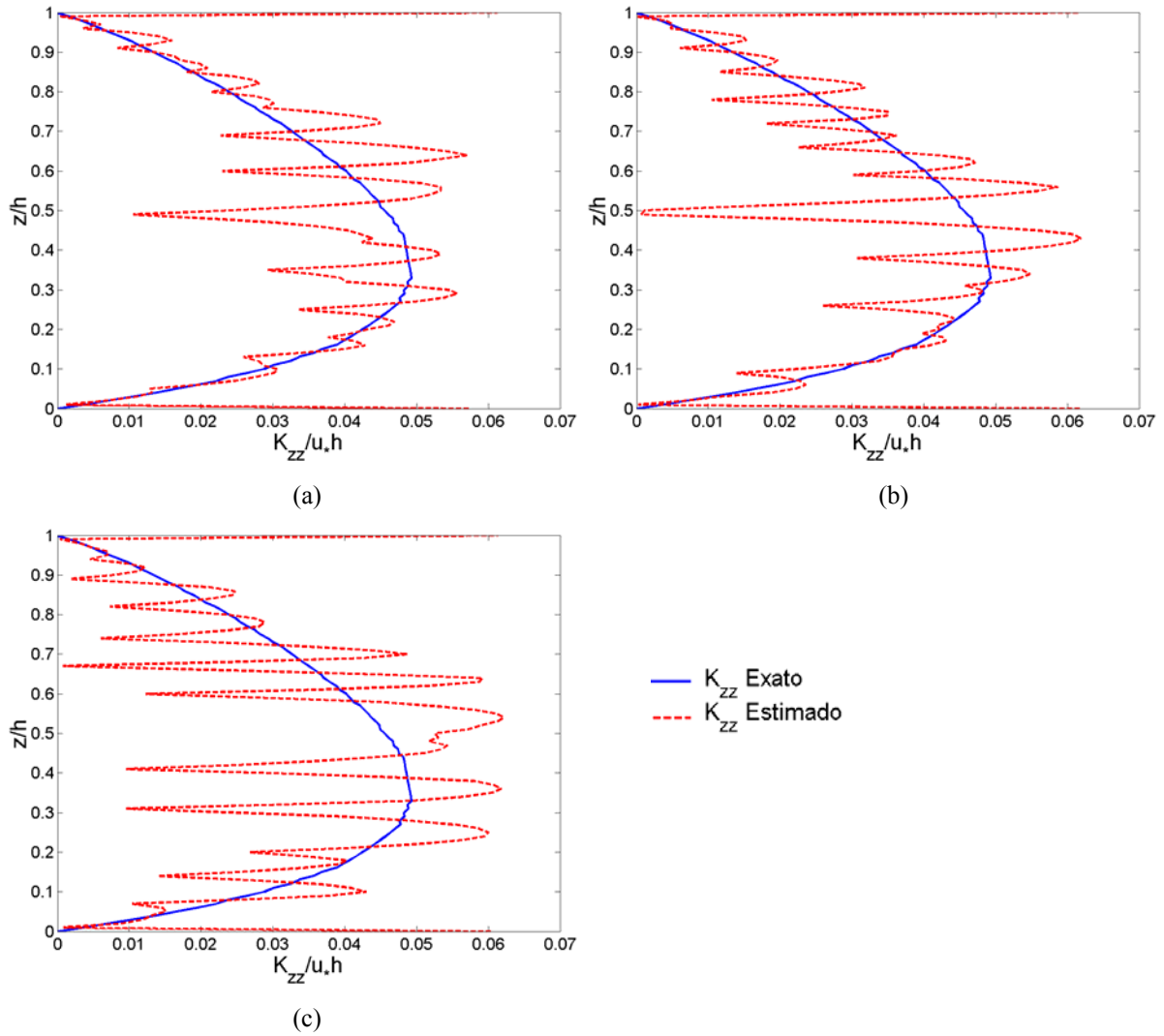


Figure 4.8 - Estimação do coeficiente de difusão vertical neutro pelo método SA. O nível de ruído nos dados experimentais é de: (a) 1 %; (b) 2,5 %; (c) 5 %.

Quadro 4.2 – Erro quadrático na estimação de K_{zz} neutro $\left(\left\| K_{zz}^{exato} - K_{zz}^{estimado} \right\|_2^2 \right)$ e número de iterações para cada método de otimização, para diferentes níveis de ruído na concentração experimental.

Método de Otimização	$\left\ K_{zz}^{exato} - K_{zz}^{estimado} \right\ _2^2$			Número de Iterações		
	1 %	2,5 %	5 %	1 %	2,5 %	5 %
LM	12,4	12,8	14,5	85	83	93
QN	11,7	10,2	17,2	14625	15604	14139
SA	85,4	83,3	132,6	331661	355146	296479

Conforme já mencionado no Capítulo 3, o parâmetro de regularização (α) deve ser escolhido adequadamente para reproduzir boas reconstruções. A Figura 4.9 ilustra a estimação do coeficiente de difusão convectivo vertical utilizando o método de otimização QN para diferentes quantidades de regularização, onde os dados experimentais apresentam 1 % de ruído. Na ausência de regularização, $\alpha \rightarrow 0$, a reconstrução pode apresentar desajustes de tal forma que não tenha significado físico, como mostra a Figura 4.9a. Se α tem um valor pequeno, oscilações espúrias podem aparecer na solução inversa (Figura 4.9b), enquanto que, se $\alpha \rightarrow \infty$ a otimização estará sempre voltada para o termo de regularização, (Figura 4.9d), ou seja, a inversão é artificialmente regularizada. Uma boa escolha deste parâmetro reproduzirá, então, uma boa reconstrução, como mostrado na Figura 4.9c. Nota-se a importância da escolha do parâmetro de regularização, o que, no entanto, esta não é uma tarefa simples, pois como mostra a eq. (4.7), o funcional a ser minimizado pelo método de otimização é também função deste parâmetro. Desta forma, o custo computacional real de cada método é muito maior, quando levado em conta que se deve fazer um catálogo com os diferentes parâmetros de regularização e seus resultados associados.

Para encontrarmos o melhor valor do parâmetro de regularização, que representa o melhor balanço entre a diferença quadrática (ou fidelidade entre os dados de concentração experimentais e obtidos pelo modelo matemático) e o termo de regularização (suavidade), utilizamos o procedimento de Hansen (Hansen, 1992). Nele, o melhor valor para o multiplicador de Lagrange é aquele que representa o ponto de máxima curvatura da curva fidelidade \times suavidade. A Figura 4.10 apresenta a curva-L para diferentes multiplicadores de Lagrange na estimação do coeficiente de difusão neutro vertical com o método QN, onde os dados experimentais apresentavam um ruído de 1 %. Verifica-se que $\alpha \approx 9 \times 10^7$ é uma boa escolha (conforme Figura 4.7a) pois é o ponto de maior curvatura. A aplicação deste método para todas as reconstruções de K_{zz} apresentadas nesta Seção, com os métodos QN e SA, está no Quadro 4.3.

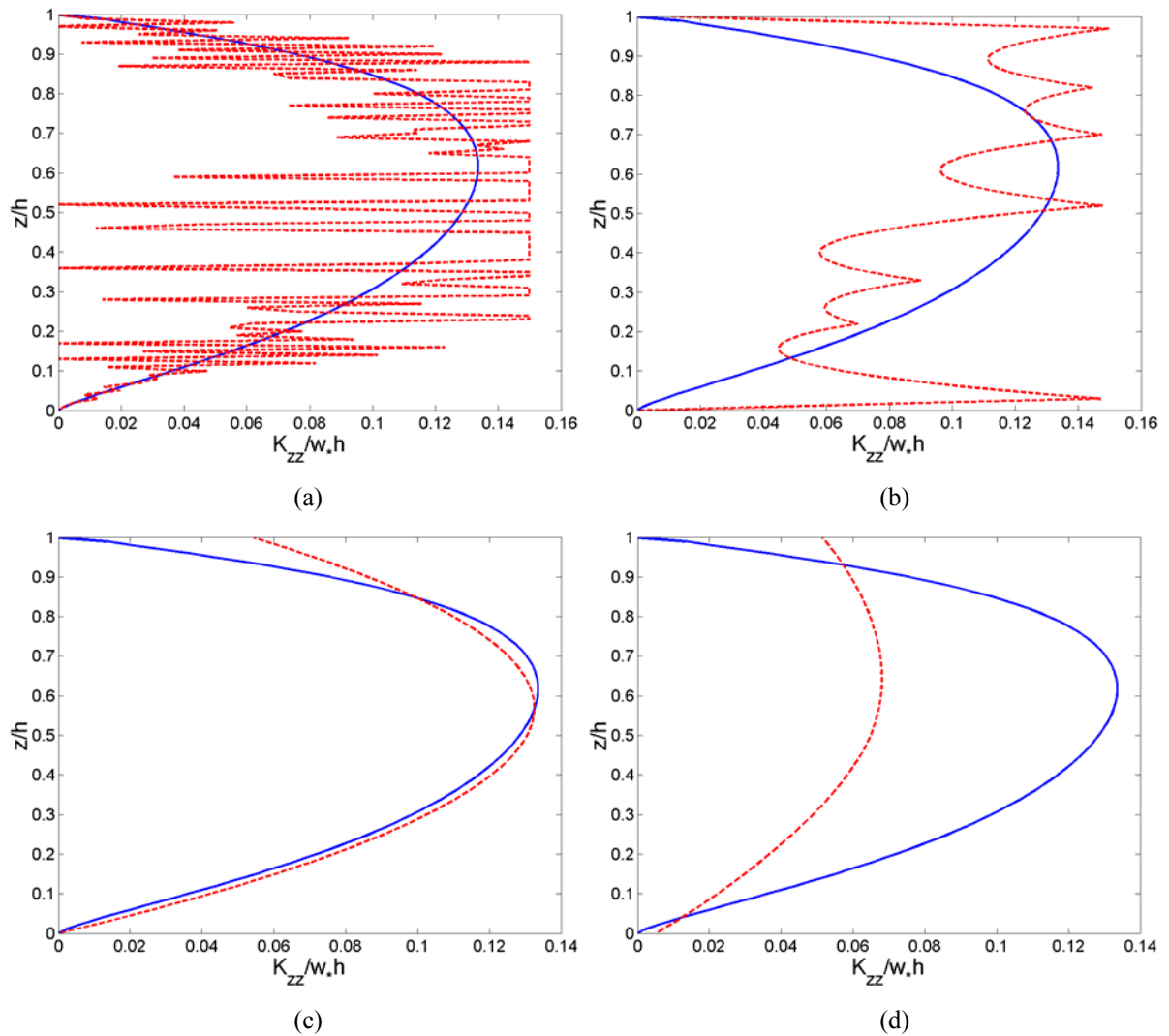


Figure 4.9 - Estimação do coeficiente de difusão convectivo vertical pelo método de otimização QN com 1 % de ruído nos dados experimentais, para diferentes quantidades de regularização: (a) sem regularização; (b) pouca regularização ($\alpha = 10^6$); (c) regularização correta ($\alpha = 10^7$); (d) muita regularização ($\alpha = 10^9$).

Quadro 4.3 - Valores numéricos do parâmetro de regularização (α) para a estimação do coeficiente de difusão vertical sob condição convectiva e neutra, para os métodos de otimização QN e SA, com diferentes níveis de ruído na concentração experimental.

Método de Otimização	Convectivo			Neutro		
	Nível de Ruído			Nível de Ruído		
	1 %	2,5 %	5 %	1 %	2,5 %	5 %
QN	10^7	$8,0 \times 10^6$	$9,0 \times 10^7$	$9,0 \times 10^7$	$1,5 \times 10^7$	$6,0 \times 10^7$
SA	80	70	70	125	100	120

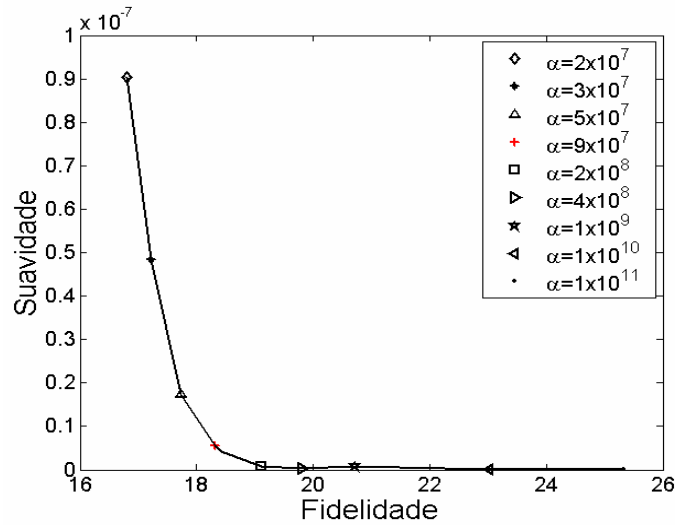


Figure 4.10 – Curva-L para a reconstrução do coeficiente de difusão vertical neutro com o método QN e com 1% de ruído na concentração experimental.

Dos resultados apresentados nesta seção pode-se concluir que o método QN é bastante robusto na estimação de funções, enquanto que o método LM não soluciona o problema quando se pretende estimar funções, mas apresenta bons resultados quando da estimação de parâmetros. O método SA responde de forma ineficiente a estimação de funções, provavelmente por apresenta vários parâmetros a serem ajustados (Seção 3.3.3). Desta forma, um estudo mais aprofundado das variáveis do método pode torná-lo eficiente para este fim.

4.2 Estimação do termo de contra-gradiente

Para a estimação do termo de contra-gradiente são utilizados dados sintéticos de concentração obtidos através dos resultados de uma simulação do modelo euleriano unidimensional, apresentado na Seção 2.11, da seguinte forma (Roberti et al., 2004a):

$$C^{Exp}(z,t) = C^{Mod}(z,t)[1 + \sigma\mu] \quad (4.8)$$

onde $C^{Mod}(z,t)$ é a solução do modelo euleriano, eq. (2.8), após um tempo de difusão de $t = 400$ s; $\sigma = 0,01; 0,025; 0,05$ corresponde a níveis de ruído de 1 %, 2,5 %, 5 %,

respectivamente e μ é uma variável aleatória com Função Densidade de Probabilidade do tipo $N(0, 1)$. Para o cálculo de $C^{Mod}(z, t)$, a seguinte discretização foi usada: $\Delta z = 10$ m com $N_z = 100$, e $\Delta t = 0.4$ s com $N_t = 1000$. A altura da CLP foi de $h = 1000$ m e para a escala de velocidade convectiva e velocidade de fricção os valores usados foram de $w^* = 0.6$ m s⁻¹ e $u^* = 1,8$ ms⁻¹, respectivamente. O coeficiente de difusão utilizado na simulação do experimento numérico é aquele fornecido por Degrazia et al. (2000), sob condição convectiva, e o termo de contra-gradiente usado é aquele descrito pela nova formulação (apresentada na Seção 2.4), (eq. 2.53 e 2.55), com a variância da velocidade, σ_w^2 , sugerida por Sorbjan (1989).

O problema inverso é formulado como um problema de otimização, onde é estimado o valor do termo de contra-gradiente, $\vec{\gamma}$, que minimiza o funcional (eq. 3.12):

$$F(\alpha, \vec{\gamma}) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[C_i^{Mod}(z, t, \vec{\gamma}) - C_i^{Exp}(z, t) \right]^2 + \alpha \Omega(\vec{\gamma}) \quad (4.9)$$

onde $\vec{\gamma} = [\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{N_p}]^T$. A estratégia adotada é a estimação da função amostrada, onde $N_p = N_s = 100$, e o método de otimização utilizado foi o Quase-Newton. Os melhores resultados para a estimação do termo de contra-gradiente foram obtidos com operador de regularização, $\Omega(\vec{\gamma})$, de segunda ordem de Tikhonov e de Máxima Entropia (Seção 3.2), sendo as reconstruções similares para os dois operadores. Nesta tese, somente reconstruções com o esquema de regularização de Máxima Entropia serão apresentados.

A Figura 4.11 mostra os resultados da inversão para diferentes níveis de ruído nos dados de concentração experimental. Bons resultados foram obtidos para a estimação do termo de contra-gradiente quando o nível de ruído foi de até 2,5 %. Para uma percentagem de 5 % a reconstrução apresenta uma pequena oscilação, tornando a inversão mais difícil. Salienta-se que a estimação para todas as percentagens de ruído não reproduz os pontos em que ocorrem discontinuidades em relação à primeira derivada existente na solução exata (próximo ao topo da CLP e próximo ao solo), sendo que o valor máximo encontrado nestas regiões foi entre 0,01 e 0,015 para todos os níveis de ruído. De uma forma geral, o método QN apresentou-se como um bom método para a estimação do termo de contra-gradiente para diferentes ruídos na concentração experimental.

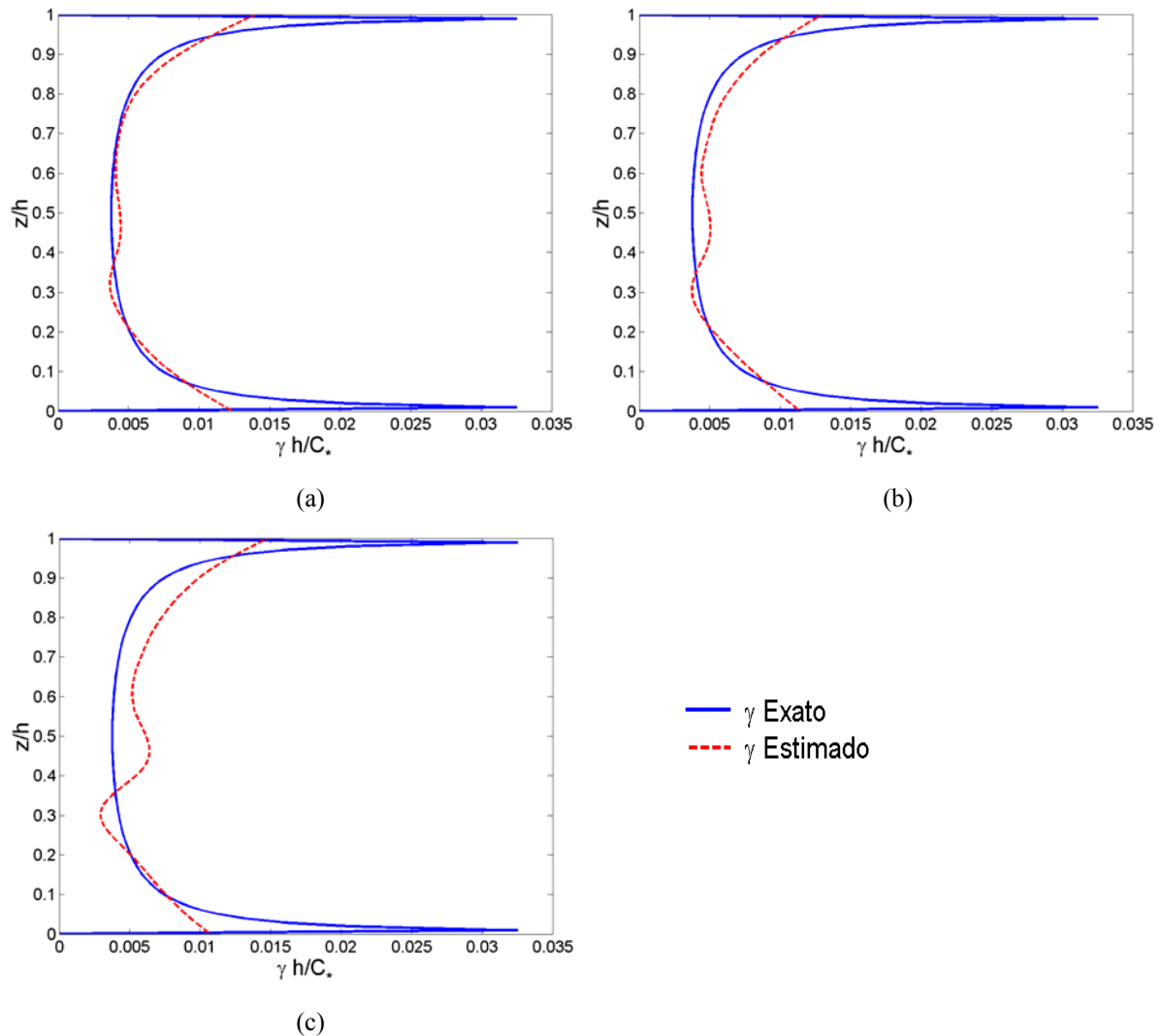


Figura 4.11 - Estimação do termo de contra gradiente pelo esquema de regularização de Máxima Entropia de Segunda Ordem no método de otimização QN. O nível de ruído nos dados experimentais é de: (a) 1 %; (b) 2,5 % e (c) 5 %.

Assim como no exemplo da seção anterior (seção 4.1), também aqui apresentaremos a influência do parâmetro de regularização para a solução do problema. A Figura 4.12 mostra a estimação para quatro diferentes valores do parâmetro de regularização. Quando $\alpha = 0$ ou é um valor pequeno em relação ao valor correto (nesta estimação $\alpha = 10^7$ é considerado um valor pequeno), oscilações aparecem na solução inversa (Figura 4.12a e b). Quando $\alpha \rightarrow \infty$, o termo de regularização domina a solução, o que torna a solução artificialmente regularizada (Figura 4.12d). Uma boa solução inversa é obtida com um valor apropriado de α , como mostrado na Figura 4.12c. Também aqui percebe-se a dificuldade em se obter soluções inversas coerentes, já que o parâmetro de regularização é de fundamental importância para uma estimação precisa ou ao menos, aceitável.

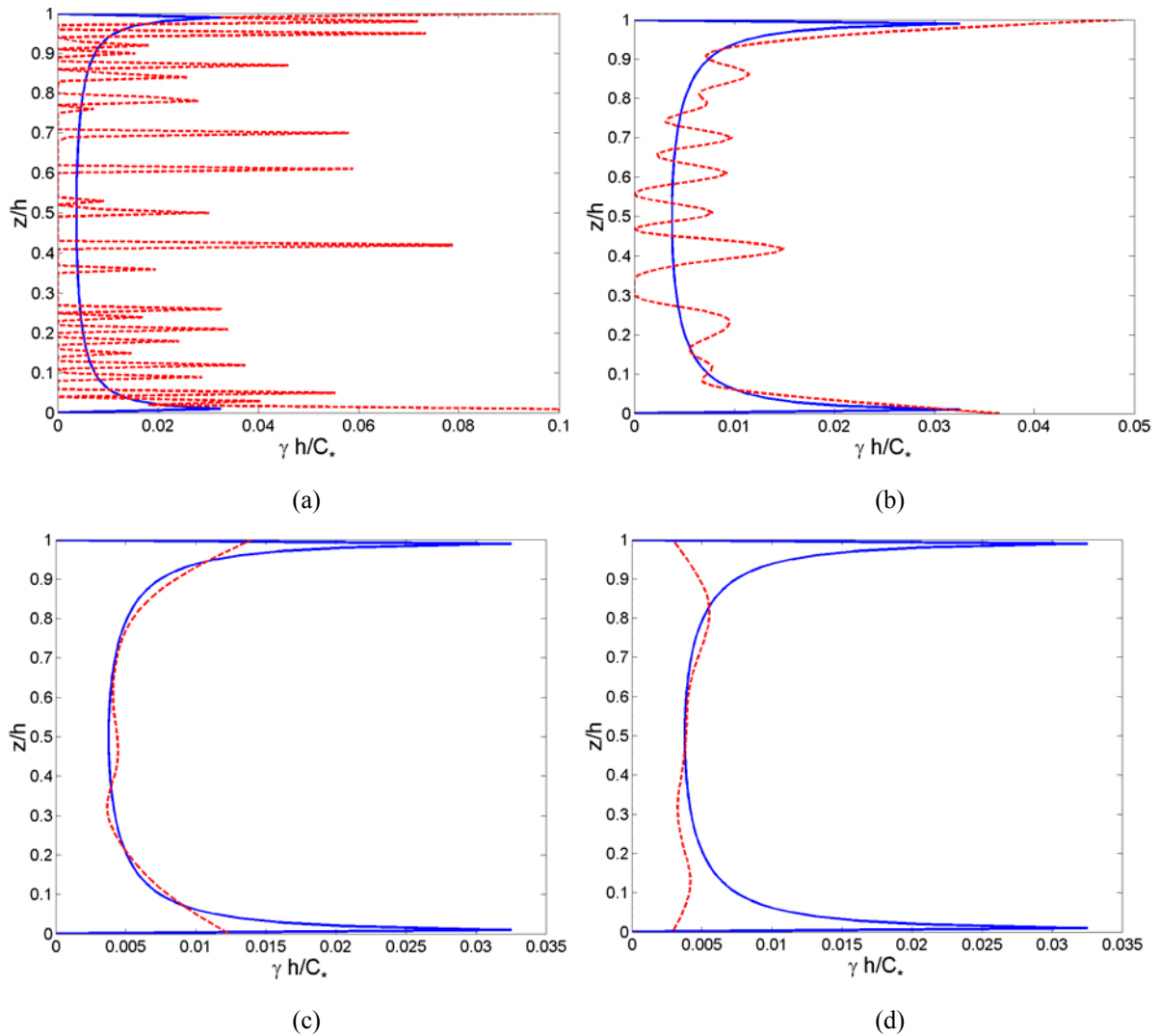


Figure 4.12 – Estimação do termo de contra-gradiente com 1 % de ruído nos dados experimentais, para diferentes quantidades de regularização: (a) sem regularização; (b) pouca regularização ($\alpha = 10^7$); (c) regularização correta ($\alpha = 2,5 \times 10^{10}$); (d) muita regularização ($\alpha = 1.29 \times 10^{11}$).

O parâmetro de regularização usado para a estimação do contra-gradiente apresentado na Figura 4.11 foi obtido pelo método da curva L (Hansen, 1992), onde o parâmetro de regularização, que descreve a melhor solução inversa, é dado pelo ponto de máxima curvatura da curva fidelidade \times suavidade. A Figura 4.13 apresenta a curva-L para diferentes valores do multiplicador de Lagrange, onde a concentração experimental apresentava 1 % de ruído. Os valores numéricos para o parâmetro de regularização usados nas reconstruções do termo de contra-gradiente foram de: $\alpha = 2,5 \times 10^{10}$ para a concentração experimental com 1 % de ruído, $\alpha = 4.5 \times 10^{10}$ para 2,5 % de ruído e $\alpha = 4 \times 10^{10}$ para 5 % de ruído.

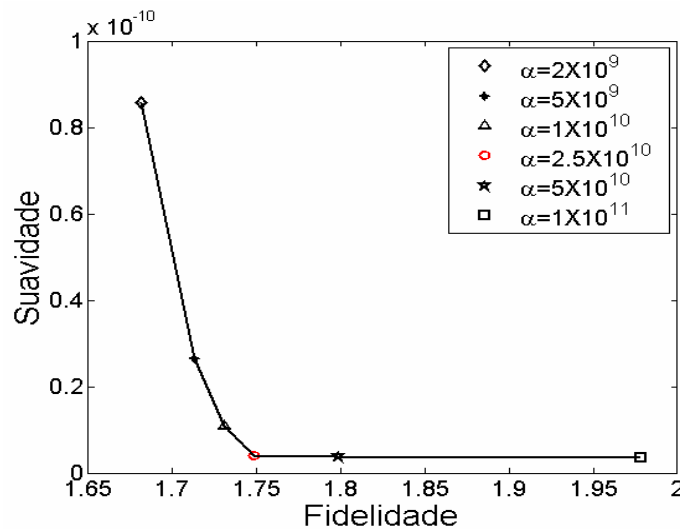


Figure 4.13 - Curva L para a reconstrução do termo de contra gradiente com 1% de ruído na concentração experimental.

O erro quadrático entre o termo de contra-gradiente exato e o estimado foi de $3,1 \times 10^{-5}$, $7,5 \times 10^{-5}$, $2,6 \times 10^{-4}$ para 1 %, 2,5 % e 5 % de ruído na concentração experimental, respectivamente. Estes valores são bastante próximos, corroborando as conclusões obtidas da Figura 4.11, que demonstraram que o método QN estima o termo de contra gradiente de forma eficaz para os diferentes níveis de ruído na concentração experimental.

O erro quadrático entre a aproximação sugerida nesta tese (eq. 2.53 e 2.55), com σ_*^2 dada por Degrazia et al (1997), γ_{DEA97} , e a formulação com σ_*^2 dada por Sorbjan (1989), γ_{SOR89} , é de $\|\gamma_{SOR89} - \gamma_{DEA97}\|_2^2 = 1,5 \times 10^{-4}$; com a formulação proposta por Holstlag & Boville (1993), γ_{HB93} , o erro foi de $\|\gamma_{HB93} - \gamma_{DEA97}\|_2^2 = 6,4 \times 10^{-4}$ e ainda com a formulação dada por Cuijpers & Holstlag (1998), γ_{CH98} , tem-se $\|\gamma_{CH98} - \gamma_{DEA97}\|_2^2 = 3,5 \times 10^{-4}$. Para o cálculo destes erros quadráticos, os primeiros e últimos 5 níveis da discretização do domínio não foram considerados. Observa-se que erro entre as diferentes formulações do termo de contra-gradiente são da mesma ordem, indicando que, embora obtidos de maneiras diferentes, eles produzem resultados semelhantes.

Ao compararmos, através do erro quadrático, diferentes parametrizações deste termo e as diferenças entre o termo estimado e exato, nota-se que a técnica de inversão não pode ser usada para selecionar a melhor parametrização para o termo de contra-gradiente, pois as diferenças entre o termo exato e o estimado são da ordem $\approx 10^{-5}$ para até 2,5 % de ruído na

concentração experimental e de $\approx 10^{-4}$ para 5% de ruído, mesma ordem da diferença entre as parametrizações.

CAPÍTULO 5

ESTIMAÇÃO DE FONTES DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Neste capítulo, estima-se o termo de fonte de contaminantes na atmosfera através do procedimento de inversão utilizando o modelo fonte-receptor Lagrangeano para seis diferentes casos :

- Caso 1:** Estima-se a intensidade de uma fonte pontual onde a posição é conhecida;
- Caso 2:** Estima-se a intensidade de uma fonte pontual que é função do tempo onde sua posição é conhecida;
- Caso 3:** Estima-se as intensidades de duas fontes pontuais contínuas, localizadas na mesma posição horizontal, mas em diferentes alturas;
- Caso 4:** Estima-se a intensidade de duas fontes: uma fonte de área e uma fonte de linha no mesmo domínio físico;
- Caso 5:** Estima-se fontes de área cujos subdomínios têm intensidades diferentes e variam no tempo;
- Caso 6:** Estima-se fontes de área em que a taxa de emissão varia com a posição; e ainda
- Caso 7:** Estima-se a dimensão horizontal de uma fonte de área.

Para a estimação da intensidade de fontes são utilizados dados experimentais reais do experimento de Copenhagem (Gryning & Lyck, 1984 e 1998) e de Karlsruhe (Thomas et al., 1983) nos Casos 1 e 2, respectivamente. O experimento de Karlsruhe também é utilizado para uma discussão da dificuldade em se utilizar dados experimentais. Para os demais casos utilizam-se dados sintéticos a partir de experimentos numéricos.

5.1 Dificuldades em se utilizar dados experimentais:

O uso de dados experimentais é essencial para testar metodologias de soluções de problemas diretos e inversos. Entretanto, um experimento controlado, com arquivos meteorológicos completos e campo de concentração detalhado, é difícil de ser encontrado na literatura. Um dos experimentos mais completos e disponível é o experimento de dispersão realizado no Karlsruhe Nuclear Research Center (KNRC) – Karlsruhe – Alemanha (Thomas et al., 1983). O KNRC situa-se no vale do Reno, que possui uma extensão lateral de aproximadamente 40 km, e é cercado por montanhas com altura de 300 a 400 m. Embora a região fosse plana, a rugosidade média de $z_0 = 1,5$ m foi estimada (Thomas & Nester, 1984). Dois contaminantes foram emitidos simultaneamente de duas alturas diferentes a partir de uma torre micrometeorológica de 200 m: difluorodibromometano (CF_2Br_2) a 195 m e triclorofluorcarbono ou Freon-11 (CFCl_3) a 160 m. A concentração dos gases ao nível do solo foi quantificada por sensores posicionados de acordo com a velocidade e direção do vento em 5 arcos concêntricos à fonte (de 500 m a 9 km de distância da fonte). As medidas foram feitas em 2 períodos de 30 min cada, após 1 hora do início da emissão dos contaminantes.

Além de dados de concentração para cada experimento, informações meteorológicas tais como: velocidade (U) e direção do vento (θ) medidos a 40, 60, 100, 160 e 200 m de altura; desvio padrão da direção do vento vertical (σ_ϕ) e horizontal (σ_θ) a 40, 100 e 160 m; temperatura (T) a 2, 30, 60, 100, 130, 160 e 200 m e radiação líquida (R_*) medida a 1,5 m do solo foram avaliadas e são apresentadas como médias de 10 min.

Dos vários experimentos da campanha, o experimento 72 foi particularmente interessante. Este experimento foi realizado com a participação de uma equipe de pesquisadores do Ispra Joint Research Center (IJRC) que emitiu, simultaneamente ao CF_2Br_2 (e na mesma posição, 195 m), o contaminante hexafluoreto de enxofre (SF_6). Cada equipe (do KNRC e do IJRC) dispôs de seu conjunto particular de sensores, localizados nas mesmas posições, para a coleta e análise independente das concentrações dos contaminantes ao nível do solo. E ainda, cada equipe escolheu uma posição em que utilizou dois sensores, a fim de obter duas medidas do mesmo gás na mesma posição (a equipe do IJRC escolheu a posição de sensor nº 8 e a equipe do KNRC escolheu a posição de sensor Nº 11). Deste procedimento é possível avaliar um erro experimental das medidas.

Os dados meteorológicos para o experimento 72, no período das 13:00 h às 14:00 h, são apresentados na Tabela 5.1, exceto a temperatura. A variância da velocidade do vento foi calculada da seguinte forma: $\sigma_u = \sigma_v = U\sigma_\theta$ e $\sigma_w = U\sigma_\phi$.

Tabela 5.1 - Dados meteorológicos do experimento de Karlsruhe (Experimento 72, 02/07/1980 – das 13:00 h às 14:00 h) (Thomas et al., 1983).

Parâmetro Meteorológico	z (m)	Horário (h:min)						
		13:00	13:10	13:20	13:30	13:40	13:50	
			13:10	13:20	13:30	13:40	13:50	14:00
Direção do Vento (°)	40	248	247	247	248	245	247	
	60	246	244	243	245	242	243	
	100	246	242	241	244	240	242	
	160	250	246	245	246	245	245	
	200	243	250	250	250	249	250	
Velocidade do Vento (ms ⁻¹)	40	7,1	7,9	7,3	6,9	7,1	6,5	
	60	8,1	8,9	8,5	8,4	8,3	7,9	
	100	9,4	10,5	10,4	9,9	10,1	9,6	
	160	11,2	12,6	12,2	12,2	11,9	11,8	
	200	12,2	13,4	13,3	13,3	13,0	13,0	
$\sigma_u = \sigma_v$ (ms ⁻¹)	40	1,67	1,79	1,68	1,69	1,72	1,58	
	100	1,12	1,25	1,25	1,26	1,30	1,27	
	160	0,94	0,99	0,92	0,96	0,89	0,89	
σ_w (ms ⁻¹)	40	1,29	1,35	1,25	1,24	1,31	1,19	
	100	1,00	1,15	1,11	1,12	1,18	1,14	
	160	0,80	0,88	0,81	0,83	0,79	0,78	
R_* (mJ/sm ²)	1,5	6	4	2	1	6	8	

A Tabela 5.2 apresenta as medidas experimentais, ao nível do solo, dos dois contaminantes medidos pelas duas equipes, os valores de fundo ou *background*, para ambos os gases, foram subtraídos de todos os valores de concentração observados. Os valores são

referentes a uma mesma intensidade de emissão de $20,7 \text{ gs}^{-1}$. Como os gases emitidos são inertes, ou seja, não reagem com os componentes do ar, é esperado que os valores de concentração para ambos os gases sejam iguais nos sensores da mesma posição, para uma mesma intensidade de emissão, uma vez que as condições atmosféricas foram as mesmas. No entanto este fato não foi observado, pois houve uma grande diferença entre os valores medidos pelas duas equipes, conforme pode-se notar na Figura 5.1 e nos dados da Tabela 5.2, onde o espalhamento entre os dados de CF_2Br_2 e SF_6 é ilustrado. A concentração medida pela equipe do IJRC (SF_6) superestima os valores medidos pela equipe KNRC (CF_2Br_2) em aproximadamente 90% dos sensores, sendo o erro fracional medido entre os dados de SF_6 e CF_2Br_2 de $\text{FB} = 0,21$ (uma descrição dos índices estatísticos usados nesta tese é encontrada no Anexo A). O sensor que mede a concentração do gás CF_2Br_2 parece ser insensível a valores de concentração abaixo de $2 \mu\text{g}$ ou o sensor medindo SF_6 tende a superestimá-la. Em geral, para valores de concentração acima de $2 \mu\text{g}$ as duas equipes obtiveram valores similares. Apenas nos sensores n° 14 e n° 19 a diferença entre a medida das duas equipes é superior a $4 \mu\text{g}$.

Com relação as posições em que haviam dois sensores medindo o mesmo gás é possível calcular um erro experimental. Dos valores coletados nos dois sensores da posição n° 8, pode-se estimar um erro da medida em torno de 30% para o contaminante SF_6 e dos valores encontrados nos dois sensores da posição n° 11 o erro foi de aproximadamente 20%. Esses valores foram calculados através da razão entre a diferença nas medidas e o valor médio. Este erro pode ser associado a vários fatores, entre eles o tipo de contaminante e o tipo de sensor, que pode apresentar problema de calibração pelo fabricante.

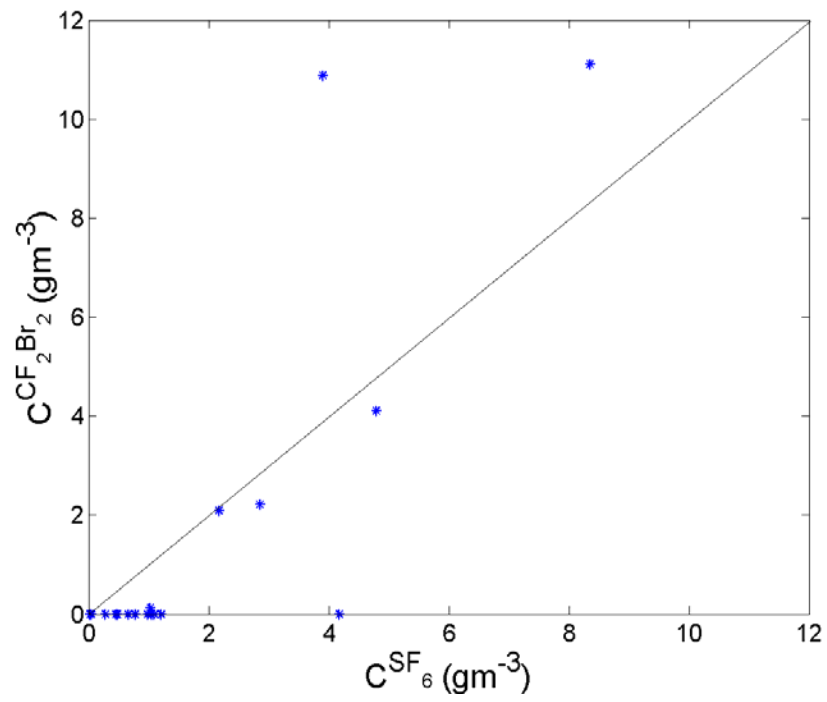


Figura 5.1 - Espalhamento entre as concentrações dos gases SF_6 (equipe do IJCR) e CF_2Br_2 (equipe do KNRC), medidas no experimento 72 de Karlsruhe

Tabela 5.2 - Dados experimentais da concentração dos contaminantes ao nível do solo no experimento de Karlsruhe.. O símbolo “<” significa que a medida foi menor que o valor de *background* ($0,04 \mu\text{g m}^{-3}$ para o CF_2BR_2 e $0,015 \mu\text{g m}^{-3}$ para o SF_6). Os valores entre parênteses representam a média dos dois valores medidos por cada equipe. $\vec{x} = (x, y)$ é a posição horizontal de cada sensores (Thomas et al., 1983).

N° do Sensor	x (m)	y (m)	C^{SF_6} ($\mu\text{g/m}^3$)	$C^{\text{CF}_2\text{Br}_2}$ ($\mu\text{g m}^{-3}$)
			IJRC	KNRC
1	604,5	493,9	0,456	<
2	663,6	387,3	0,048	<
3	696,3	260,9	0,278	<
4	1106,7	584,9	0,776	<
5	1243,6	145,3	1,095	<
6	594,2	1226,9	0,479	<
7	1433,4	1618,9	1,050	<
8	1818,6	1251,2	0,388-0,524 (0,456)	<
9	2200,3	481,1	0,662	<
10	2010,0	1162,4	2,853	2,213
11	2169,8	1036,2	4,793	4,511 - 3,697 (4,104)
12	3597,9	318,7	1,210	<
13	3853,1	1316,9	2,168	2,094
14	3915,9	1932,7	3,903	10,883
15	3806,3	2632,5	1,027	0,122
16	7707,3	1795,7	0,021	<
17	7432,0	3121,9	8,353	11,107
18	7056,1	4652,4	0,981	<
19	5315,4	6988,4	4176	<

Para avaliarmos a eficiência do modelo de partículas Lagrangeano LAMBDA em simular os resultados do experimento 72 de Karlsruhe, numa integração avançada, utilizamos os dados meteorológicos da Tabela 5.1. Thomas et al. (1983) classificam este experimento como neutro. O valor do comprimento de Monin – Obukhov (L) foi calculado através da seguinte equação:

$$L = -\frac{\bar{\theta} u_*^3}{kg(\overline{w\theta})} \quad (5.1)$$

onde $\bar{\theta}$ é a temperatura potencial (usamos um valor de 288), u_* é a velocidade de fricção, k é a constante de von Karman, g é a aceleração da gravidade e $\overline{w\theta}$ fluxo de calor na vertical, $\overline{w\theta} = (\rho c_p)^{-1} \frac{R_*}{2}$ (Anfossi et al., 1978), onde ρ é a densidade do ar, c_p calor específico.

Os valores de u_* e do perfil da velocidade do vento são obtidos da mesma forma que na Seção 2.5.1. A direção do vento foi interpolada linearmente entre 40 m e 200 m. De 0 a 40 m este valor foi mantido constante (igual ao valor de 40 m), o mesmo ocorrendo para alturas superiores a 200 m (até o topo da camada limite, h), onde o valor da direção do vento é considerado igual ao valor a 200 m. Para a altura da camada limite usamos $h = 500$ m, pois a condição atmosférica para este experimento foi considerada neutra (Thomas & Nester, 1984). O perfil vertical do desvio padrão da velocidade do vento e a escala de tempo lagrangeana são obtidos da parametrização sugerida por Degrazia et al. (2000) e a FDP escolhida foi a Gram-Charlier de ordem 3.

Um domínio computacional de $9 \text{ km} \times 9 \text{ km} \times 500 \text{ m}$ foi utilizado para a simulação, sendo que a fonte foi localizada na posição de coordenadas (200, 200, 195). Cem partículas foram emitidas de forma uniforme de um volume de $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m}$, que representa a fonte pontual, a cada passo de tempo por 3600 passos com $\Delta t = 1 \text{ s}$, ou seja, 1 h. Como as informações meteorológicas experimentais foram avaliadas a cada 10 min, todos os parâmetros meteorológicos, na simulação, são atualizados a cada 10 min, exceto h . Para garantir que todos os processos de transição tenham sido superados, 30 min de simulação (1800 passos) foram gastos. Isto garante que o tempo de relaxação tenha sido atingido. A concentração no solo é calculada 15 vezes em meia hora (a cada 2 min) e uma média, que representa a concentração ao nível do solo, é obtida da seguinte maneira:

$$C_j^{Mod}(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{1}{15} \sum_{n=1}^{15} C_j(\bar{\mathbf{x}}, n) \quad (5.2)$$

onde $\bar{\mathbf{x}}$ é o vetor posição de cada sensor, descritos na segunda e terceira colunas da Tabela 5.2 e j é o número do sensor, $j = 1, 2, \dots, 19$. A concentração em cada sensor no n -ésimo passo no tempo é calculada a partir da eq. (2.46), considerando $i = 1$, pois trata-se de apenas uma fonte:

$$C_j(\bar{\mathbf{x}}, n) = \frac{Q}{V_{s,j} N_{PEF}} \Delta t N_{PVS,j,n} \quad (5.3)$$

onde a intensidade da fonte foi de $Q = 20,7 \text{ gs}^{-1}$ e o número de partículas fictícias emitidas da fonte ($N_{PEF}=100$) a cada Δt . $N_{PVS,j,n}$ é a quantidade de partículas fictícias no volume do j -ésimo sensor no n -ésimo passo no tempo, sendo $V_{s,j} = (50 \text{ m} \times 50 \text{ m} \times 10 \text{ m})$ o volume do j -ésimo sensor centrado em $\bar{\mathbf{x}}$.

As isolinhas de concentração do contaminante, ao nível do solo, geradas pela simulação do modelo LAMBDA-avançado, são apresentadas na Figura 5.2 e demonstram que o modelo reproduz o comportamento esperado para uma atmosfera sob condições de estabilidade neutra, ou seja, a pluma não apresenta uma abertura lateral muito grande. Os valores de concentração nos sensores quantificados no experimento de Karlsruhe e os gerados pelo modelo Lagrangeano são apresentados na Tabela 5.3. Estes valores são representados graficamente na Figura 5.3 para ilustrar o espalhamento entre os dados experimentais dos gases e os dados simulados pelo modelo. Nota-se que os dados de CF_2Br_2 apresentam um menor espalhamento em relação aos dados simulados, podendo significar que a pluma gerada por este contaminante se aproxima da pluma apresentada na Figura 5.2, já que os máximos de concentração para este gás estão nos sensores 10, 11, 13, 14 e 17, justamente onde o modelo Lagrangeano encontrou o centro da pluma. Analisando os dados de SF_6 (da Tabela 5.3), parece que a pluma gerada por este toca o solo antes da pluma de CF_2Br_2 , pois encontramos concentração deste gás nos sensores próximos à fonte (1, 2, 3, 4, 5 e 6). No entanto, o índice estatístico que avalia o comportamento desta dispersão, desvio fracional padrão, FS, dá um valor maior para CF_2Br_2 (0,795) que para o SF_6 (0,348). No Anexo A, discute-se que este índice deve ser analisado com restrições, pois podem existir casos onde as concentrações simuladas e experimentais são diferentes e a dispersão em torno da média serem iguais.

Entretanto, analisando o erro fracional, FB, entre os dados experimentais e simulados de SF₆ tem-se 0,882 e para os dados de CF₂Br₂, 0,774, confirmando que a simulação apresenta um maior desajuste em relação aos dados de SF₆. Nos dois casos, no entanto, o modelo Lagrangeano subestima a concentração experimental e a correlação entre estes dados é de COR = 0.554 e 0.731 em relação aos dados de SF₆ e CF₂Br₂, respectivamente.

O valor do erro quadrático médio normalizado (NMSE) entre as concentrações medidas e simuladas é bastante elevado, (3,34 para o SF₆ e 6,31 para o CF₂Br₂), sendo que o mesmo erro entre os dados experimentais é muito menor, 1,47. Quando se representa as concentrações dadas pelo modelo e os valores medidos experimentalmente, com a faixa de erro de 20% para o CF₂Br₂ e 30% para o SF₆ (Figura 5.4), pode-se concluir que o modelo apresenta 85% dos resultados dentro da margem de erro das medidas. Apenas nos sensores 13, 15 e 17 a concentração calculada pelo modelo está fora das margens de erro. Isto sugere que o modelo LAMBDA numa integração avançada foi capaz de reproduzir o comportamento geral observado no experimento de difusão 72 de Karlsruhe.

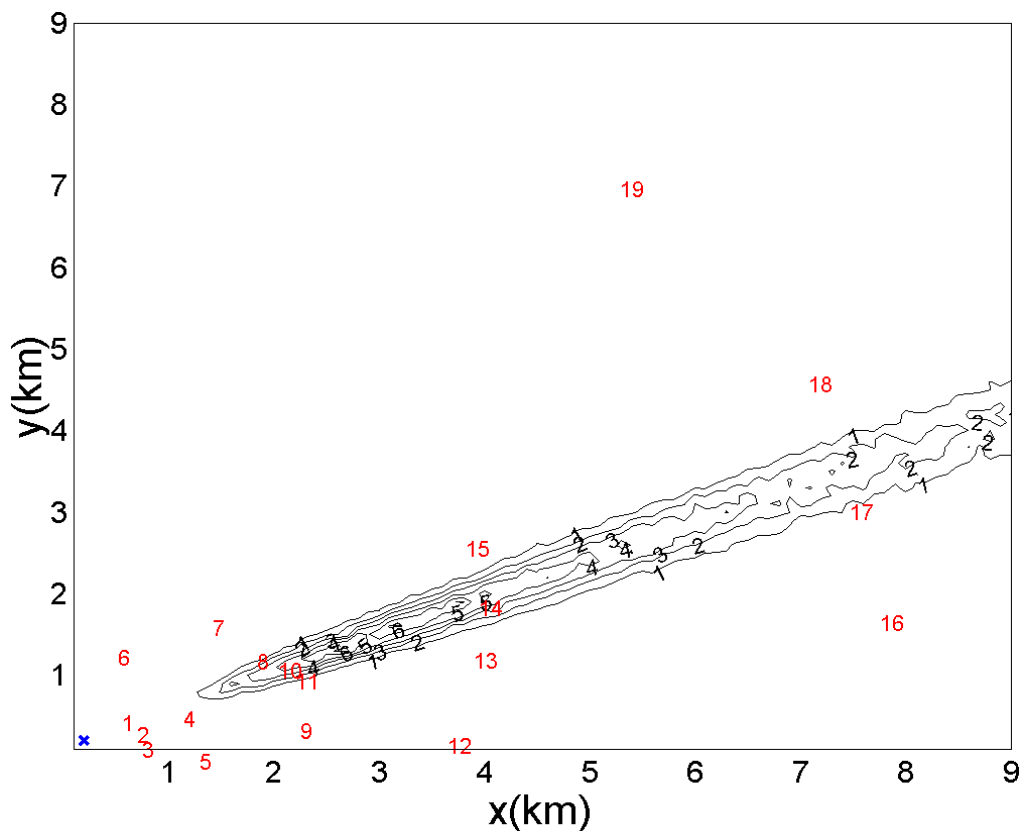


Figura 5.2 - Isolinhas de concentração de contaminantes ao nível do solo (em μg), obtidas pelo modelo LAMBDA para os dados do experimento 72 de Karlsruhe, onde \times em azul representa a posição horizontal da fonte (200, 200). Os números em vermelho representam as posições dos sensores.

Tabela 5.3 - Dados experimentais de concentração de contaminantes ao nível do solo no experimento 72 de Karlsruhe e dados simulados pelo modelo LAMBDA, C^{Mod} , com a parametrização da turbulência dada por Degrazia et al. (2000). Os valores considerados abaixo do background na Tabela 5.2, “>”, aqui são descritos como zero.

Sensor	C^{SF_6} ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) IJRC	$C^{CF_2Br_2}$ ($\mu\text{g}/\text{m}^3$) KNRC	C^{Mod} ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	0.456	0.000	0.000
2	0.048	0.000	0.000
3	0.278	0.000	0.000
4	0.776	0.000	0.378
5	1.095	0.000	0.000
6	0.479	0.000	0.000
7	1.050	0.000	0.000
8	0.456	0.000	0.130
9	0.662	0.000	0.000
10	2.853	2.213	2.845
11	4.793	4.104	3.842
12	1.210	0.000	0.000
13	2.168	2.094	0.026
14	3.903	10.883	5.082
15	1.027	0.122	0.000
16	0.021	0.000	0.000
17	8.353	11.107	1.194
18	0.981	0.000	0.000
19	4.176	0.000	0.000

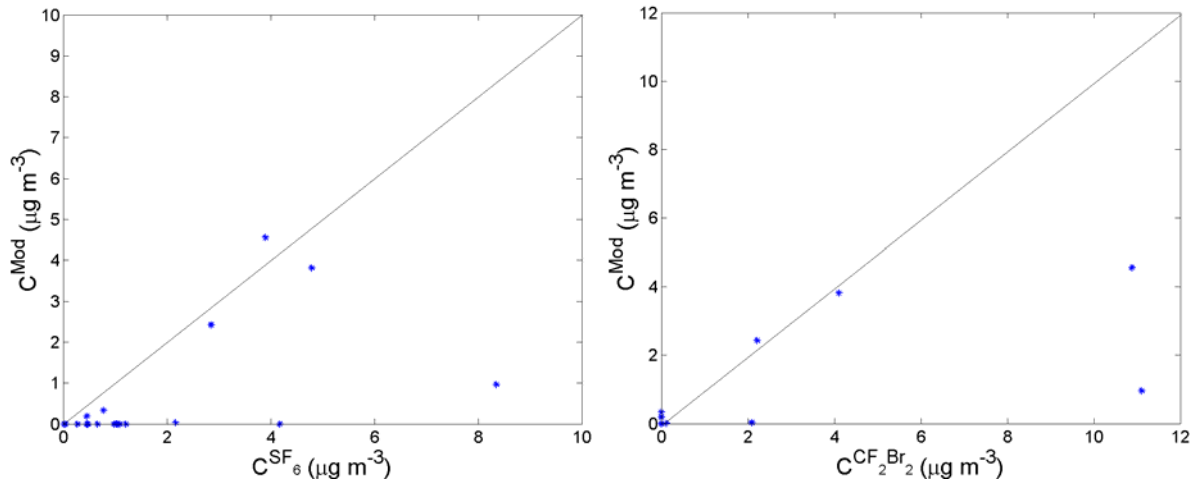


Figura 5.3 - Espalhamento entre os dados de concentração dos gases SF_6 e CF_2Br_2 do experimento 72 de Karlsruhe e simulados pelo modelo LAMBDA avançado.

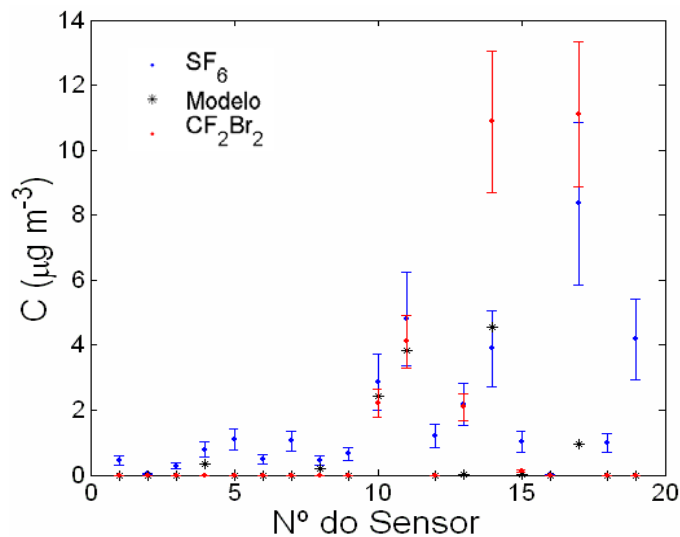


Figura 5.4 - Concentração dos contaminantes ao nível do solo medidos no experimento 72 de Karlsruhe e simulados pelo modelo LAMBDA avançado. Junto aos dados experimentais, é acrescida a barra de erro calculada para cada contaminante (erro $\text{SF}_6 = 30\%$; erro $\text{CF}_2\text{Br}_2 = 20\%$)

5.2 CASO 1: Estimação da intensidade da fonte para o experimento de Karlsruhe

Um experimento numérico foi realizado com os mesmos dados meteorológicos do experimento Karlsruhe (descrito na Seção 5.1) e usando o mesmo cenário computacional. Três diferentes séries de dados de concentração são gerados a partir de diferentes níveis de ruído. Os dados experimentais para cada experimento numérico são calculados pela eq. (4.1):

$$C_j^{Exp}(\vec{\mathbf{x}}) = C_j^{Mod}(\vec{\mathbf{x}})[1 + \sigma\mu], \quad (5.4)$$

onde $C_j^{Mod}(\vec{\mathbf{x}})$ são os dados apresentados na Tabela 5.3 (C^{Mod}) e $\sigma = 0,1; 0,2$ e $0,3$, representando 10, 20 e 30% de ruído, que serão designados Experimentos 1, 2 e 3, respectivamente. O valor exato da intensidade da fonte Q é $20,7 \text{ g s}^{-1}$.

Para a estimação da intensidade de emissão da fonte pontual contínua destes experimentos numéricos, utilizamos a metodologia de problema inverso dada pela eq. (3.12):

$$F(\alpha, \mathbf{Q}) = \sum_{j=1}^{19} \left[C_j^{Mod}(\mathbf{Q}) - C_j^{Exp} \right]^2 + \alpha \Omega(\mathbf{Q}), \quad (5.5)$$

onde vetor \mathbf{Q} representa a intensidade de uma única fonte pontual contínua, $\mathbf{Q} = [Q]$. Para estimar o valor de Q , que representa a solução ótima do funcional eq. (5.5), utilizamos o método de otimização Levenberg-Marquardt (LM), sendo $\alpha = 0$. Os resultados da estimação da intensidade da fonte são apresentados na Tabela 5.4. O erro, E_Q , entre o valor da intensidade da fonte estimada e o valor exato foi calculado da seguinte forma:

$$E_Q = \frac{|Q^{estimado} - Q^{exato}|}{Q^{exato}}. \quad (5.6)$$

O erro calculado entre o valor estimado e o valor real é de 2% quando o ruído é de 30%, reduzindo-se a apenas 0,6% quando o ruído tem nível de 10%. Destes resultados nota-se a eficiência do método de estimação da intensidade de fonte quando um ruído bastante elevado (até 30%) está presente nos dados experimentais.

Tabela 5.4 - Estimação da intensidade da fonte para os Experimentos Numéricos 1, 2 e 3 com o método de otimização de LM

Experimento	$Q^{exato} \text{ (gs}^{-1}\text{)}$	$Q^{estimado} \text{ (gs}^{-1}\text{)}$	E_Q
1	20,7	20,6	0.6%
2	20,7	20,4	1.4%
3	20,7	20,3	2%

A equação (5.4), com $\alpha = 0$, pode ser utilizada para a estimação da intensidade de emissão da fonte do experimento de Karlsruhe, onde C_j^{Exp} são os dados experimentais reais do experimento 72 (Tabela 5.2) para SF₆ ou CF₂Br₂. Os valores estimados pela metodologia de problema inverso, eq. (5.4), para a intensidade da fonte no experimento Karlsruhe são apresentados na Tabela 5.5. Para estas soluções inversas, um erro de 80% entre a intensidade de emissão exata e a estimada com os dados de CF₂Br₂ foi obtida e de 11,5% para os dados de SF₆. Embora um erro experimental maior foi determinado para os dados de SF₆ (30%), a utilização destes dados para a minimização do funcional, eq. (5.5), apresentou o menor erro na solução inversa. Talvez esta diferença esteja ligada ao fato de que apenas 32% dos sensores medindo CF₂Br₂ apresentou valores diferentes de zero, enquanto que todos os sensores medindo o contaminante SF₆ obtiveram valores não nulos.

Um teste utilizando os métodos de otimização QN e AS obtiveram praticamente os mesmos resultados da Tabela 5.5. Aqui apresentamos apenas os resultados com o método LM por este apresentar um menor custo computacional, resolvendo este problema com apenas 6 iterações.

Tabela 5.5- Estimação da intensidade da fonte a partir dados de concentração medidos no experimento de Karlsruhe para os contaminantes SF₆ e CF₂Br₂, utilizando o método de otimização de LM.

C^{Exp}	$Q^{exato} (gs^{-1})$	$Q^{estimado} (gs^{-1})$	E_Q
SF ₆	20,70	23,37	11,5%
CF ₂ Br ₂	20,70	37,34	80,4%

Para estimar a intensidade da fonte para um problema em que apenas uma fonte está presente, o método explícito apresentado na Seção 3.1 pode ser usado, reescrevendo a eq. (3.8) temos:

$$|S| = \frac{\|\vec{C}^{Exp}\|}{\|\vec{C}^{Mod} (S = 1)\|} \quad (5.7)$$

Para uma fonte pontual contínua pode-se escrever ($S = QV_f$):

$$|Q| = \frac{\|\vec{C}^{Exp}\|}{\|\vec{C}^{Mod} (Q=1)\|}. \quad (5.8)$$

A estimação da fonte pode ser obtida resolvendo-se a eq. (5.8) pela Norma-1 e Norma- ∞ (Capítulo 3). Os resultados obtidos utilizando estas duas formas de cálculo da norma são apresentados na Tabela 5.6. O erro encontrado entre os valores de intensidade de fonte exata e estimada, demonstram a ineficiência deste método em obter soluções aceitáveis para a intensidade de emissão de uma fonte pontual, pois utilizando-se da Norma-1 o erro é sempre maior que 120% e para a Norma- ∞ este valor é superior a 500%. Desta forma, nota-se a forte dependência deste método em relação à norma utilizada.

Tabela 5.6 - Estimação da intensidade da fonte a partir dos dados de concentração medidos no experimento de Karlsruhe para os contaminantes SF₆ e CF₂Br₂, utilizando a eq. (5.8) resolvida pela Norma-1 e Norma- ∞ .

C^{Exp}	$Q^{exato} (gs^{-1})$	$\ \cdot\ _1$		$\ \cdot\ _\infty$	
		$Q^{estimado} (gs^{-1})$	E_Q	$Q^{estimado} (gs^{-1})$	E_Q
SF₆	20,7	53,35	157%	144,76	599%
CF₂Br₂	20,7	46,81	123%	192,46	829%

Utilizando os dados de concentração experimentais “emulados” a partir da simulação do modelo LAMBDA-avançado e com porcentagens de ruído da ordem do erro experimental (calculado na Seção 5.1) encontra-se que, para 30% de ruído, a solução do problema inverso (eq. 5.5) apresenta um erro de apenas 2%. No entanto usando dados experimentais reais esse erro pode chegar a 11,5% , quando são usados os dados do contaminante SF₆ e até a 80% para o CF₂Br₂. Desta discussão nota-se que há uma diferença entre se trabalhar com dados experimentais reais e do experimento sintético (como evidenciado nas Tabelas 5.4 e 5.5). Calibrar uma metodologia de inversão com dados experimentais sintéticos, ou seja, aqueles obtidos a partir do modelo direto adicionados de ruído, pode levar a soluções inversas que

estão longe das aceitáveis quando usamos dados experimentais reais. Apesar disto, este procedimento (conhecido na literatura como *inverse crime* (Kaipo, 2004)) é frequentemente utilizado em estudos envolvendo problemas inversos, pois constituem-se numa metodologia para realizar um experimento não tendencioso de inversão.

5.3 CASO 2: Estimação da intensidade da fonte para o experimento de Copenhagen.

Para uma nova estimação da intensidade de emissão da fonte, utilizaremos dados de um experimento bastante conhecido na literatura, o experimento de Copenhagen (Gryning & Lyck, 1984 e 1998). Primeiramente faremos um estudo da eficiência do modelo LAMBDA-avanzado (como modelo direto) em simular este experimento.

5.3.1 Simulação numérica para o experimento de Copenhagen

No experimento de Copenhagen o contaminante (SF_6) foi liberado sem empuxo de uma fonte de 115 m de altura e coletado ao nível do solo, em três arcos perpendiculares ao vento médio, distantes de 2 a 6 km da posição de emissão, conforme Figura 5.5 (Gryning & Lyck, 1984 e 1998). As medidas de concentração foram feitas a cada 20 min (3 medidas em 1 hora) e as medidas da velocidade do vento a 10, 60, 120 e 200 m, direção do vento a 10, 120 e 200 m e de temperatura a 2, 40, 80, 120, 160, 200 m foram obtidas a cada 10 min. A rugosidade da região era de 0,6 m.

Para a simulação usamos o experimento de 19/10/1978 com os dados de concentração medidos das 12:33 h às 12:53 h (experimento com maior número de medidas meteorológicas, embora a velocidade do vento a 60 m não tenha sido avaliada). Os dados de meteorologia são apresentados na Tabela 5.7 e os dados de concentração ao nível do solo na Tabela 5.8.

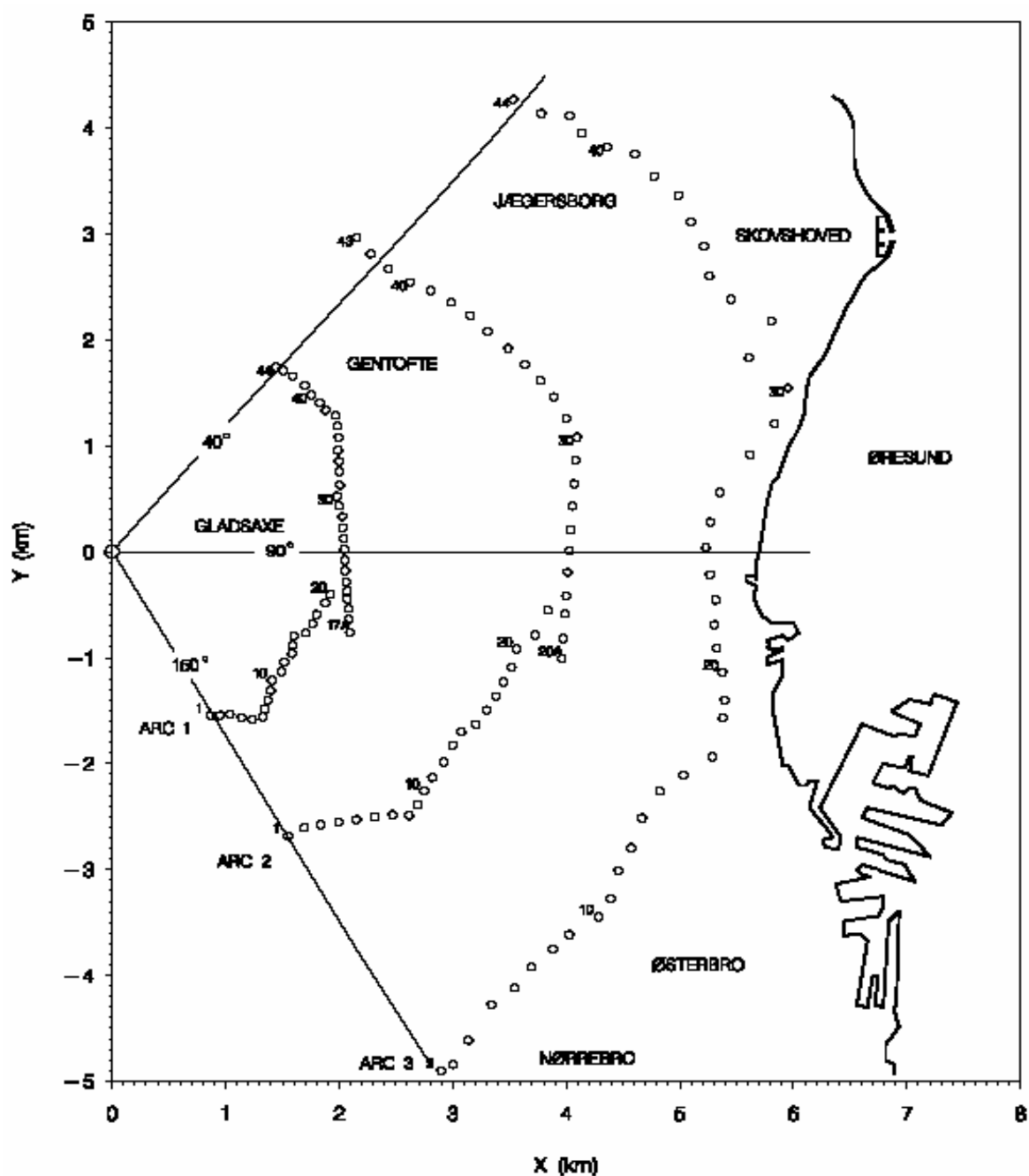


Figura 5.5 - Área do experimento de Copenhague. O eixo x está apontando para Leste, o eixo y para Norte e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos em 3 arcos concêntricos em relação à fonte, com raios entre 1,9 e 6,1 km. O poluente foi liberado de uma altura de 115 metros na posição $(x, y) = (0, 0)$. Em cada ensaio, aproximadamente 20 sensores foram instalados e distribuídos ao longo de cada arco. A linha cheia indica o litoral de Øresund (Gryning e Lyck, 1998).

Os dados apresentados na Tabela 5.7 foram usados para calcular o perfil vertical do desvio padrão do vento (σ_i) e a escala de tempo Lagrangeana (τ_{L_i}), de acordo com o esquema de parametrização da turbulência derivado por Degrazia et al. (2000), para uma simulação do experimento de Copenhagen (12:33h-12:53h, 19/10/1978) com o modelo direto LAMBDA avançado. Para descrever o campo meteorológico de um modo mais preciso, o perfil vertical dos desvios padrões das velocidades turbulentas (vertical e lateral) foi “corrigido” por um coeficiente numérico obtido entre a razão do valor medido na altura da fonte e do valor parametrizado. Estes dois coeficientes encontrados foram bastante similares (1,08; 1,05) o que indica a boa qualidade da parametrização usada. O perfil vertical da velocidade do vento observado, $U(z)$, pode ser bem representado pelo perfil logarítmico clássico (descrito na Seção 2.5.1). A direção do vento foi interpolada linearmente entre 10 m e 200 m a partir dos valores experimentais; do solo até 10 m o valor usado foi constante (igual ao valor a 10 m); de 200 m até h a direção do vento foi mantida constante e igual ao valor experimental em 200 m. A altura da camada limite, o comprimento de Obukhov e o desvio padrão da velocidade do vento lateral e vertical são apresentados como valores médios de 1 hora e, desta forma, foram usados constantes durante a simulação: $h=1120$ m, $L=-71$ m, $\sigma_v=0,85$ ms⁻¹ e $\sigma_w=0,68$ ms⁻¹, respectivamente. Neste experimento, a intensidade da fonte foi constante no período e igual a 3,2 gs⁻¹.

O domínio horizontal no LAMBDA foi determinado de acordo com a máxima distância dos sensores e o domínio vertical igual a h (6000 m × 6000 m × 1120 m). O passo no tempo foi mantido constante ($\Delta t=1$ s). O número de partículas liberadas em cada passo no tempo a partir da fonte foi de $N_{PEF} = 500$, durante 2880 passos no tempo. O volume que representa a fonte pontual foi de 0,1 m × 0,1 m × 0,1 m. A FDP Gram-Charlier truncada na terceira ordem foi escolhida.

Todos os parâmetros meteorológicos foram avaliados e atualizados a cada 10 min, exceto h e L , que foram mantidos constantes durante toda a simulação. A simulação teve início 28 min. antes do segundo período do experimento. Para melhor estimar a concentração ao nível do solo (c.n.s.), esta foi calculada 10 vezes (cada 2 min) durante os 20 min do período medido e uma média foi construída. As eqs. (5.2) e (5.3) foram usadas para o cálculo da concentração, sendo $n = 10$.

$$C_j^{Mod}(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{1}{10} \sum_{n=1}^{10} C_j(\bar{\mathbf{x}}, n) \quad (5.9)$$

onde $\vec{x} = (x, y)$ é o vetor posição de cada sensor e j é o número do sensor e do seu correspondente arco, descritos na Tabela 5.8. A concentração $C_j(\vec{x}, n)$ é calculada da mesma forma que na eq. (5.3), inclusive com o mesmo volume de sensor, $V_{s,j} = (50 \text{ m} \times 50 \text{ m} \times 10 \text{ m})$ centrado em \vec{x} .

A Tabela 5.9 e a Figura 5.6 apresentam os valores de concentração experimentais, C^{Exp} , e simulados pelo modelo, C^{Mod} , ao nível do solo para cada sensor, em cada um dos 3 arcos. A análise destes resultados sugere que o modelo foi capaz de reproduzir o comportamento geral observado no experimento de difusão. Entretanto, a pluma simulada foi mais larga que aquela observada e o máximo valor calculado em cada arco foi menor que o observado. A Figura 5.7, que representa o espalhamento entre os valores de concentração experimentais e simulados, demonstra que para concentrações menores que $2 \mu\text{g}$ o modelo superestima os dados reais e para concentrações maiores que $2 \mu\text{g}$ o modelo subestima estes dados. Como 75% dos sensores mediram concentrações abaixo de $2 \mu\text{g}$ e destes apenas 10% tiveram suas concentrações subestimadas pelo modelo, então conclui-se que o modelo superestimou os valores de concentração, demonstrado também pelo valor negativo do erro fracional entre os dados, $FB = -0,119$. Pela análise do comprimento de Obukov L ($L = -71$) nota-se instabilidade da CLP no período do experimento. Desta forma, espera-se que a pluma do contaminante tenha grande abertura lateral, o que é confirmado pelas isolinhas de concentração ao nível do solo simulada pelo modelo Lagrangeano, ilustradas na Figura 5.8.

Anfossi (2004), pela experiência no uso do modelo LAMBDA e em modelos similares, sugere que melhores resultados possam ser obtidos com uma redução nos valores da escala de tempo lagrangeana. Testamos a simulação com a redução de um fator 1,5 neste valor. Na Tabela 5.10 os índices estatísticos são apresentados para as simulações com e sem a redução na escala de tempo. Observa-se uma ligeira melhora nos resultados quando da redução na escala de tempo, pois os índices FB, NMSE estão mais próximos de zero e COR e FA2 mais próximos de 1. Apenas o índice FS tornou-se mais distante do valor ideal. No entanto, não temos nenhuma informação experimental para validar a redução ou o valor teórico usado.

É interessante notar que Carvalho et al. (2002) simulou com o modelo LAMBDA-avançado todo o experimento de Copenhagen horário usando o mesmo esquema de parametrização (Degrazia et al. 2000) (nesta tese avaliamos apenas o experimento do dia 19/10/1978 e no período das 12:33 h-12:53 h). Eles consideraram a concentração ao nível do solo integrada lateralmente, y . Os índices estatísticos globais obtidos são reproduzidos na Tabela 5.11, juntamente com os resultados de uma simulação anterior feita por Ferrero et al.

(1995). Percebe-se que os resultados obtidos por Carvalho et al. (2002) são superiores, pois todos os índices apresentaram melhores valores que em Ferrero et al. (1995). No entanto, a simulação de Ferrero et al. (1995) foi obtida com uma antiga versão do modelo LAMBDA avançado (baseada no esquema de Thomson, 1984) e usando a parametrização da turbulência derivada por Hanna (1982).

Tabela 5.9 - Dados de concentração de SF₆ ao nível do solo (C^{Exp}) medido durante o experimento de Copenhagen (12:33 h-12:53 h, 19/10/1978) e concentrações preditas (C^{Mod}) pelo modelo LAMBDA-avançado com a parametrização da turbulência dada por Degrazia et al. (2000).

Arco 1			Arco 2			Arco 3		
Nº do sensor	C^{Exp} (μgs^{-1})	C^{Mod} (μgs^{-1})	Nº do sensor	C^{Exp} (μgs^{-1})	C^{Mod} (μgs^{-1})	Nº do sensor	C^{Exp} (μgs^{-1})	C^{Mod} (μgs^{-1})
9	0	0,714	11	0	1,170	9	0	0,369
10	0	1,314	12	0,107	1,560	10	0,018	0,662
11	0,186	2,214	13	0,840	1,993	11	0,021	0,813
12	0,614	3,017	14	1,478	2,218	12	0,085	0,979
13	1,816	3,660	15	3,133	2,063	13	0,800	1,056
14	5,455	4,500	16	2,848	1,916	14	1,502	1,327
15	7,016	4,690	17	2,563	1,499	15	2,035	0,973
16	6,770	4,270	18	2,225	1,248	16	1,112	0,604
17	5,472	3,850	19	0,538	0,795	17	0,434	0,364
18	3,806	3,331	20	0	0,510	18	0,053	0,116
19	1,114	2,111	21	0	0,272	19	0	0,049
20	0,919	1,534	22	0	0,083	20	0	0,034
21	0,077	0,892				21	0	0,020
22	0	0,641						
23	0	0,320						

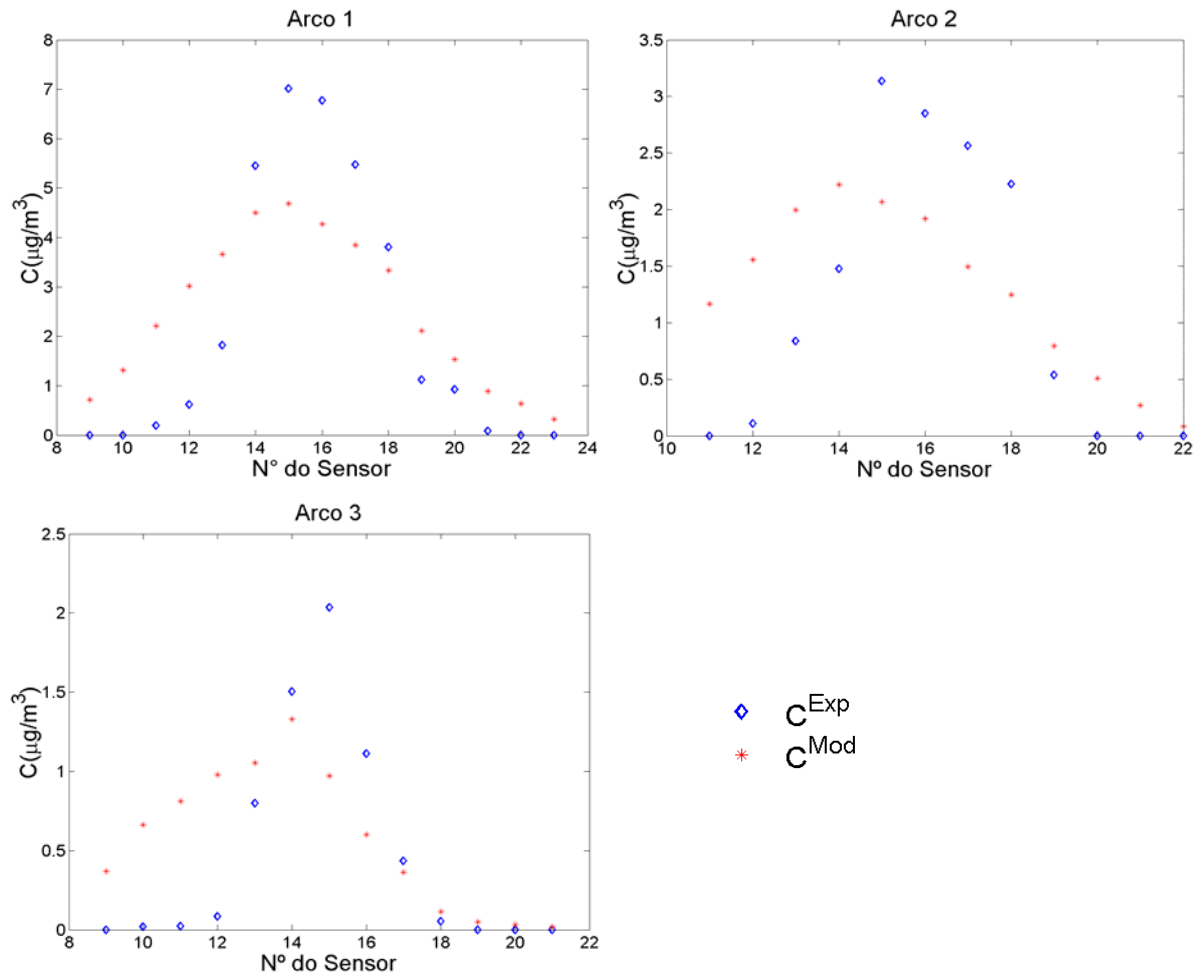


Figura 5.6 - Concentração de SF₆ ao nível do solo experimental, (C^{Exp}), e simulados pelo modelo LAMBDA-avançado, (C^{Mod}), em cada sensor nos três arcos.

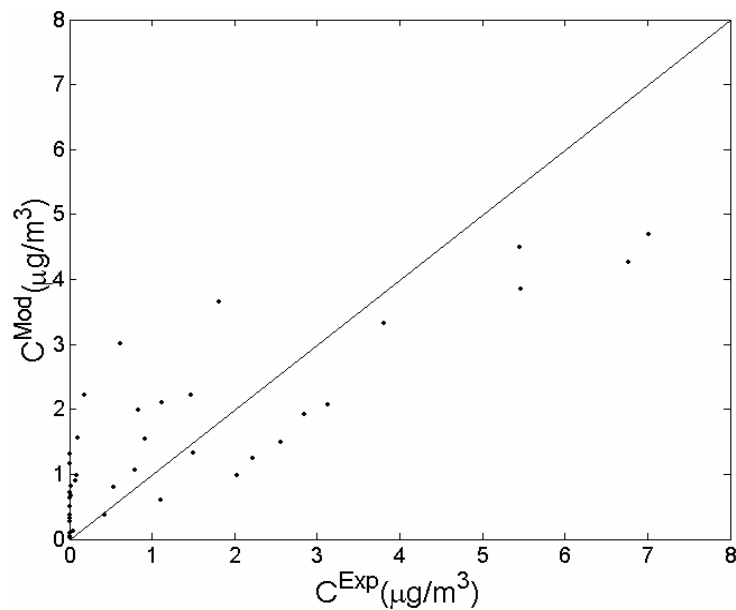


Figura 5.7 - Diagrama do espalhamento entre os valores de concentração de SF₆ ao nível do solo do experimento de Copenhague (12:33 h-12:53 h, 19/10/1978), (C^{Exp}), e simulados pelo modelo LAMBDA-avançado, (C^{Mod}).

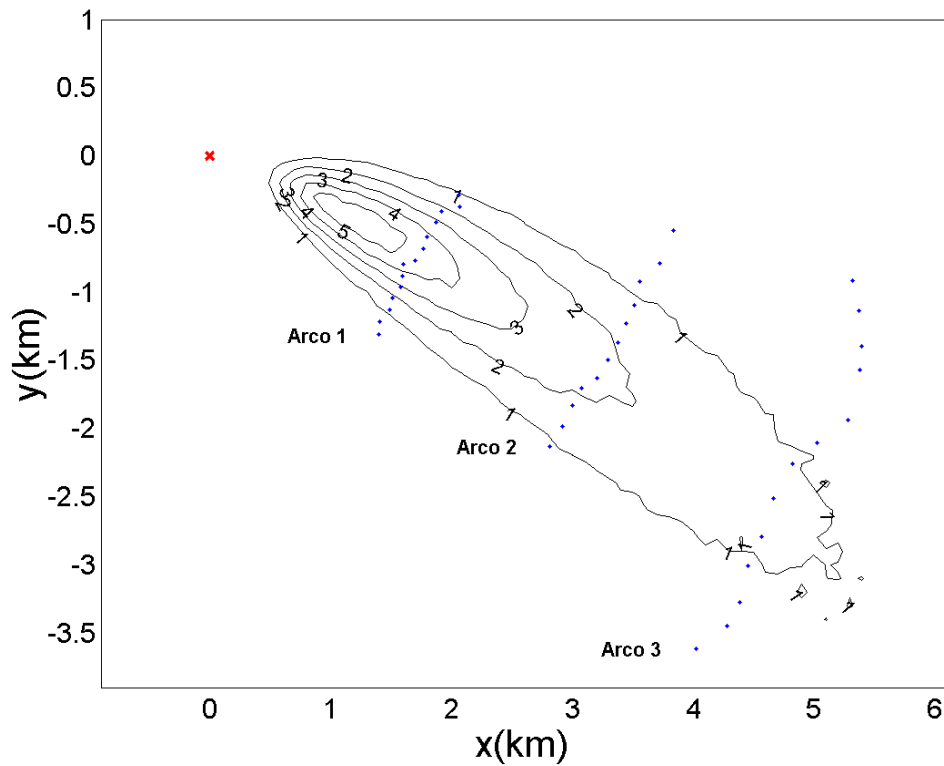


Figura 5.8 - Isolinhas de concentração de SF₆ ao nível do solo (em µg) com os dados do modelo LAMBDA-avançado simulando o experimento de Copenhague (12:33 h-12:53 h, 19/10/1978). O × em vermelho representa a posição da fonte e os pontos em azul a posição dos sensores nos 3 arcos.

Tabela 5.10 - Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA-avançado para o experimento de Copenhagen (12:33 h-12:53 h, 19/10/1978). Simulação 1: sem redução na escala de tempo dada por Degrazia et al. (2000); Simulação 2: com uma redução da escala de tempo Lagrangeano, τ_L , por um fator de 1,5.

	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Simulação 1	0,590	0,846	0,425	-0,119	0,386
Simulação 2	0,560	0,880	0,500	-0,058	0,441

Tabela 5.11 - Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA-avançado para o experimento Copenhagen obtido por Carvalho et al. (2002) e por Ferrero et al. (1995).

	NMSE	COR	FA2	FB	FS
Carvalho et al. (2002)	0,08	0,82	0,96	-0,018	-0,056
Ferrero et al. (1995)	0,14	0,72	0,87	-0,09	0,12

5.3.2 Estimação da intensidade da fonte

Para testar a metodologia de problema inverso em problemas de estimação de intensidade de fontes pontuais, eq. (3.12), utilizamos os dados de concentração medidos no experimento de Copenhagen (12:33 h-12:53 h, 19/10/1978) apresentados na Tabela 5.9. Embora a intensidade da fonte do contaminante SF₆ tenha sido constante durante o experimento, usamos a hipótese de que esta foi uma função do tempo e variava a cada 10 min. Reescrevendo a equação (3.12):

$$F(\alpha, \mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^{40} \left[C_i^{Mod}(\mathbf{Q}) - C_i^{Exp} \right]^2 + \alpha \Omega(\mathbf{Q}) \quad (5.10)$$

onde i representa o número de sensores (num total de 40), o vetor \mathbf{Q} representa a intensidade de uma única fonte pontual contínua, variando no tempo, $\mathbf{Q} = Q(t)$, t variando de 0 a 50 min, mas $Q(t) = constante$ para $(j-1)10 \text{ min} < t < (j)10 \text{ min}$ com $j = 1, 2, \dots, 5$, assim pretende-se

estimar cinco valores, $\mathbf{Q} = [Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, Q_5]^T$, onde o sub-índice identifica o intervalo de intensidade de emissão constante (10 min).

Para a solução do problema inverso utilizamos o método de otimização Quase-Newton (QN) e o esquema de regularização de Tikhonov de segunda ordem. Os valores estimados com a metodologia de problema inverso são apresentados na Tabela 5.12 para diferentes valores do parâmetro de regularização e são plotados na Figura 5.9. Sem a utilização de regularização ou mesmo quando o parâmetro de regularização é pequeno $\alpha \rightarrow 0$, a solução apresenta oscilações que podem representar uma solução sem significado físico. Para valores do parâmetro de regularização grande (neste caso $\alpha = 40$ já é um valor alto) a solução é totalmente suavizada ocorrendo uma regularização artificial da solução inversa. O procedimento de Hansen (curva L) foi utilizado para a determinação do melhor parâmetro de regularização que soluciona o problema. Esta técnica é representada na Figura 5.9 para diferentes multiplicadores de Lagrange sugerindo o valor de $\alpha=0,6$ como uma boa escolha. Para este valor do parâmetro de regularização o erro entre os valores exato e estimado é de 0,3%. Percebe-se a robustez da metodologia para a estimação de intensidade de emissão de uma fonte quando esta é uma função do tempo, mesmo utilizando dados experimentais reais, a técnica foi capaz de reproduzir fielmente os valores de fonte reais.

Tabela 5.12 - Estimação da intensidade da fonte com o esquema de regularização de Tikhonov de segunda ordem e o método de otimização QN, para diferentes valores do parâmetro α .

Horário (h:min)	Q^{exato} (gs ⁻¹)	$Q^{estimado}$ (gs ⁻¹)		
		($\alpha=0$)	($\alpha=0,6$)	($\alpha=40$)
12:05	3,20	3,57	3,185	0,655
12:15	3,20	1,79	3,185	0,595
12:25	3,20	4,82	3,187	0,502
12:35	3,20	2,74	3,188	0,607
12:45	3,20	0,25	3,188	0,704

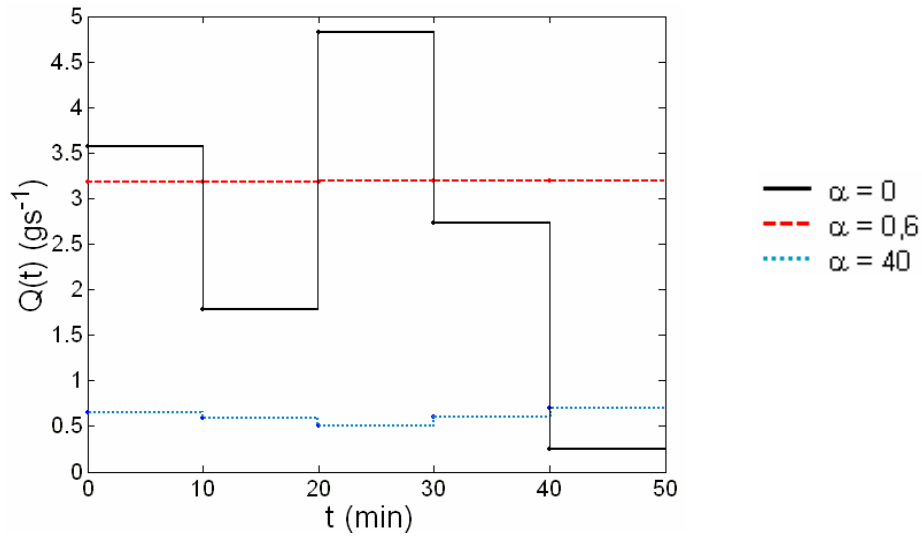


Figura 5.9 - Representaco temporal da estimaco da intensidade da fonte com o esquema de regularizaco de Tikhonov de segunda ordem e o mtodo de otimizaco QN, para diferentes valores do parâmetro de regularizaco, α .

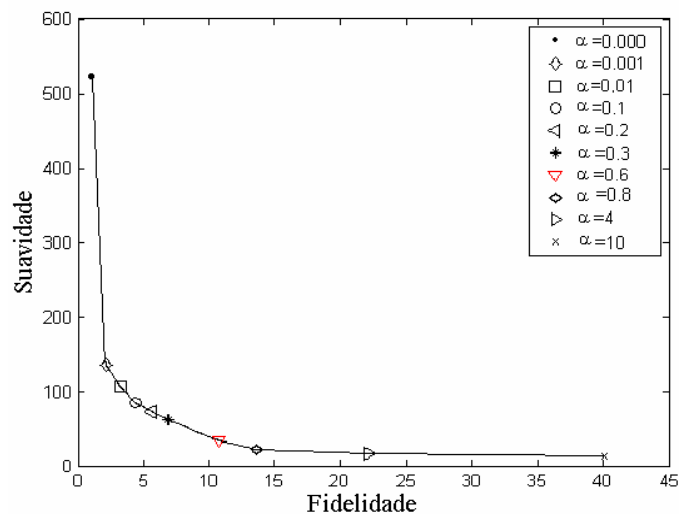


Figura 5.10 - Curva L para a estimaco da intensidade da fonte para o experimento de Copenhagen (12:33h-12:53h, 19/10/1978).

5.4 CASO 3: Duas fontes pontuais contnuas na mesma posico, mas em diferentes alturas.

Um interessante teste da metodologia de PI é a estimaco da intensidade de duas fontes pontuais contnuas, localizadas na mesma posico horizontal, mas emitindo um determinado

contaminante de diferentes alturas. Para tanto um experimento numérico foi realizada utilizando o mesmo cenário computacional e a mesma parametrização da turbulência usado para simular o experimento de Copenhagen (12:33 h-12:53 h, 19/10/1978) (Seção 5.3.1). A diferença agora é que temos duas fontes, uma a 100 m de altura com uma intensidade de emissão, Q_1 , de $3,0 \text{ gs}^{-1}$, e outra a 200 m, Q_2 , com uma intensidade de $7,0 \text{ gs}^{-1}$.

A simulação iniciou-se 30 min antes do início do cálculo da concentração em cada sensor. Este cálculo se deu da mesma forma que na Seção 3.3.1, ou seja, a concentração é calculada 10 vezes (a cada 2 minutos) durante um período de 20 minutos e então uma média é obtida, da seguinte forma:

$$C_j(\bar{\mathbf{x}}) = \frac{1}{10} \sum_{n=1}^{10} C_j(\bar{\mathbf{x}}, n) \quad (5.11)$$

onde $\bar{\mathbf{x}} = (x, y)$ é o vetor posição de cada sensor e j é o número do sensor e do seu correspondente arco, descritos na Tabela 5.12. A concentração em cada sensor $C_j^{Exp}(\bar{\mathbf{x}}, n)$ é calculado da por :

$$C_j(\bar{\mathbf{x}}, n) = \sum_{i=1}^2 \frac{Q_i}{V_{s,j} N_{PEF,i}} \Delta t N_{PVS_{i,j},n} \quad (5.12)$$

onde $N_{PEF,i}$ é o número de partículas emitidas de cada fonte $N_{PEF,i} = 1000$ a cada $\Delta t = 1 \text{ s}$ e $N_{PVS_{i,j},n}$ é a quantidade de partículas fictícias no volume do j -ésimo sensor no n -ésimo passo no tempo provenientes da i -ésima fonte, sendo $V_{s,j} = (50 \text{ m} \times 50 \text{ m} \times 10 \text{ m})$ o volume do j -ésimo sensor centrado em $\bar{\mathbf{x}}$.

Para obtermos o campo de concentração experimental, um ruído gaussiano de 10% foi adicionado nos dados meteorológicos medidos, h , L , U e V (Tabela 5.8, onde U e V são as componentes do vento médio \bar{U}). Após o cálculo da concentração, um ruído gaussiano de 10% ($\sigma = 0,1$) foi também adicionado:

$$C(\bar{\mathbf{x}}) = C(\bar{\mathbf{x}}) [1 + \sigma\mu]. \quad (5.13)$$

O problema direto, simulado aqui pelo modelo LAMBDA-avançado, é um problema bem posto, diferentemente de um problema inverso. Pela 3ª condição de Hadamard pequenas perturbações nos dados de entrada (neste caso h , L , U e V) implica em pequena variação nos efeitos, ou seja, a concentração média calculada pelo modelo terá um erro na mesma magnitude do ruído nos dados meteorológicos. Como a perturbação é aleatória poderá gerar dados finais de concentração (final da simulação) muito próximo da concentração predita sem perturbação nos dados de entrada ou ainda, essas perturbações podem acarretar grande desvio na concentração calculada no final da simulação. Desta forma, fez-se várias realizações (20 no total) para se obter uma média estatística da concentração a partir de dados imprecisos (aleatoriamente perturbados) que alimentam o modelo matemático. A análise mais pessimista é aquela que irá fornecer maior desvio da concentração calculada, C^{Exp} , em relação à concentração obtida a partir de dados não perturbados, C^{Mod} . A concentração média e a variância de todas as realizações, em cada sensor, são apresentadas na Figura 5.10. Os dados de concentração utilizados como experimentais são aqueles que apresentaram um erro fracional de $FB = 0,081$.

A Figura 5.11 mostra o diagrama de espalhamento entre os dados de concentração experimental e aqueles simulados (dados da Tabela 5.12). Pode-se notar a pequena subestimação do modelo em relação aos dados experimentais, mostrado matematicamente pelo desvio fracional positivo ($FB = 0,081$).

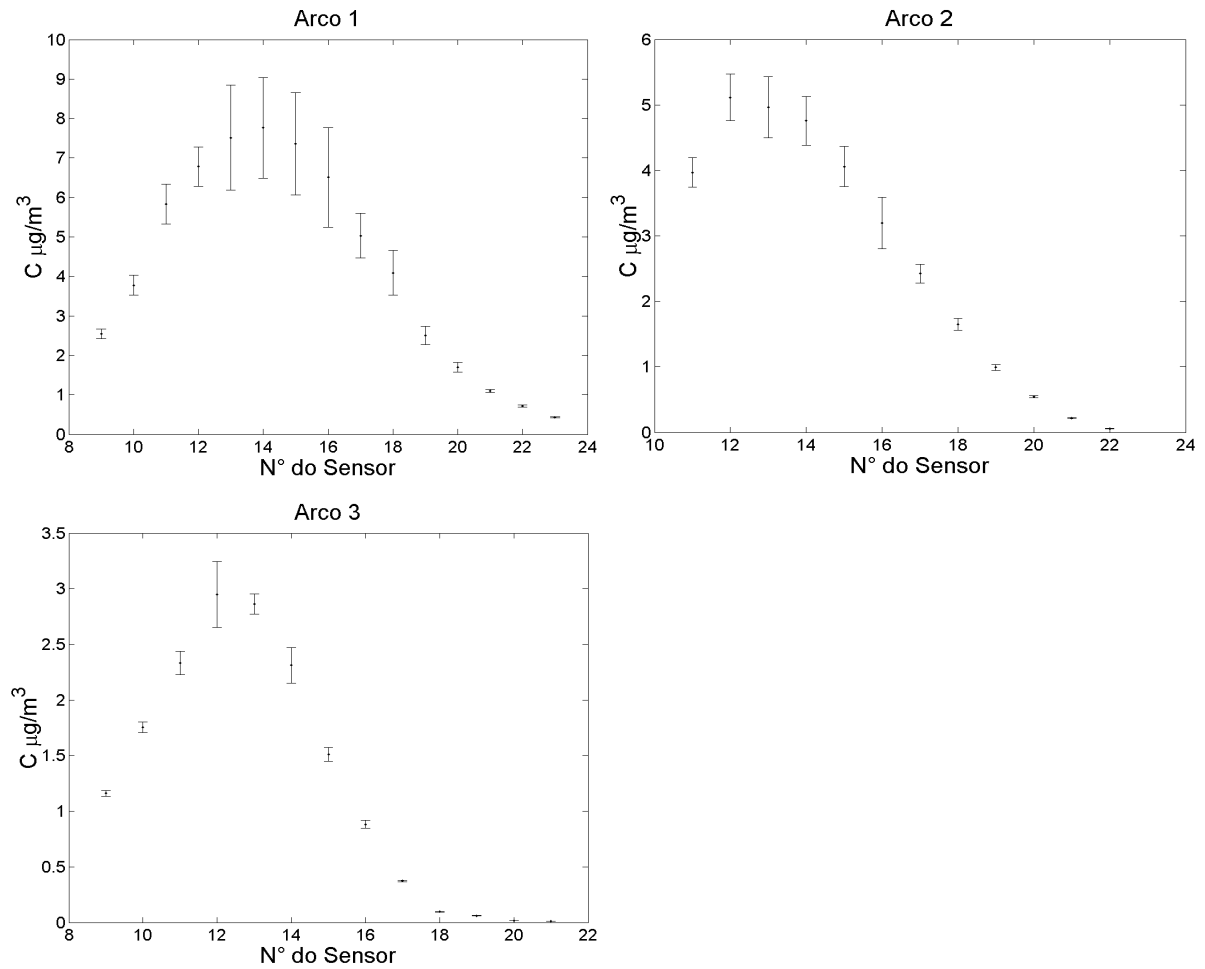


Figure 5.10 - Concentração média ao nível do solo de um dado contaminante e a variância em cada sensor dos 3 arcos.

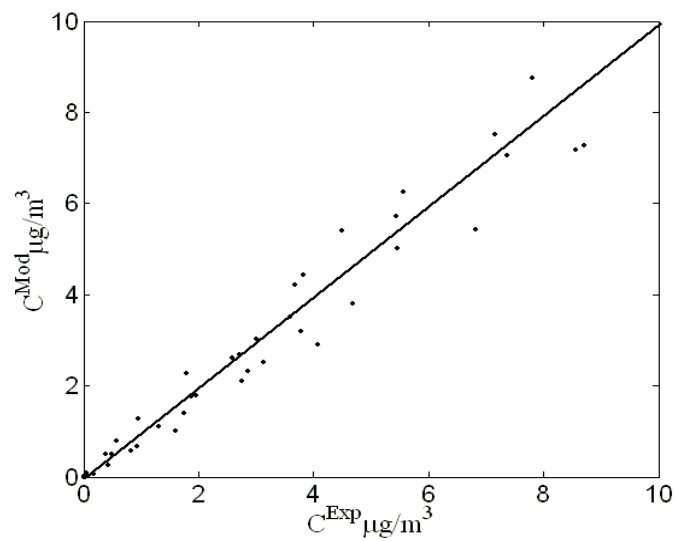


Figura 5.11 - Diagrama do espalhamento entre os dados de concentração de um determinado contaminante, ao nível do solo, experimentais, (C^{Exp}), e simulados, (C^{Mod}), para o experimento numérico.

Tabela 5.12 - Dados de concentração de um determinado contaminante ao nível do solo experimentais, (C^{Exp}), e simulados pelo modelo LAMBDA, (C^{Mod}), para o experimento numérico de duas fontes.

Arco 1			Arco 2			Arco 3		
Nº do sensor	C^{Exp} (μgs^{-1})	C^{Mod} (μgs^{-1})	Nº do sensor	C^{Exp} (μgs^{-1})	C^{Mod} (μgs^{-1})	Nº do sensor	C^{Exp} (μgs^{-1})	C^{Mod} (μgs^{-1})
9	2,542	2,689	11	3,969	4,216	9	1,161	1,017
10	3,778	2,892	12	5,115	5,390	10	1,757	2,272
11	5,832	6,257	13	4,965	5,432	11	2,333	2,610
12	6,782	7,048	14	4,757	5,001	12	2,948	3,497
13	7,515	7,182	15	4,059	3,800	13	2,863	3,029
14	7,767	8,756	16	3,196	3,198	14	2,311	2,104
15	7,359	7,263	17	2,423	2,318	15	1,511	1,0788
16	6,510	7,522	18	1,650	1,384	16	0,882	0,664
17	5,032	5,720	19	0,994	1,10	17	0,373	0,502
18	4,092	4,430	20	0,546	0,566	18	0,0971	0,065
19	2,505	2,514	21	0,215	0,258	19	0,062	0,004
20	1,695	1,766	22	0,057	0,078	20	0,016	0,021
21	1,097	1,262				21	0,010	0
22	0,716	0,784						
23	0,429	0,487						

Para a estimação da intensidade de emissão das duas fontes pontuais contínuas a partir dos dados experimentais obtidos nesta Seção, utilizamos a eq. (3.12),

$$F(\alpha, \mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^{40} [C_i^{Mod}(\mathbf{Q}) - C_i^{Exp}]^2 + \alpha \Omega(\mathbf{Q}), \quad (5.14)$$

onde vetor \mathbf{Q} representa a intensidade de duas fontes pontuais contínuas, $\mathbf{Q} = [Q_1, Q_2]^T$, sendo que os sub-índices indicam a posição das fontes na vertical.

Para a solução da eq. (5.8), com $\alpha=0$, três diferentes métodos de otimização foram utilizados (LM, QN e SA) sendo os resultados apresentados na Tabela 5.13. Nota-se que os algoritmos de otimização LM e QN não conseguem obter resultados satisfatórios. Um teste utilizando o esquema de regularização de Tikhonov de ordem zero com o método QN foi realizado, mas sem sucesso para a melhora dos resultados. No entanto, o método SA mostrou-se bastante eficaz na estimação da intensidade de duas fontes pontuais, sendo que o erro entre os valores estimados e os exatos é de 3,7%.

Tabela 5.13 - Estimação da intensidade de duas fontes pontuais contínuas na mesma posição horizontal e diferentes alturas com diferentes métodos de otimização.

Altura da Fonte	Q^{exato} (gs^{-1})	$Q^{estimado}$ (gs^{-1})		
		LM	QN	SA
100 m	3,0	1,8	5,8	3,2
200 m	7,0	0,9	0,4	7,1

5.5 CASO 4: Determinação da Intensidade de uma Fonte Área e de uma Fonte Linha

Em um novo teste da metodologia de estimação da intensidade de fontes de um determinado contaminante na atmosfera, um cenário computacional foi criado: duas fontes de contaminantes estão presentes num domínio físico (Roberti et al. 2005). O domínio físico consiste em um área de 5 km \times 5 km de um terreno plano, com uma altura de 1120 m. Dentro deste domínio, uma área industrial de 500 m \times 500 m é representada, liberando contaminante

a 20 m de altura, adicionalmente, uma fonte linha de 40 m \times 5000 m na direção y representa uma auto-estrada emitindo contaminante próximo ao solo. Neste domínio considera-se também um certo número de sensores medindo a concentração de contaminantes ao nível do solo. A Figura 5.12 representa o domínio físico e a posição dos sensores. Os sensores foram posicionados em quatro linhas paralelas na direção y , 1° Linha: 3500 m; 2° Linha: 1500 m; 3° Linha: 700 m; 4° Linha: 150 m e distantes entre si 200 m, na direção x , iniciando na posição 200 m até a posição 4800 m.

Para simular o campo de concentração, dados meteorológicos médios são usados (\bar{U} , L , h) característicos do experimento de Copenhagen (19/10/1978 - (12:05 h – 12:45 h)), ou seja, $\bar{U}_{10m} = 2,6 \text{ ms}^{-1}$; $\bar{U}_{120m} = 5,7 \text{ ms}^{-1}$; $L = -71 \text{ m}$ e $h = 1120 \text{ m}$, (Gryning & Lyck, 1984 e 1998) e para a direção do vento, um ângulo de $\theta = 180^\circ$ foi utilizado. O perfil vertical do desvio padrão do vento (σ_i) e a escala de tempo Lagrangeana (τ_{L_i}) foram calculados de acordo com o esquema de parametrização da turbulência dada por Degrazia et al. (2000). A FDP Gram-Charlier truncada na terceira ordem foi escolhida.

O domínio computacional no modelo LAMBDA-avançado foi de 5 km \times 5 km na horizontal e o domínio vertical igual a h . O número de partículas emitidas a partir de cada fonte em cada passo no tempo foi de $N_{PEF} = 100$, durante 2400 passos no tempo. O passo no tempo foi mantido constante e igual a $\Delta t = 1 \text{ s}$. A intensidade de emissão para a fonte que representa a área industrial foi $10,0 \text{ gs}^{-1}$ e para a auto-estrada $50,0 \text{ gs}^{-1}$.

Para obter o campo de concentração, a mesma técnica da Seção 5.4 foi utilizada, ou seja um ruído gaussiano de 10% foi adicionado aos dados meteorológicos h , L , U , V , sendo a concentração do contaminante calculada pelas eq. (5.11 e 5.12). Após este cálculo, um novo ruído gaussiano de 10% foi adicionado aos dados de concentração, cujo valor médio e a variância em cada sensor são apresentadas na Figura 5.12.

Para testar a metodologia de problema inverso, duas séries de dados de concentração ao nível do solo foram usadas como dados experimentais:

Experimento-1: A concentração média de um contaminante apresentada na Figura 5.12;

Experimento-2: A solução que apresenta o maior erro fracional entre as concentrações obtidas a partir de dados não perturbados.

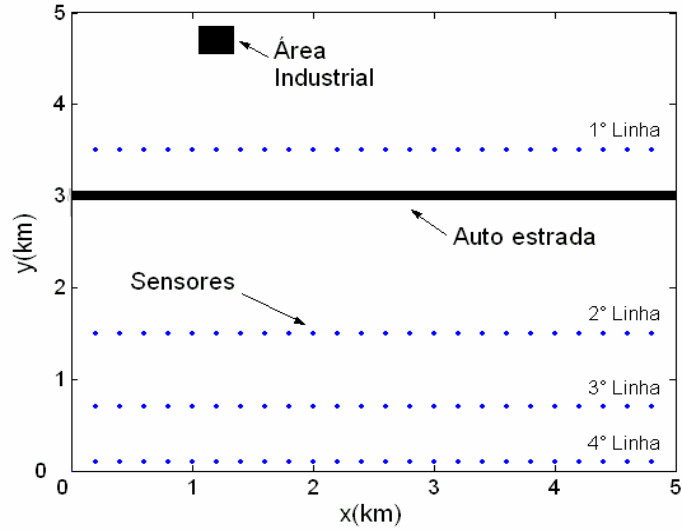


Figura 5.12 - Representação do domínio físico para o experimento de uma fonte área e uma fonte linha. Os pontos azuis representam os sensores posicionados em linhas.

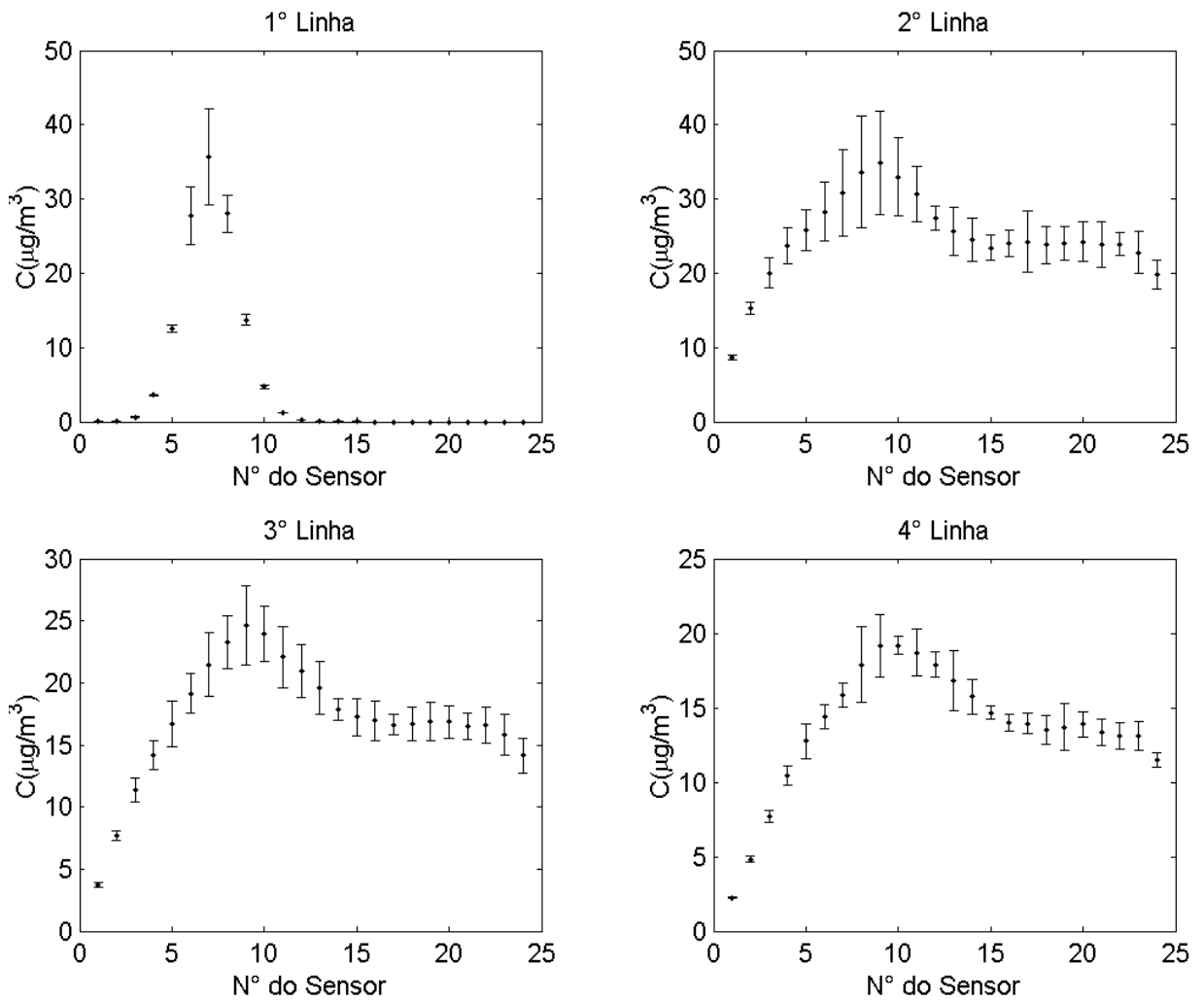


Figura 5.13 - Concentração média e variância de um contaminante ao nível do solo, em cada sensor nas 4 linhas.

A Figura 5.14 representa o diagrama de espalhamento entre dados de concentração experimentais e modelados para o Experimento-1 e Experimento-2. Em ambos a simulação usando dados não perturbados, C^{Mod} , superestima os valores experimentais, C^{Exp} . O erro fracional foi de $FB = -0,012$ e $FB = -0,072$ para o Experimento-1 e 2, respectivamente. Embora a diferença entre esses erros tenha sido somente de 0,06, graficamente percebe-se que esta diferença produz um comportamento bastante distinto entre os dados.

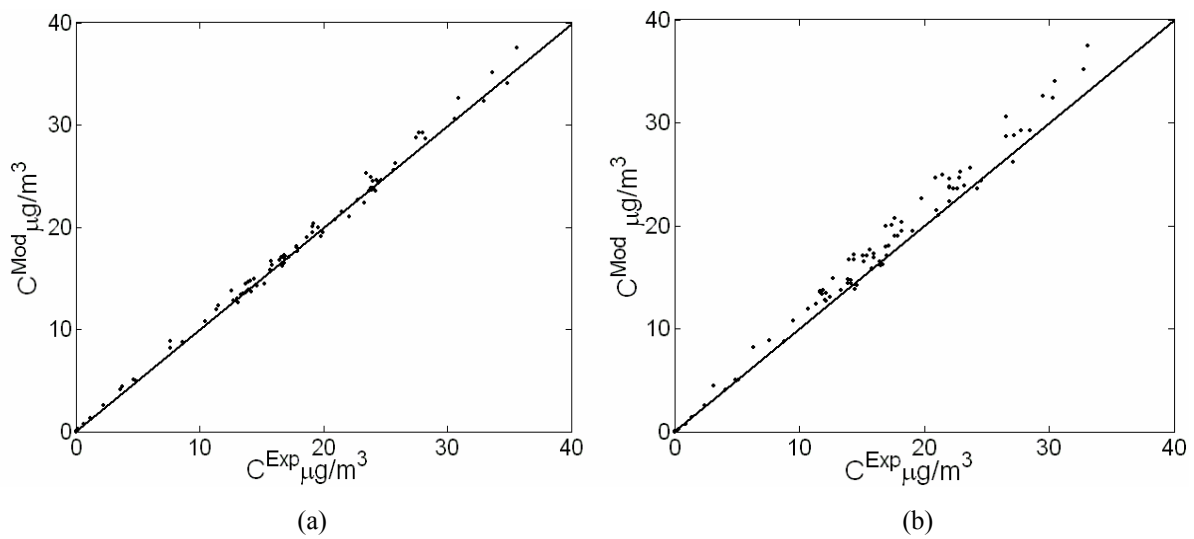


Figura 5.14 - Diagrama do espalhamento entre dados de concentração de um contaminante, ao nível do solo experimentais, C^{Exp} , e simulados, C^{Mod} , para o Experimento-1 (a) e Experimento-2 (b)

Para a estimação da intensidade de emissão das duas fontes no domínio físico através da metodologia de problema inverso, a eq. (3.12) foi utilizada novamente:

$$F(\alpha, \mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^{40} \left[C_i^{Mod}(\mathbf{Q}) - C_i^{Exp} \right]^2 + \alpha \Omega(\mathbf{Q}) \quad (5.15)$$

onde vetor \mathbf{Q} representa a intensidade das duas fontes, fonte de área e fonte de linha. Desta forma, pretende-se estimar dois valores, $\mathbf{Q} = [Q_1, Q_2]^T$, para cada um dos dois experimentos numéricos realizados nesta Seção.

Para a solução da eq. (5.15), com $\alpha = 0$, três diferentes métodos de otimização foram utilizados: LM, QN e SA. As Tabelas 5.14 apresentam os resultados da estimação da

intensidade das fontes para os Experimentos 1 e 2. Nota-se que a solução usando o método de otimização SA e LM apresenta bons resultados para ambos os experimentos, enquanto que, os resultados com o método QN são satisfatórios apenas para o Experimento-1. Uma análise mais detalhada pode ser feita utilizando o erro entre os valores exatos e estimados para cada experimento. A Tabela 5.15 apresenta o valor do erro nas estimações, para os três métodos de otimização, calculado da seguinte forma:

$$E_Q(\%) = 100 \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \left[\frac{|Q_i^{estimado} - Q_i^{exato}|}{Q_i^{exato}} \right], \quad (5.16)$$

onde $i = 1$ representa a área industrial e $i = 2$ representa a auto-estrada. Para ambos os experimentos, o SA apresenta um erro menor que 7% na estimacão, enquanto que para o LM este erro é sempre maior que 25%. Já o método QN apresenta resultados satisfatórios para o Experimento-1 com um erro de 7,8%, mas é incapaz de gerar soluções aceitáveis para o Experimento-2, sendo o erro de 70%.

A diferença entre os valores exatos das duas fontes é de 40 gs^{-1} , analisando-se os resultados obtidos pelo método LM notamos que a diferença entre os valores estimados é de 35.2 gs^{-1} para o Experimento-1 e de $31,6 \text{ gs}^{-1}$ para o Experimento-2, sendo que o erro para a intensidade de emissão da auto-estrada é de apenas 6% no Experimento-1 e de 8% no Experimento-2, no entanto o erro sobe para 50% e 44% para a estimativa da área industrial nos experimentos 1 e 2, respectivamente.

A Tabela 5.15 apresenta também o número de iterações utilizado para cada método de otimização. Como observado nos resultados da Seção 4.1, o algoritmo SA apresenta um maior custo computacional, porém aqui resolve satisfatoriamente a estimacão da intensidade das duas fontes nos dois experimentos numéricos. Já o LM e o QN, apresentam um menor custo computacional, em torno de 30 vezes menor que para o SA, mas o QN não resolve de forma satisfatória o experimento-2.

Dos resultados apresentados nesta Seção, pode-se afirmar que o método SA é o método mais indicado para a estimacão da intensidade de fontes quando se tem duas fontes presentes no cenário físico e um erro (ou ruído) de 10% está presente nos dados de concentraçao. No entanto, quando se procura um menor custo computacional aliando a uma boa estimativa, os resultados obtidos com o LM podem ser utilizados como estimativa inicial para o método SA, tornando-o assim mais eficaz computacionalmente. Na literatura o uso de dois diferentes

métodos de otimização na mesma estimativa é conhecido como Método Híbrido.

Tabela 5.14 – Estimativa da intensidade das fontes para os Experimentos 1 e 2 utilizando os métodos de otimização LM, QN e SA.

		$Q^{exato} \text{ (gs}^{-1}\text{)}$	$Q^{estimado} \text{ (gs}^{-1}\text{)}$		
			LM	QN	SA
Experimento-1	Área Industrial (Q_1)	10,0	15,1	8,7	9,4
	Auto estrada (Q_2)	50,0	50,3	48,7	50,7
Experimento-2	Área Industrial (Q_1)	10,0	14,4	17,5	9,2
	Auto-estrada (Q_2)	50,0	46,0	17,5	47,1

Tabela 5.15 - Erro entre os valores estimados e exatos, E_Q , da intensidade das fontes e número de iterações para os métodos de otimização utilizados LM, QN e SA.

	E_Q			Número de iterações		
	LM	QN	SA	LM	QN	SA
Experimento-1	25,3%	7,8%	3,7%	19	65	1575
Experimento-2	26%	70%	6,9%	68	31	1595

5.6 CASO 5: Estimativa da intensidade de fontes que variam espacial e temporalmente

Nesta seção pretende-se estimar a intensidade de uma fonte volumétrica cuja intensidade varia espacialmente e temporalmente. A variação espacial é governada por duas áreas horizontais próximas e a variação temporal faz com que as fontes comportem-se como emissoras de um gás num intervalo de tempo e, posteriormente, como consumidoras. Um dos exemplos mais conhecidos deste comportamento é o ciclo diurno do CO_2 , onde as plantas absorvem CO_2 durante o dia e, durante a noite, devido à respiração, são emissoras de CO_2 .

O exemplo numérico simulado aqui representa duas áreas com diferentes intensidades para as fontes cuja variação temporal é representada na Figura (5.15). Para um tempo $t < 500$ s, as fontes comportam-se como emissoras de gases e para $500 \text{ s} < t < 1000 \text{ s}$, como consumidoras deste gás. Este exemplo pode ser comparado a uma situação real em que a Área 2 é uma floresta jovem que absorveria grande quantidade de CO_2 durante o dia e que durante a noite emitiria CO_2 através da respiração, utilizada para gerar energia para manutenção de seu metabolismo basal. No entanto, como a quantidade de CO_2 absorvida é maior que a emitida, há o aumento da massa vegetal, ou seja, o crescimento da floresta jovem. Já a Área 1 poderia ser comparada a uma floresta senescente, ou seja, completando seu ciclo de vida. A quantidade de CO_2 absorvida durante o dia é pequena, e a emissão de CO_2 durante a noite é grande. Assim a quantidade de CO_2 emitida é maior que a absorvida, levando o decréscimo da massa vegetal, ou seja, a senescência da floresta.

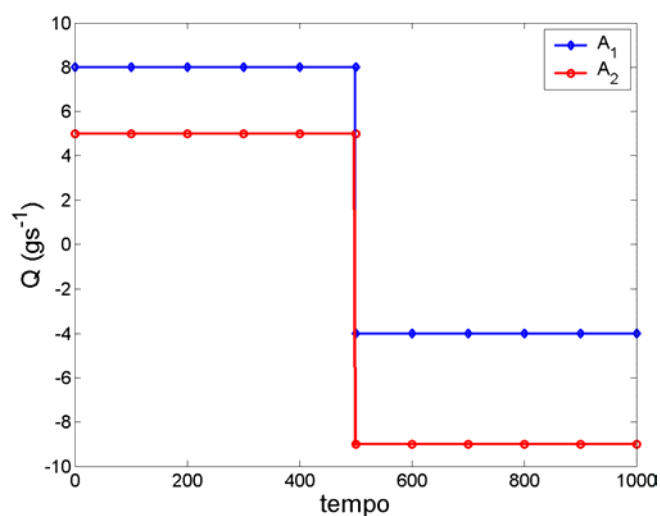


Figura 5.15 - Representação da variação temporal da intensidade de emissão ($0 < t < 500$ s) e absorção ($500 \text{ s} < t < 1000$ s) para a área Área 1 (A_1) e para a Área 2 (A_2).

No cenário computacional, a altura da cobertura vegetal para ambas as áreas é de 30 m de altura, sendo que cada uma tem área horizontal de $500 \text{ m} \times 400 \text{ m}$, sobre terreno plano. A Figura 5.16 representa este cenário físico, onde os sensores são dispostos em 3 linhas paralelas, a 40m de altura: 1º Linha: 800 m; 2º Linha: 1000 m; 3º Linha: 1200 m; e distantes entre si 50 m, na direção y , iniciando na posição 50 m até a posição 950 m. O centro horizontal de cada área é: A_1 : (300, 650); A_2 : (300, 250).

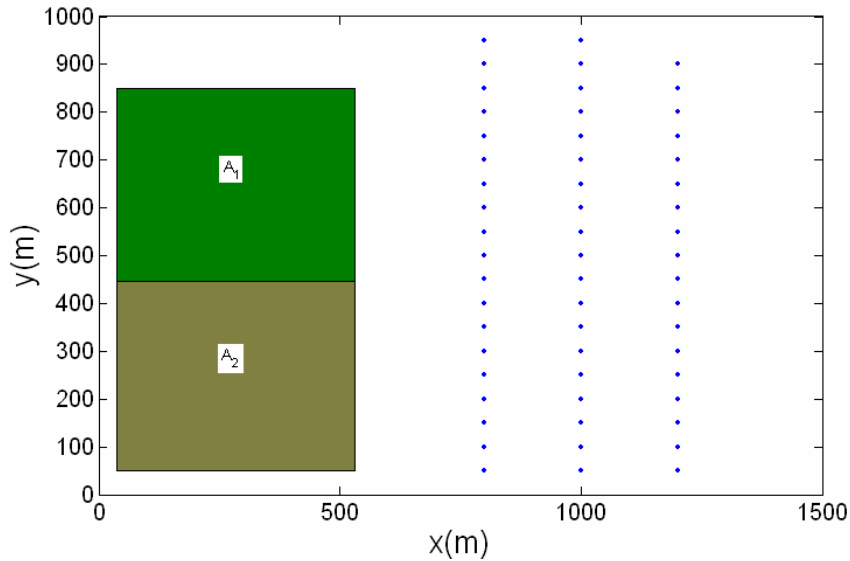


Figure 5.16 - Projeção bidimensional do domínio físico; * em vermelho representam a projeção horizontal dos sensores a 40 m de alturas.

O modelo LAMBDA-avançado foi utilizado para simular este cenário computacional e gerar os dados de concentração do gás nos sensores. Os dados meteorológicos utilizados neste experimento foram os mesmos da Seção 5.5 mas com a direção do vento de $\theta=180^\circ$. A intensidade de emissão da floresta representada pela da área A_1 foi de 8 gs^{-1} para o período de até 500 s e de absorção de -4 gs^{-1} nos seguintes 500 s e para a área A_2 de 5 gs^{-1} para a emissão e de -9 gs^{-1} para absorção, nos mesmos intervalos de tempo (Figura 5.15).

A concentração foi calculada em três diferentes períodos de tempo: 1º período - de 400 s a 600 s; 2º período - de 600 s a 800 s; 3º período - de 800 s a 1000 s; a cada 60 s e uma média em cada período representa a concentração obtida pelo modelo matemático:

$$C^{Mod}(x_j, p) = \frac{1}{n_f} \sum_{n=1}^{n_f} \sum_{i=1}^2 \sum_{t^*=1}^2 \frac{Q_{i,t^*}}{V_{s,j} N_{PEF,i}} \Delta t N_{PVS,i,j,n} \quad (5.17)$$

onde p é o período onde a concentração média foi calculada e n_f é o número de vezes em que a concentração foi calculada em cada período (1º e 3º períodos $n_f=3$ e no 2º período $n_f=4$), x_j é o posição de cada sensor, sendo $j=56$, $N_{PEF,i}=2000$ é o número de partículas emitidas pela i -ésima fonte durante 1000 s com $\Delta t=1$ s, $V_{s,j}=(25 \text{ m} \times 25 \text{ m} \times 10 \text{ m})$ volume do j -ésimo sensor centrado na posição do sensor. $N_{PVS,i,j,n}$ é a quantidade de partículas fictícias no volume do j -ésimo sensor no instante n , emitidas da i -ésima fonte.

Q_{i,t^*} é a intensidade de emissão da i - ésima fonte no t^* - ésimo intervalo de tempo, sendo $t^*=1$ se $t < 500$ s e $t^* = 2$ se $t > 500$ s

Uma concentração de fundo, ou *background*, de $0,05 \text{ gm}^{-3}$ foi considerada de forma homogênea em todo o domínio, sendo acrescida nos resultados da eq. (5.17). Para obter o campo de concentração experimental, um ruído gaussiano de 10% foi adicionado aos dados obtidos pelo modelo LAMBDA-avançado, como na eq. (5.13).

Para a estimação da intensidade de emissão e absorção das duas fontes neste exemplo, o objetivo é minimizar a função custo:

$$F(\alpha, \mathbf{Q}) = \sum_{i=j}^{56} [C_j^{Mod}(\mathbf{Q}) - C_j^{Exp}]^2 + \alpha \Omega(\mathbf{Q}) \quad (5.18)$$

onde o vetor \mathbf{Q} representa a intensidade de emissão ou absorção das duas fontes, $\mathbf{Q} = [Q_{1A_1}, Q_{2A_1}, Q_{1A_2}, Q_{2A_2}]^T$, onde Q_{1A_1} e Q_{1A_2} representam a intensidade de emissão da Área A_1 e A_2 , respectivamente e, Q_{2A_1} e Q_{2A_2} representam a intensidade de absorção da Área A_1 e A_2 , respectivamente. Desta forma, tem-se 4 parâmetros para estimar. Como os resultados da Seção 5.3 e 5.4 apontam que o método SA é robusto para a estimação de intensidades de fonte, aqui utilizaremos apenas este método de otimização e a função objetivo foi otimizada, sem o auxílio de regularização, ou seja, $\alpha = 0$.

Os resultados da estimação da intensidade das duas fontes como função do tempo são apresentados na Tabela 5.16 e Figura 5.17. Evidencia-se novamente a robustez da metodologia, resolvendo o problema, mesmo sem regularização. No entanto, a informação adicional ou *a priori* de que, para $t > 500$ s, o valor da fonte era negativo, representando uma absorção, foi fornecida ao método de otimização, de forma que $Q_{2A_1} = -Q_{2A_1}$ e $Q_{2A_2} = -Q_{2A_2}$. O erro entre os valores exatos e estimados foi menor que 1,3%, representando uma excelente solução inversa. Isto evidencia que a metodologia pode ser utilizada como alternativa na estimação do ciclo diurno de CO_2 em diferentes áreas.

Tabela 5.16 – Estimação da intensidade de emissão e absorção para as duas áreas do experimento numérico com o método de otimização SA.

	$Q^{exato} \text{ (gs}^{-1}\text{)}$	$Q^{estimado} \text{ (gs}^{-1}\text{)}$
Q_{1A_1}	8,0	7,92
Q_{2A_1}	-4,0	-4,03
Q_{1A_2}	5,0	4,93
Q_{2A_2}	-9,0	-9,02

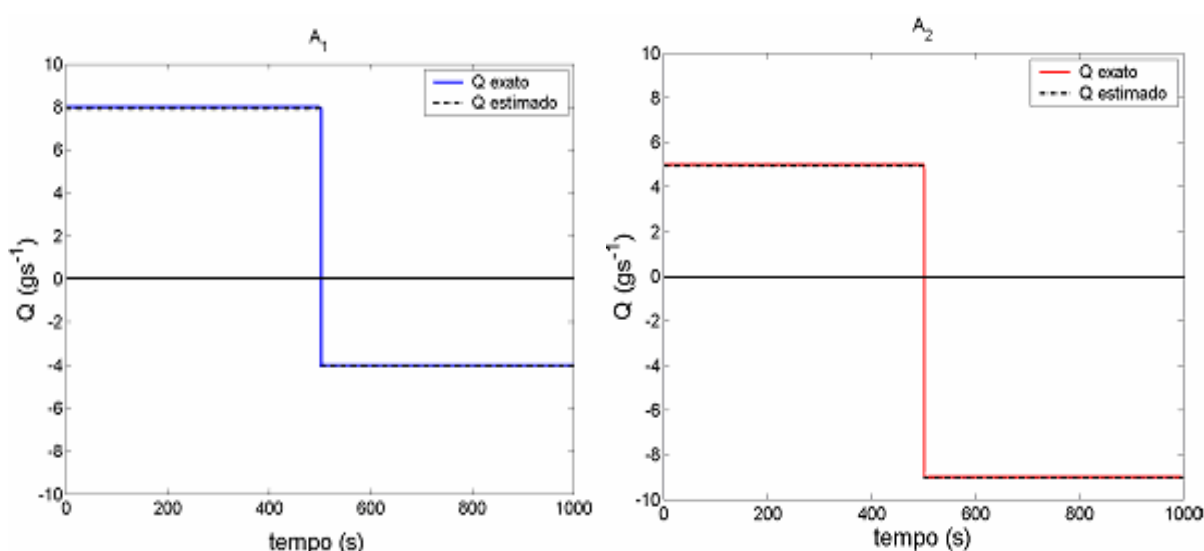


Figura 5.17 - Estimação da intensidade de emissão e absorção para as duas áreas do experimento numérico com o método de otimização SA.

5.7 CASO 6: Determinação da taxa de emissão e localização de fontes.

Num problema em que não se conhece a taxa de emissão de fontes de área e nem mesmo suas distribuições espaciais, Seibert (2000) sugere a divisão do domínio em várias pequenos subdomínios, representando diferentes fontes para então calcular-se a taxa de emissão de cada fonte. Para o uso desta técnica, o mesmo autor sugere ainda o uso de um modelo cuja integração temporal seja regressiva. A vantagem do uso desse tipo de modelo é um menor custo computacional quando se usa um modelo de partículas, p. ex., pois a

quantidade de partículas fictícias emitidas a partir de um sensor para o cálculo das trajetórias regressivas pode ser muito menor do que o número que normalmente seria necessário de partículas fictícias sendo emitidas de uma fonte área e as trajetórias calculadas de forma avançada, para uma representação estatística razoável.

Para um teste desta técnica na estimação da taxa de emissão e localização de diferentes fontes de área utilizamos um cenário computacional de $1500\text{ m} \times 1000\text{ m}$ onde duas regiões (\mathbf{R}_1 e \mathbf{R}_2) de $600\text{ m} \times 600\text{ m}$ de dimensão horizontal e 1 m de altura emitem contaminantes com diferentes taxas de emissão. A Figura 5.18 ilustra o cenário computacional, numa projeção bidimensional (x,y) ; os sensores são posicionados a 10 m de altura e dispostos horizontalmente conforme os valores apresentados na Tabela 5.17. Na Figura 5.18 dividimos o domínio em subdomínios de $300\text{ m} \times 200\text{ m} \times 1\text{ m}$. A intensidade de emissão para cada subdomínio é a seguinte:

$$\mathbf{R}_1 = S_{A_2} = S_{A_3} = S_{A_4} = S_{A_7} = S_{A_8} = S_{A_9} = 10\text{ gm}^{-3}\text{s}^{-1}$$

$$\mathbf{R}_2 = S_{A_{12}} = S_{A_{13}} = S_{A_{14}} = S_{A_{17}} = S_{A_{18}} = S_{A_{19}} = 20\text{ gm}^{-3}\text{s}^{-1}$$

$$S_{A_1} = S_{A_5} = S_{A_6} = S_{A_{10}} = S_{A_{11}} = S_{A_{15}} = S_{A_{16}} = S_{A_{20}} = S_{A_{21}} = S_{A_{22}} = S_{A_{23}} = S_{A_{24}} = S_{A_{25}} = 0$$

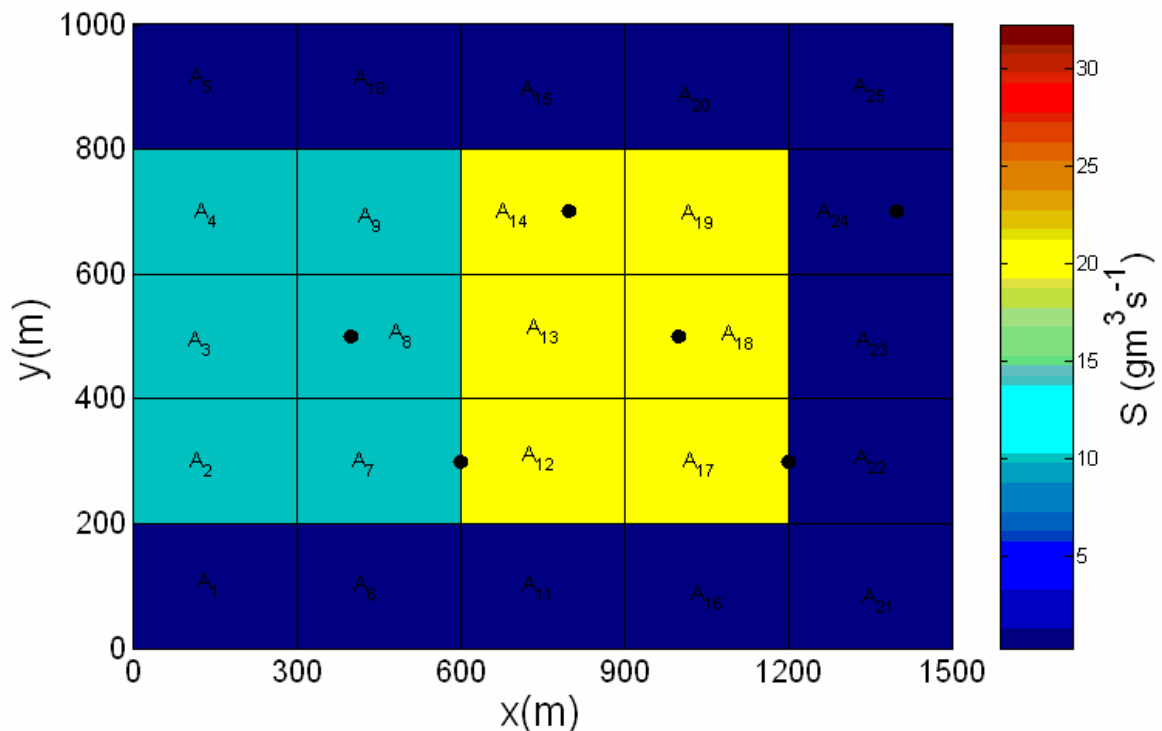


Figura 5.18 - Representação dos subdomínios, numa projeção bidimensional (x,y) , de um domínio com diferentes intensidades de emissão. A barra de cores representa a intensidade da emissão. O domínio é dividido em 25 subdomínios. Os pontos em preto, ●, representam os sensores.

Tabela 5.17 - Posição dos sensores no domínio físico.

Nº do Sensor	x (m)	y (m)
1	400	500
2	600	300
3	800	700
4	1000	500
5	1200	300
6	1400	700

Para simular o experimento numérico utilizamos a versão regressiva do modelo LAMBDA. Os mesmos parâmetros atmosféricos utilizados na Seção 3.3 para uma atmosfera verticalmente homogênea e estacionária foram usados aqui. A dimensão dos sensores, onde as partículas fictícias foram emitidas, foi de 0,1 m \times 0,1 m \times 0,1 m, centrados nas posições demonstradas na Tabela 5.18. As partículas são emitidas a partir de cada um dos sensores durante 1800 passos no tempo com $\Delta t = 1$ s, perfazendo um total de 30 min de simulação. Após 10 min, a concentração é calculada a cada 2 min, para os restantes 20 min da simulação. Desta forma, uma média é construída da seguinte forma:

$$C^{Mod}(x_j) = \frac{1}{10} \sum_{n=1}^{10} \left[\sum_{i=1}^{25} S_i \frac{\Delta t}{N_{PES,j}} N_{PVF,i,j,n} \right] \quad (5.19)$$

onde x_j é a posição de cada sensor com $j = 6$, $N_{PES,j}=1000$ é o número de partículas emitidas de cada sensor. $N_{PVS,i,j,n}$ é a quantidade de partículas fictícias no volume da i -ésima fonte no n -ésimo instante, emitidas do j -ésimo sensor.

Para testar a metodologia de problema inverso na estimação da intensidade e localização de fontes, duas séries de dados de concentração foram usadas como dados experimentais, obtidos da seguinte forma:

$$C^{Exp}(x_j) = C^{Mod}(x_j)[1 + \sigma\mu] \quad (5.20)$$

Experimento-1 - $\sigma = 0,05$ representando um erro de 5% nos dados experimentais em relação

aos dados do modelo matemático;

Experimento-2: $\sigma = 0,1$ representando um erro de 10% nos dados experimentais em relação aos dados do modelo matemático.

O método de otimização Quase-Newton é usado para minimizar o funcional:

$$F(\alpha, \mathbf{S}) = \sum_{j=1}^6 \left[C_j^{Mod}(\mathbf{S}) - C_j^{Exp} \right]^2 + \alpha \Omega(\mathbf{S}) \quad (5.21)$$

onde o vetor \mathbf{S} representa a intensidade de emissão dos 25 subdomínios, apresentados na Figura 5.18, $\mathbf{S} = [S_{A_1}, S_{A_2}, \dots, S_{A_{25}}]^T$. Assim temos 25 elementos a serem estimados. A primeira informação *a priori* é a posição dos subdomínios cujas emissões são nulas. Desta forma, o número de parâmetros a serem estimados pelo método inverso diminui para 12, $\mathbf{S} = [S_{A_2}, S_{A_3}, S_{A_4}, S_{A_7}, S_{A_8}, S_{A_9}, S_{A_{12}}, S_{A_{13}}, S_{A_{14}}, S_{A_{17}}, S_{A_{18}}, S_{A_{19}}]$. A segunda informação *a priori* é uma suavidade na solução, calculada pelo método de regularização de máxima entropia de ordem 2.

Os resultados da estimação da intensidade das fontes para o Experimento-1 são apresentados na Tabela 5.18 e na Figura 5.19. O ponto de máxima curvatura da curva Suavidade \times Fidelidade (método da curva L) foi utilizado para obter o melhor valor do parâmetro de regularização, sendo este $\alpha = 1 \times 10^{-6}$. Os resultados para o Experimento-2 são apresentados na Tabela 5.19 e Figura 5.20. Estes resultados são obtidos com o uso de um parâmetro de regularização de $\alpha = 1 \times 10^{-5}$.

O erro entre os valores exatos e estimados pelo experimento é calculado da seguinte forma:

$$E_S(\%) = 100 \frac{1}{12} \sum_{i=1}^{12} \left[\frac{|S_i^{estimado} - S_i^{exato}|}{S_i^{exato}} \right]. \quad (5.22)$$

No Experimento-1 encontramos um erro global em torno de 15% para a solução inversa e se analisarmos os valores para cada região com a mesma taxa de emissão (\mathbf{R}_1 e \mathbf{R}_2), essa mesma porcentagem de erro (15%) é encontrada em cada uma delas. No Experimento-2, o erro foi novamente em torno de 15%, mas para a região \mathbf{R}_1 um erro de 12% foi encontrado e

para a região R_2 o erro foi de 17%, indicando que a solução inversa foi capaz de localizar as regiões cujas emissões eram iguais.

Uma outra análise pode ser feita com relação à estimação individual em cada uma das áreas. Por exemplo no Experimento-1, as estimações com um erro abaixo da média ocorreram em quase 70% das áreas, no entanto, as fontes A_9 e A_{14} apresentaram um erro de 55% e 42%, respectivamente. Já para o Experimento-2, 50% das estimações estavam abaixo da média sendo as piores estimações (erro em torno de 30%) nas áreas A_{12} , A_{14} 30% e 29%, respectivamente. Desta forma pode-se concluir que embora o erro global nos experimentos tenha sido o mesmo, o Experimento-1 foi melhor estimado pela técnica de inversão, sugerindo, como esperado, que um menor erro experimental nos dados de concentração apresenta melhores resultados para a estimação.

Destes resultados apresentados nesta seção ressalta-se a robustez do método QN em estimar intensidade e localização de fontes, pois mesmo num problema em que o número de parâmetros a serem estimados é maior que o número de concentrações medidas experimentalmente, o método apresenta-se eficiente. O uso do algoritmo LM (implementado na rotina DBCLSF, da biblioteca IMSL) não foi possível para este problema, pois temos 12 parâmetros a serem estimados e apenas 6 valores de concentração (6 sensores). O método SA não foi testado para este experimento devido ao seu alto custo computacional, já comprovado nos experimentos anteriores.

Tabela 5.18 - Valores da estimação da intensidade das fontes, utilizando o método de otimização QN, com os dados do Experimento-1.

	$S^{exato} (\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1})$	$S^{estimado} (\text{gm}^{-3}\text{s}^{-1})$
S_{A_2}	10,0	9,82
S_{A_3}	10,0	9,63
S_{A_4}	10,0	11,26
S_{A_7}	10,0	8,76
S_{A_8}	10,0	11,06
S_{A_9}	10,0	15,51
$S_{A_{12}}$	20,0	20,12
$S_{A_{13}}$	20,0	19,25
$S_{A_{14}}$	20,0	11,52
$S_{A_{17}}$	20,0	17,88
$S_{A_{18}}$	20,0	23,82
$S_{A_{19}}$	20,0	23,44

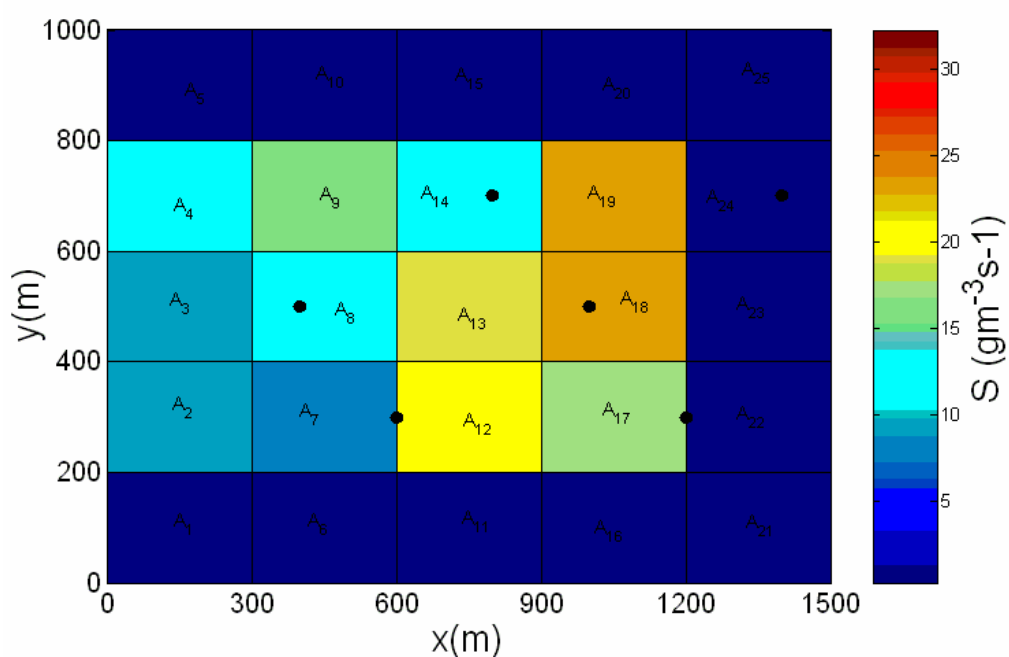


Figura 5.19 Representação da intensidade de emissão das fontes estimadas com os dados do Experimento-1.

Tabela 5.19 - Valores da estimação da intensidade das fontes, utilizando o método de otimização QN, com os dados do Experimento-2.

	$S^{exato} \text{ (gm}^{-3}\text{s}^{-1}\text{)}$	$S^{estimado} \text{ (gm}^{-3}\text{s}^{-1}\text{)}$
S_{A_2}	10,0	8,972
S_{A_3}	10,0	9,970
S_{A_4}	10,0	12,529
S_{A_7}	10,0	7,989
S_{A_8}	10,0	10,149
S_{A_9}	10,0	11,563
$S_{A_{12}}$	20,0	13,847
$S_{A_{13}}$	20,0	22,651
$S_{A_{14}}$	20,0	14,141
$S_{A_{17}}$	20,0	19,991
$S_{A_{18}}$	20,0	21,175
$S_{A_{19}}$	20,0	24,903

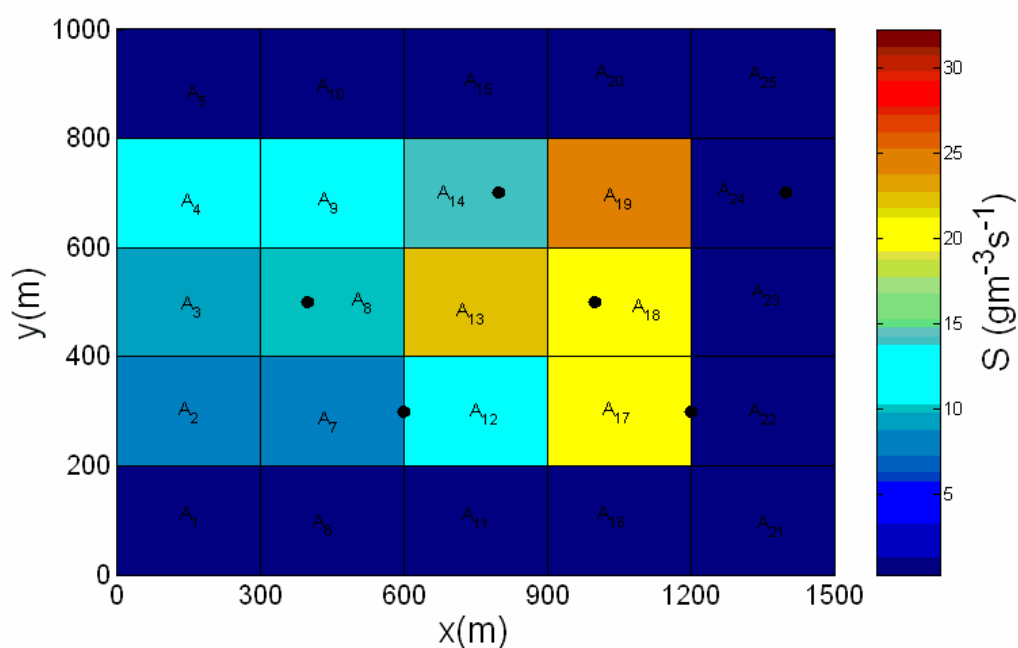


Figura 5.20 - Representação da intensidade de emissão de fontes estimadas com os dados do Experimento-2.

5.8 CASO 7: Estimação da dimensão e localização horizontal de uma fonte área

Num último exemplo, apresentamos um problema acadêmico: estimação da dimensão de uma fonte e a sua localização. Para este problema utiliza-se a integração regressiva de um modelo de partículas Lagrangeano. Para isto, faz-se um catálogo da trajetória das partículas emitidas a partir do sensor e, num pós-processamento, modificando-se apenas a dimensão e/ou a localização da fonte, para se determinar o valor de concentração no sensor. Caso fosse usado um modelo cuja integração temporal é avançada, para cada configuração de fonte deveríamos rodar novamente o modelo direto, fazendo com que a estimação tivesse um alto custo computacional.

O mesmo cenário computacional apresentado na Seção 2.5.1 foi utilizado aqui para o teste da metodologia de problema inverso na estimação da localização de uma fonte (Figura 5.21). Os mesmos valores dos parâmetros turbulentos usados no modelo Lagrangeano LAMBDA-regressivo apresentados naquela seção são usados aqui sob uma condição de atmosfera verticalmente homogênea e estacionária. O campo de concentração experimental foi obtido da seguinte forma:

$$C^{Exp}(\vec{x}) = C^{Mod}(\vec{x})[1 + \sigma\mu] \quad (5.23)$$

onde $C^{Mod}(\vec{x}) = C^r(\vec{x})$ são os dados apresentados na Tabela 2.3 e $\sigma = 0,1$ representando um erro de 10%.

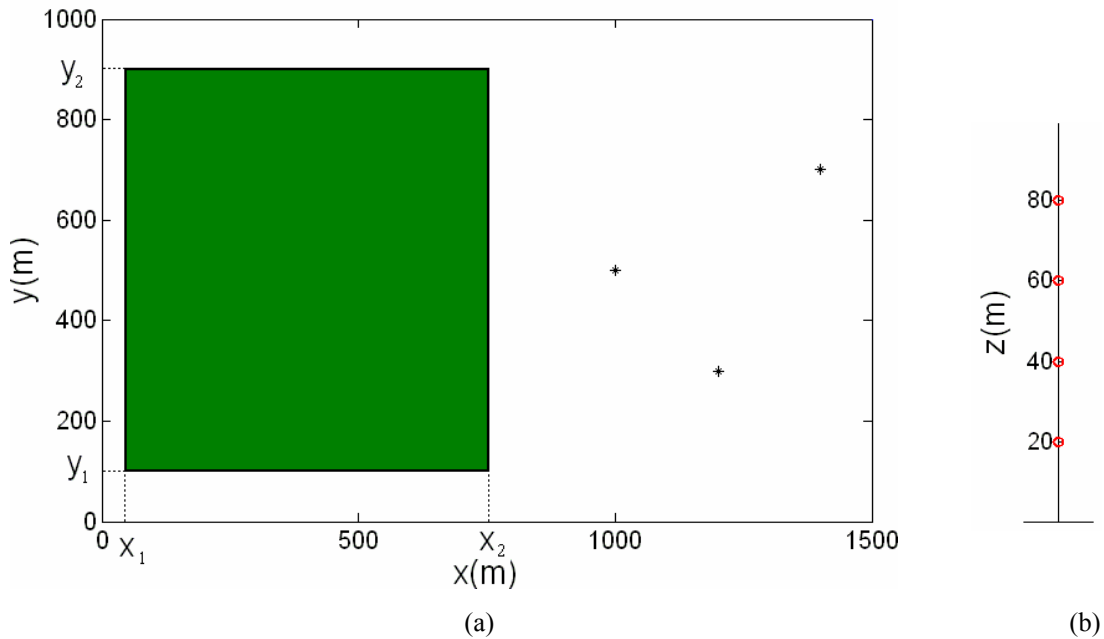


Figure 5.21 - Projeção bidimensional do domínio físico, onde * representam a posição horizontal (a) e vertical dos sensores (b).

Para estimar a dimensão horizontal de uma fonte volumétrica a partir de dados de 12 sensores, utilizamos um método de regularização de máxima entropia de ordem zero e o método de otimização QN para minimizar o funcional:

$$F(\alpha, \mathbf{D}) = \sum_{j=1}^{12} \left[C_j^{Mod}(\mathbf{D}) - C_j^{Exp} \right]^2 + \alpha \Omega(\mathbf{D}) \quad (5.24)$$

onde o vetor \mathbf{D} representa os lados da área horizontal da fonte, $\mathbf{D} = [x_1, x_2, y_1, y_2]^T$, tendo-se 4 parâmetros a serem estimados. A técnica da máxima curvatura da curva expressando a relação Suavidade \times Fidelidade entre os dados experimentais e do modelo (curva L), foi empregada para se determinar o parâmetro de regularização que apresenta os melhores resultados. O ponto de máxima curvatura representa o parâmetro $\alpha = 90$. Os valores da estimativa com este valor de parâmetro de regularização são apresentados na Tabela 5.20 e representados na Figura 5.22. A estimativa inicial de \mathbf{D} foi um ponto centrado em (400, 500).

A estimativa da localização da fonte através da metodologia de problema inverso, apresenta um erro em torno de 8% para o experimento, no entanto, exceto o lado y_1 da fonte, cujo erro entre o valor exato e o estimado é de 28%, os erros individuais da estimativa são de

apenas 1%. Estes resultados demonstram a robustez da metodologia empregada para a estimação da dimensão horizontal de uma fonte volumétrica.

Tabela 5.20 - Valores da estimação da dimensão horizontal de fonte pelo problema inverso, com regularização entrópica de ordem zero e método de otimização QN.

	D^{exato} (m)	$D^{estimado}$ (m)
x_1	100	101
x_2	800	808
y_1	100	128
y_2	900	910

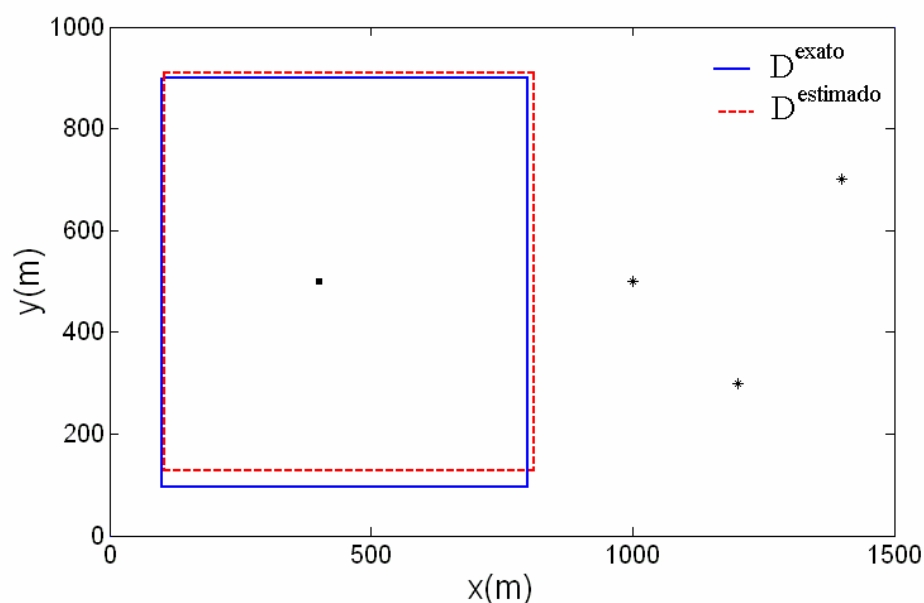


Figura 5.22 - Comparação entre o valor exato do domínio horizontal (em azul) e do valor obtidos pelo método inverso (vermelho). A estimativa inicial para o domínio da fonte é representado por ■ e * representa a posição horizontal dos sensores.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

Nesta tese, uma metodologia de problema inverso, formulada como um problema de otimização, foi utilizada na estimação de coeficientes de difusão vertical sob condição de atmosfera neutra e convectiva. Além do mais, empregando a mesma técnica, foram obtidos um termo de contra-gradiente e termos de fonte. Para este último, diversos cenários físicos foram representados. A otimização foi resolvida por técnicas determinísticas (método Quase-Newton e Levenberg-Marquardt) e estocásticas (recozimento simulado - *Simulated Annealing*). Quando da necessidade do uso de regularização, o esquema de Tikhonov ou de máxima entropia de segunda ordem foi utilizado juntamente com o método da curva L (método de Hansen) para a determinação do melhor parâmetro de regularização.

Na estimação do coeficiente de difusão vertical um procedimento de inversão implícita foi utilizado e foram testados os três métodos de otimização com a regularização de máxima entropia de segunda ordem. Um modelo Euleriano foi usado como modelo direto. O método Quase-Newton gerou melhores resultados em todas as situações estudadas, ou seja, diferentes níveis de ruído nos dados experimentais e diferentes condições de estabilidade atmosférica (convectiva e neutra). O método Levenberg-Marquardt resolve o problema quando a função a ser estimada é aproximada por uma função conhecida, na qual os parâmetros são desconhecidos. Já o método *Simulated Annealing* não apresenta bons resultados para esta estimação.

Na estimação do termo de contra-gradiente utilizou-se o mesmo procedimento de inversão implícita que para a estimação do coeficiente de difusão, com o método de otimização Quase-Newton e operador de regularização de Tikhonov e de máxima entropia de segunda ordem. Os resultados representam uma boa estimativa do termo. Todavia, a estimação deste termo não é indicada para a decisão entre as diferentes parametrizações analisadas. Esta é a primeira vez que o termo de contra-gradiente é estimado através de uma metodologia de problema inverso.

Para a estimação do termo de fonte, 6 casos foram testados. O uso da metodologia de problema inverso desenvolvida utilizando um modelo fonte-receptor lagrangeano apresentou bons resultados. Sempre utilizando regularização, o método de otimização Quase-Newton apresentou-se mais eficiente nos casos em que se procurava estimar funções, tais como intensidades de emissão em função do tempo ou função da posição. Por outro lado, no uso do método *Simulated Annealing* não houve a necessidade de utilização de regularização. No entanto, este método resolveu a maioria dos problemas em que se pretendia estimar a intensidade da fonte como um parâmetro. Para o problema de estimação da dimensão horizontal de uma fonte, o método Quase-Newton foi eficiente utilizado-se de regularização.

6.1 – Metodologia de Problema Inverso no ciclo de CO₂ atmosférico

Marengo & Horta (2004) apresentam dados de fluxo de CO₂ para diferentes coberturas vegetais para as regiões norte e centro-oeste do Brasil para a estação seca (Figura 6.1a). Nesta figura as estações de coleta de dados Manaus K34, Caxiuana e Jaru estão em regiões de florestas, sendo as duas primeiras em floresta primária e a estação Fazenda NS coleta dados de fluxo de CO₂ em meio a uma pastagem. Nota-se a diferença no fluxo de CO₂ entre as regiões de floresta e de pastagem. Nas florestas, a respiração (período noturno) e a fotossíntese (período diurno) são mais intensas que na pastagem. O comportamento do ciclo diurno do CO₂ pode ser aproximado por dois parâmetros basicamente (interpolados linearmente), como mostra a Figura 6.1b.

A metodologia de PI desenvolvida nesta tese para a estimação de termos de fonte pode ser aplicada como alternativa na estimativa de fluxos de CO₂ da floresta amazônica, por exemplo. Para tanto dois tipos de modelagem de floresta podem ser utilizados. A primeira é uma visão da floresta como um todo, assim o que se estimaria é um fluxo médio, ou seja, taxa média de emissão de CO₂ durante o dia e absorção durante a noite. Desta forma, apenas dois parâmetros deveriam ser estimados, como representado na Figura 6.1b. Uma segunda forma de interpretar o problema, e mais complexa, seria a distinção entre diferentes coberturas vegetais, por exemplo, áreas na região amazônica onde se tem floresta, pastagem ou área desmatada. Neste caso, o domínio deve ser dividido em outros subdomínios, onde cada subdomínio terá sua taxa de emissão ou consumo de CO₂ durante o ciclo diurno (como na Figura 6.1a)

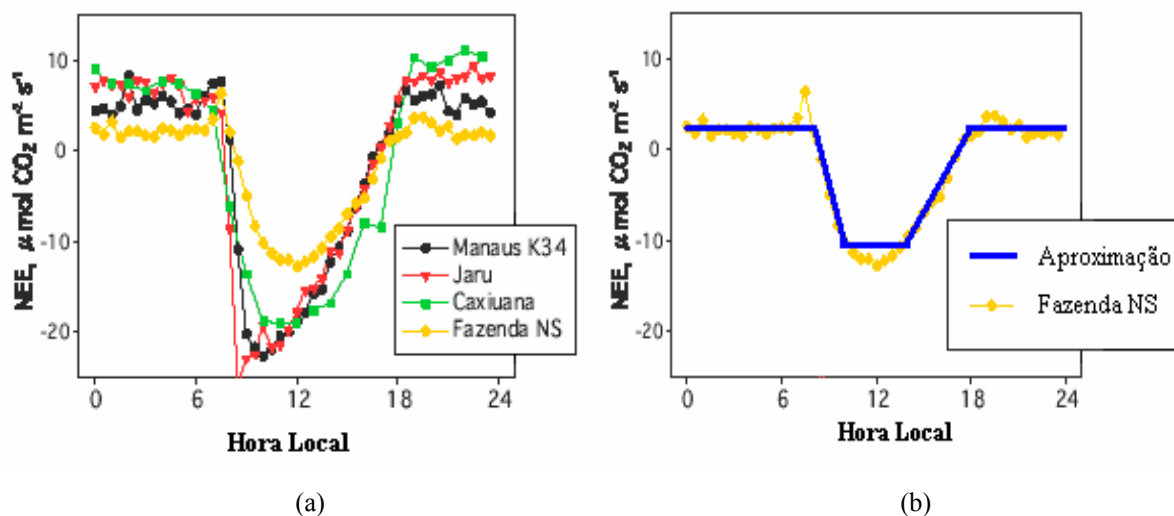


Figura 6.1 - (a) Média diurna padrão do fluxo de CO₂ em quatro locais. Extraído de Marengo & Horta (2004). (b) Dados da Fazenda NS com valores aproximados.

A metodologia de PI utilizada na Seção 5.6 obteve bons resultados quando, num domínio, dois subdomínio apresentam diferentes intensidades de emissão e absorção. No entanto, naquele exemplo, tínhamos 56 sensores medindo concentração numa área de 1500 m \times 1000 m. Num problema real, o número de sensores por área é muito menor do que usamos no exemplo. Assim, uma alternativa é o uso da metodologia utilizada na Seção 5.7, onde um número muito reduzido de sensores foi utilizado para estimar a taxa de emissão de duas fontes área em que não se conhecia a localização. Não obstante, estas metodologias não levam em conta a contribuição de fontes distantes, fora do domínio do modelo matemático, para a concentração nos sensores. Portanto, deve-se ainda considerar que existe um fluxo de gases através dos domínios laterais do modelo (Uliasz, 2004).

6.2 – Trabalhos Futuros

Nesta tese utilizou-se, como modelo direto, modelos simplificados de dispersão de poluentes (homogeneidade horizontal, terreno plano), a sugestão para futuras pesquisas é a utilização de modelos que abrangem uma escala maior, em que os parâmetros atmosféricos variem tanto temporal quanto espacialmente e o campo de vento seja obtido de um modelo meteorológico de meso-escala, por exemplo CALLMET (Scire et al., 2000).

A metodologia desenvolvida nesta tese poderá ser utilizada na investigação do inventário de fontes poluidoras em grandes cidades ou regiões metropolitanas, além do uso na identificação de focos de queimadas, e do ciclo de CO₂, por exemplo.

A estimativa de parâmetros tais como a escala de tempo Lagrangeana e a constante de Kolmogorov podem ser estimadas com a metodologia de inversão implícita, tendo como modelo direto um modelo Lagrangeano. Para tanto, em cada modificação no vetor de parâmetros desconhecidos, ou seja, em cada iteração do método de otimização, as partículas devem ser reemitidas para a avaliação do campo turbulento, o que implica num elevado custo computacional. Uma alternativa é a paralelização do modelo Lagrangeano e/ou do método de otimização. O modelo Lagrangeano já foi paralelizado durante as atividades da tese para uma futura estimação destes parâmetros.

Além dos métodos de otimização utilizados nesta tese, sugere-se testes com outros algoritmos, tais como Gradiente Conjugado (Chiwiacowsky et al., 2003), e/ou outros métodos estocásticos: algoritmos genéticos (Holland, 1975; Chiwiacowsky et al., 2003; Sambatti, 2004), colônias de insetos sociais (“ant colony system”) (Dorigo et. Al, 1996), etc. No método *Simulated Annealing* pode-se ainda usar outras estatísticas, ao invés da distribuição de Boltzmann: distribuição de Cauchy, C. Tsallis, e o *Simulated Re-Annelaing*, entre outras variações.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANFOSSI, D Comunicação pessoal em 2004.

ANFOSSI, D. et al. Comparison among empirical probability density functions of the vertical velocity in the surface layer based on higher order correlations. **Boundary Layer Meteorology**, v. 82, p. 193-218, 1996.

ANFOSSI D. et al. Crescita dello strato rimescolato nelle prime ore dopo l'alba. In: **LXIV Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica**, Siena, 1978.

BAERENTSEN, J.H. & BERKOWICZ, R. Monte Carlo Simulation of Plume Dispersion in the Convective Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v. 18, p. 701-712, 1984.

BALDOCHI, D. A Lagrangian random walk model for simulating water vapor, CO₂ sensible heat densities and scalar profiles over and within a soybean canopy. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 61, p. 113-144, 1992.

BECK, J. V.; BLACKWELL, B.; ST. CLAIR, H. R. JR. **Inverse Heat Conduction: Ill-posed Problems**. Nova York: A Wiley-Interscience Publication, 1985, 308 p.

CAMPOS VELHO, H.F. de et al. An automatic methodology for estimating eddy diffusivity from experimental data. **Il Nuovo Cimento**, v. 23(C), p. 65-84, 2000.

CAMPOS VELHO, H.F. **Problemas inversos: conceitos básicos e aplicações**. (2001) Disponível em <http://www.lac.inpe.br/~haroldo/CursoPI/CursoPI.pdf>

CARVALHO, J. C. et al. Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of contaminants released from tall and low stacks. **Meteorologische Zeitschrift**, v. 11, n.2, p. 89-97, 2002.

CAUGHEY, S.C. Observed Characteristics of the Atmospheric Boundary Layer. – In Nieuwstadt F.T.M. and Van Dop H. eds, **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling**, Reidel: Dordrecht, p. 107-158, 1982.

CAUGHEY, S.J. & PALMER, S.G. Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer. **Quarterly Journal of Royal Meteorology Society**, v. 105, p. 811-827, 1979.

COX, P. M. et al. Acceleration of global warming due to carbon-cycle feedbacks in a coupled climate model. **Nature**, v. 408, p.184-187, 2000.

CUIJPERS, J.W.M. & HOLTSLAG A.A.M. Impact of skewness and nonlocal effects on scalar and boundary fluxes in convective boundary layers. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.55, p. 151-162, 1998.

DEARDORFF, J.W. The counter-gradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 23, p.503-506, 1966.

DEGRAZIA, G.A. & MORAES, O.L.L. New model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 58, p. 205-241, 1992.

DEGRAZIA, G.A., CAMPOS VELHO, H.F. DE, CARVALHO, J.C. Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Beiträge Zur Physik der Atmosphäre**, v. 70, p. 57-64, 1997.

DEGRAZIA, G. A. Modelling dispersion from elevated sources in a planetary boundary layer dominated by moderate convection. **Il Nuovo Cimento**, v. 21C, n. 3, p. 345-353, 1998.

DEGRAZIA, G. A. et al. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v. 34, p. 3575-3583, 2000.

EGBERT G. D. & BAKER, M.B. Comments on paper “The effect of Gaussian particle-pair distribution functions in the statistical theory of concentration fluctuations in homogeneous turbulence” by B.L. SAWFORD. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.

109, 339-353. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 110, 1195-1199, 1984.

ENGL, H. W.; HANKE, M.; NEUBAUER, A. Regularization of inverse problems. In: _____. **Vol. 375 of Mathematics and its Applications**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers Group, 1996.

ENTING, I.G. **Inverse Problems in Atmospheric Constituent Transport**. Cambridge: University Press, 2002. 392p.

NAG Fortran Library: E04UCF ROUTINE. Oxford: Mark 17, 1995.

FERRERO, E., ANFOSSI, D., BRUSASCA G. Lagrangian particle model LAMBDA: evaluation against tracer data. **International Journal of Environment and Pollution**, v. 5, p. 360-374, 1995.

FERRERO E. & ANFOSSI D. Sensitivity analysis of Lagrangian Stochastic models for CBL with different PDF's and turbulence parameterizations". **Air Pollution Modelling and its Applications XII**, S.E. Gryning and N. Chaumerliac eds., New York: Plenum Press, 673-680, 1998a.

FERRERO, E. & ANFOSSI D. Comparison of PDFs, closures schemes and turbulence parameterizations in lagrangian stochastic models. **International Journal of Environment and Pollution**, v. 9, p. 384-410, 1998b.

FERRERO E. & ANFOSSI D. TINARELLI G., TAMIAZZO M. Intercomparison of Lagrangian stochastic models based on two different PDFs. **International Journal of Environment and Pollution**, v. 14, n. 1-6, p. 225-234, 2000.

FLESCHE, T. K. The footprint for flux measurements, from backward lagrangian stochastic models. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 78, p. 399-404, 1996.

FLESCH, T. K.; WILSON, J.D.; YEE, E. Backward-time lagrangian stochastic dispersion model and their application to estimate gaseous emissions. **Journal of Applied Meteorology** v. 34, p.1320-1332, 1995.

GARDINER, C.W. **Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and Natural Sciences**. 2nd ed. Alemanha: Spring-Verlag, 1985. 442p.

GRYNING S.E. & LYCK E. Atmospheric Dispersion from Elevated Source in an Urban Area: Comparison between tracer experiments and model calculations. **Journal Climate Applied Meteorology**, v. 23, p. 651-654, 1984.

GRYNING S.E. & LYCK E. The Copenhagen tracer experiments: reportingn of measurements. 1998. Disponível em < <http://www.risoe.dk/rispubl/VEA/ris-r-1054.html> >.

HANNA, S.R. A method of estimation vertical eddy transport in the planetary boundary layer using characteristics if the vertical velocity spectrum. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.25, p. 1026-1032, 1968.

HANNA, S.R. Applications in air pollution modeling. In: NIEUWSTAD, F.T.M. & H. VON DOP (Ed.) **Atmospheric turbulence and air pollution modeling**. Dordrecht: D. Reidel Publishing, 1982. p.275-310.

HANNA, S. R. Confidence Limits for Air Quality Model Evaluations, as Estimated by Bootstrap and Jackknife Resampling Methods. **Atmospheric Environment**, **23**, 1385–1398, 1989.

HANNA, S.R. Lagrangian and eulerian time-scale in the daytime boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, v. 20, p. 242-249, 1981.

HANSEN, P.C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve. **SIAM Review**, v. 34, p. 561-580, 1992.

HØJSTRUP J. Velocity spectra in the unstable boundary layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 39, p. 2239-2248, 1982.

HOLTSLAG A.A.M. & BOVILLE B.A. Local versus nonlocal boundary-layer diffusion in a global climate model. **Journal of Climate**, v. 6, 1825-1842, 1993.

HOLTSLAG, A.A.M. & MOENG, C.H. Eddy diffusivity and counter gradient transport in the convective boundary layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 48, p. 1690-1698, 1991.

IMSL MATH/LIBRARY. Users Manual, Houston: IMSL, 2.ed, 1991.

JAYNES E.T. Information theory and statistical mechanics. **Physical Review**, v. 10, p. 620-630, 1957.

KAIMAL J.C., et al. Turbulence structure in the convective boundary layer. **Journal of Atmospheric Science**, v. 33, p. 2152-2169, 1976.

KAIPIO J.P. Computational methods for electrical impedance tomography. In: **INVERSE PROBLEMS, DESIGN AND OPTIMIZATION SYMPOSIUM** (Keynote Lecture 2), Rio de Janeiro, 2004.

KASIBHATLA P., et al. (eds.) **Inverse Methods in Global Biogeochemical Cycles**. Washington: American Geophysical Union, 2000. 324p

KENDALL M., & STUART A. **The Advanced Theory of Statistic**. New York: MacMillan. 1977. 433p

KHJUN N. et al. Comparison of the Langrangian footprint model LPDM-B with an analytical footprint model. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 106, p. 349-355, 2003.

KIRKPATRICK JR., S.; GELATT, C.; VECCHI, M. Optimization by simulated annealing. **Decision science**, v. 220, n. 4598, p. 498-516, 1983.

LODOVICI, C.; MISICI, L.; PACELLI, G. The direct and inverse problem for two dimensional turbulent diffusion. **Il Nuovo Cimento**, v. 14, n. 3, p. 295-304, 1991.

LONGHETTO, A. **Boundary Layer Physics**. Amsterdam: Elsevier, 1978. 683p.

LUNDGREN T. S. Turbulent pair dispersion and scalar diffusion. **Journal Fluid Mechanics**, v. 111, p. 27-57, 1981.

MAHEY P. **Programação não linear: uma introdução à teoria e aos principais métodos**. Rio de Janeiro: Campus, 1987. 181p

MARENGO J. A. & HORTA L. CEOP reference sites in the LBA Continental Scale Experiment, **CEOP Newsletter**, n. 4, p. 6, 2004. Disponível em < <http://www.ceop.net> >

MUNIZ W.B.; RAMOS F.M.; CAMPOS VELHO H.F.: Entropy- and Tikhonov-based regularization techniques applied to the backwards heat equation, **Computation Mathematic Applied**, v. 40, p. 1071-1084, 2000.

NIEUWSTADT F.T. The Turbulent Structure of the Stable Nocturnal Boundary Layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 41, p. 2002-2216, 1984.

OLESEN H.R.; LARSEN S.E.; HOJSTRUP J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 29, p. 285-312, 1984.

PANCHEV, S. **Dynamic Meteorology**, D. Reidel Publishing Company, 1985. 360p.

PROJETO TRANSCOM. Disponível em < <http://transcom.colostate.edu/> >

RAMOS F.M. et al. Novel approaches on entropic regularization. **Inverse Problem**, v. 15, p. 1139-1148, 1999.

ROBERTI D.R., CAMPOS VELHO H.F. DE., DEGRAZIA G.A. Identifying counter-gradient term in atmospheric convective boundary layer. **Inverse Problems in Science and Engineering**, v. 12, n. 3, p. 329-339, 2004a.

ROBERTI D.R.; CAMPOS VELHO H.F. DE; DEGRAZIA G.A. Turbulent coefficients identification under convective and neutral conditions, In: **Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 29-August - 03-September, Fortaleza (CE), Brazil. 2004b.

ROBERTI D.R. et al. Parallel implementation of a lagrangian stochastic model for pollution dispersion, In: **16th Symposium on Computer Architecture and High Performance Computing**, October 27-29, Foz do Iguaçu (PR), Brazil, pp. 142-149, 2004c.

ROBERTI D.R., et al. Estimation of emission rate of pollutant atmospheric source. In: **5th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice**. July 11-15, Cambridge, UK. 2005. Aceito.

RODEAN H.C. **Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion**. Boston: American Meteorological Society, 1996. 84 p.

SARMIENTO J.L.; GRUBER N. Sinks for anthropogenic carbon. **Physics Today**, agosto, 2002.

SCHIMID H. P. Footprint modeling for vegetation atmosphere exchange studies: a review and perspective. **Agricultural and Forest Meteorology**, v.113, p. 159-183, 2002.

SCHLESINGER, W. H. **Biogeochemistry an analysis of global change**. San Diego: Academic Press. 1991. 443p.

SEIBERT, P. Inverse modelling with a Lagrangian particle dispersion model: application to point releases over limited time intervals. In: SCHIERMEIER, F.A., GRYNING, S. E. (Ed.), **Air Pollution Modeling and its Application**. São Paulo: Kluwer Academic Publishers, 2001, p. 381-390.

SEIBERT, P. Inverse modelling of Sulfur Emissions in Europe Based on Trajectories. In: KASIBHATLA P., et al. (Eds.) **Inverse Methods in Global Biogeochemical Cycles**. Washington: American geophysical Union, 2000. 324p

SEINFELD, J. H. **Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution**. Nova York: John Wiley & Sons Inc., 1986. 738p.

Shannon, C.E. A mathematical theory of communication. **Bell System Technical Journal**, v. 27, p. 379 - 423, 1948.

SORBJAN Z. **Structure of the Atmospheric Boundary Layer**, New Jersey: Prentice Hall, 1989. 317 p.

Stull, R. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic, 1988. 666 p.

TARANTOLA A. **Inverse Problems: methods for data fitting and model parameter estimation**. Amsterdam: Elsevier, 1988.

TAYLOR G.I. Diffusion by Continuous Movements. **Proc. of London Math. Soc.**, v. 20, p. 196-211, 1921.

TIKHONOV A.N. & ARSENIN V.I. **Solutions of Ill-posed Problems**. Washington: John Wiley & Sons, 1977.

THOMAS P. et al. **Experiment determination of the atmospheric dispersion parameter at the Karlsruhe Nuclear Research Center for 160 m and 195 m emission heights. Part 1: measured data**. KfK Report 3456. 1983.

THOMAS P. & NESTER K. **Experiment determination of the atmospheric dispersion parameter at the Karlsruhe Nuclear Research Center for 160 m and 195 m emission heights. Part 2: evaluation of measurements**. KfK Report 3457. 1984.

THOMSON, D.J. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 180, p. 529-556, 1987.

THOMSON D.J. Randon walk modelling of diffusion in inhomogeneous turbulence. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 110, p. 1107-1120, 1984.

TRATADO DE QUIOTO. Disponível em <http://www.mct.gov.br/clima/quioto/protocol.htm>

TROEN I. & MAHRT L. A simple model of the atmospheric boundary layer: Sensitivity to surface evaporation. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 37, p. 129-148, 1986.

WILSON K.D. A three dimensional correlation/spectral model for turbulent velocities in a convective boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 85, p. 35-52, 1997.

WYNGAARD J.C.; COTE O.R.; RAO K.S. Modeling of the atmospheric Boundary Layer. **Advances in Geophysics**, v. 18(A), p. 193-212, 1974.

ZANNETTI, P. **Air Pollution Modeling: Theories, Computational Methods and Available Software**. Nova York: Kluwer Academic Publisher, 1990. 444p.

ANEXO A

A análise estatística entre duas séries de dados de concentração pode ser obtida com base em um conjunto de índices estatísticos disponíveis na literatura (Hanna, 1989). Estes índices podem ser obtidos a fim de se comparar dados de concentrações experimentais com aqueles obtidas através de uma simulação numérica (modelo matemático) ou entre dados de duas simulações numéricas diferentes ou ainda entre duas séries de dados experimentais. Aqui apresentaremos o cálculo destes índices entre dados experimentais e modelados. Os índices estatísticos são os seguintes:

Erro fracional:

$$FB = \frac{\overline{C^{Exp}} - \overline{C^{Mod}}}{0,5 \left| \overline{C^{Exp}} - \overline{C^{Mod}} \right|}$$

onde $\overline{C^{Exp}}$ é a concentração experimental e $\overline{C^{Mod}}$ é a concentração obtida pelo modelo matemático. A variação deste índice é entre $-2 < FB < 2$, e revela se as concentrações médias simuladas superestimam ($FB < 0$) ou subestimam ($FB > 0$) as concentrações médias observadas. Quando FB tende a zero, $\overline{C^{Exp}}$ tende a $\overline{C^{Mod}}$.

Erro quadrático médio normalizado:

$$NMSE = \frac{\left(\overline{C^{Exp}} - \overline{C^{Mod}} \right)^2}{\overline{C^{Exp}} \overline{C^{Mod}}}$$

Representa a média das diferenças entre as concentrações observadas e simuladas elevada ao quadrado ($0 < NMSE < 1$). Quanto mais próximo de zero, menor é este erro.

Desvio fracional padrão:

$$FS = \frac{(\sigma^{Exp} - \sigma^{Mod})}{0,5(\sigma^{Exp} + \sigma^{Mod})}$$

onde σ é a variância dos dados. A indicação FS ($-2 < FS < 2$) mostra se a dispersão simulada em torno da concentração média é superestimada ou subestimada. Se $\sigma^{Exp} > \sigma^{Mod}$, o poluente simulado, está mais disperso que o observado e vice-versa. Entretanto, esse parâmetro deve ser analisado com restrições, pois podem existir casos onde $\overline{C^{Exp}} \neq \overline{C^{Mod}}$ e $\sigma^{Exp} = \sigma^{Mod}$.

Coefficiente de correlação:

$$COR = \frac{(\overline{C^{Exp}} - \overline{C^{Exp}})(\overline{C^{Mod}} - \overline{C^{Mod}})}{\sigma^{Exp} \sigma^{Mod}}$$

Mede o grau de relação linear existente entre as concentrações C^{Exp} e C^{Mod} . A variação deste índice é $-1 < COR < 1$. Quanto maior a qualidade do ajuste linear, mais próximo de +1 ou -1 estará o valor da COR . Não havendo uma relação linear entre as concentrações, tem-se $COR = 0$. Se $C^{Exp} = C^{Mod}$ significa que as concentrações simuladas estão perfeitamente relacionadas às concentrações observadas. No entanto este parâmetro deve ser analisado com cuidado, pois existem casos em que $C^{Exp} \neq C^{Mod}$ e $COR = \pm 1$.

Fator de dois:

$$FA2 = 0.5 < \frac{C^{Exp}}{C^{Mod}} < 2$$

Descreve o percentual de partículas que se encontram dentro de um erro de até 100%, $0 < FA2 < 1$. Quanto mais próximos de 1, melhores os resultados.