

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

LISIANE RAMIRES MENESES

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO  
SEMI-LAGRANGEANO PARA SIMULAR A DISPERSÃO  
DE POLUENTES NA ATMOSFERA**

CURITIBA

2015

LISIANE RAMIRES MENESES

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO  
SEMI-LAGRANGEANO PARA SIMULAR A DISPERSÃO  
DE POLUENTES NA ATMOSFERA**

Tese apresentada como requisito parcial à obtenção do título de doutor em Ciências, no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, Setores de Tecnologia e Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida.

CURITIBA

2015

---

M543 Meneses, Lisiane Ramires

Desenvolvimento de um modelo semi-lagrangeano para simular a dispersão de poluentes na atmosfera / Lisiane Ramires Meneses. – Curitiba, 2015.

149f. : il. [algumas color.] ; 30 cm.

Tese (doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setores de Tecnologia e Ciências Exatas, Programa de Pós-graduação em Métodos Numéricos em Engenharia .

Orientador: Ricardo Carvalho de Almeida.

1. Ar - Poluição. 2. Poluentes. 3. Modelos Matemáticos. I. Almeida, Ricardo Carvalho. II. Título.

CDD: 628.5

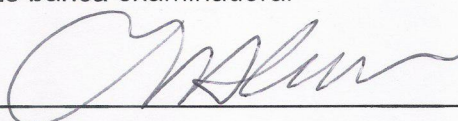
---

## TERMO DE APROVAÇÃO

LISIANE RAMIRES MENESES

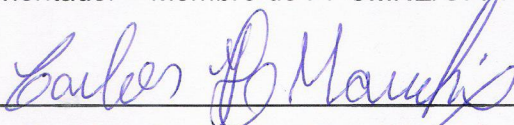
DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO SEMI-LAGRANGEANO PARA SIMULAR A  
DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de doutora no Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:



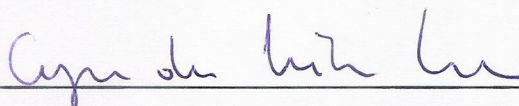
**Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida**

Orientador – Membro do PPGMNE/UFPR



**Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi**

Membro do PPGMNE/UFPR



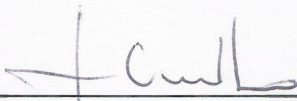
**Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha**

Membro do PPGMNE/UFPR



**Dr.<sup>a</sup> Diana Maria Cancelli**

Membro da ENVEX – Engenharia e Consultoria



**Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho**

Membro da UFPel

Curitiba, 21 de agosto de 2015.

# Agradecimentos

A Deus, agradeço por ter colocado em meu caminho pessoas tão especiais, as quais seja por um incentivo ou ensinamentos possibilitaram a realização deste trabalho.

Aos meus pais, Julio e Sirlei, agradeço pelo amor, incentivo e torcida não apenas durante a realização deste trabalho, mas por toda a minha vida.

A minha amada irmã Anelise, agradeço por ser esta pessoa maravilhosa, amiga, companheira, pelo incentivo, carinho e por acreditar sempre em mim.

Ao meu amor, Maurício, agradeço pelo carinho, amizade e cumplicidade compartilhados em todos estes anos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Almeida, agradeço por ser um exemplo enquanto professor e pesquisador, pelos ensinamentos, pelo apoio e pela confiança no meu trabalho.

Aos colegas da Coordenadoria de Matemática do Instituto Federal Sul-Rio-Grandense, agradeço pela oportunidade de afastamento, a qual tornou possível a realização deste trabalho.

# Resumo

No presente trabalho é apresentado um modelo bidimensional para simular a dispersão de poluentes na atmosfera, baseado na solução numérica da equação da difusão-advecção utilizando-se um esquema Semi-Lagrangiano de três níveis de tempo para a discretização do termo advectivo. É investigado o problema da dispersão de poluentes em condições atmosféricas estáveis e instáveis, através da realização de simulações com diferentes formulações para a difusividade turbulenta vertical. A validação do modelo é realizada por meio da comparação dos valores de concentração previstos pelo modelo com os observados em quatro experimentos de campo, o experimento de Copenhagen, o experimento de Cabauw, o experimento de Hanford e o experimento de Prairie Grass. Também é realizada uma comparação com os resultados obtidos a partir de outros modelos de dispersão. Além disso, é feita uma análise de sensibilidade das simulações com relação à variação dos parâmetros meteorológicos de entrada utilizados no modelo. A análise estatística mostra que o modelo simula os dados experimentais de forma satisfatória e apresenta resultados semelhantes aos obtidos por outros autores usando os modelos disponíveis na literatura.

**Palavras-chave:** dispersão atmosférica, método Semi-Lagrangiano, solução numérica, equação da advecção-difusão, camada limite atmosférica.

# Abstract

A two-dimensional Semi-Lagrangian numerical model to simulate pollutant dispersion in the atmospheric boundary layer on flat terrain is presented and tested. The model is based on the numerical solution of the advection-diffusion equation using a three-time-level Semi-Lagrangian scheme for the discretization of the advection term. The problem of pollutant dispersion in stable and unstable atmospheric conditions is investigated using two different parameterizations for the vertical turbulent diffusion coefficient. The performance of the model is discussed from the confrontation of the concentration values observed in the dispersion experiments of Copenhagen, Cabauw, Hanford e Prairie Grass with the ones simulated by the model. Furthermore, is held an sensibility analysis with respect of the variation of meteorological parameters of input used in the model. The statistical analysis shows that the model simulates the experimental data in a satisfactory way and presents results similar to the ones obtained by other authors using the models available in the literature.

**Keywords:** atmospheric dispersion, Semi-Lagrangian method, numerical solution, advection-diffusion equation, atmospheric boundary layer.

# Lista de Figuras

2.1	Divisão da troposfera em função da influência da superfície no escoamento do ar. Fonte: Stull [5] (Figura adaptada). . . . .	6
2.2	Evolução da Camada Limite Atmosférica. Fonte: Stull [5] (Figura adaptada). . . . .	7
2.3	Representação da dispersão de uma pluma em regiões de <i>updrafts</i> e <i>down-drafts</i> . . . . .	10
2.4	Representação da dispersão de uma pluma de contaminates emitida durante a noite. . . . .	10
2.5	Representação da dispersão de uma pluma de contaminates. . . . .	11
2.6	Representação esquemática de uma pluma Gaussiana. Fonte: Turner [29] (Figura adaptada). . . . .	18
2.7	Esquema de três níveis de tempo para advecção. . . . .	23
2.8	Esquema de pontos utilizados na interpolação. . . . .	25
3.1	Esquema representativo do problema físico a ser estudado. . . . .	27
3.2	Perfil vertical da velocidade média do vento. O comprimento de rugosidade $z_0$ é a altura onde a velocidade do vento é nula. . . . .	32
4.1	Esquema representativo do domínio de solução do problema. . . . .	33
4.2	Pontos com espaçamento não uniforme na direção $z$ . . . . .	35
5.1	Experimento Copenhagen. Fonte: Figura adaptada de Gryning e Lyck [56] . . . . .	38
5.2	Mapa da área da região de Cabauw com os locais das estações lançamento pré-selecionados. Fonte: Figura adaptada de Agterberg <i>et al.</i> [59]. . . . .	40
6.1	Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Copenhagen ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia <i>et al.</i> [52] (azul) e Ulke [53] (vermelho) para diferentes espaçamentos de grade. O diagrama (a) refere-se a Grade 1 e o diagrama (b) refere-se a Grade 2. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. . . . .	49



6.2	Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $\text{s.m}^{-2}$ ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 1 de Copenhagen. . . . .	51
6.3	Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $\text{s.m}^{-2}$ ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 5 de Copenhagen. . . . .	51
6.4	Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 1 de Copenhagen. . . . .	52
6.5	Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 5 de Copenhagen. . . . .	52
6.6	Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 1 de Copenhagen. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível $z_i/2$ e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível $z_i$ . . . . .	53
6.7	Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 1 de Copenhagen. . . . .	53
6.8	Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 5 de Copenhagen. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível $z_i/2$ e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível $z_i$ . . . . .	54
6.9	Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 5 de Copenhagen. . . . .	54
6.10	Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Cabauw ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia <i>et al.</i> [52] (azul) e Ulke [53] (vermelho) para diferentes espaçamentos de grade. O diagrama (a) refere-se a Grade 1 e o diagrama (b) refere-se a Grade 2. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. . . . .	57
6.11	Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $\text{s.m}^{-2}$ ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 4A de Cabauw. . . . .	59
6.12	Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $\text{s.m}^{-2}$ ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 9B de Cabauw. . . . .	59
6.13	Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 4A de Cabauw. . . . .	60
6.14	Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 9B de Cabauw. . . . .	60

6.15	Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 4A de Cabauw. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível $z_i/2$ e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível $z_i$ . . . . .	61
6.16	Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 4A de Cabauw. . . . .	61
6.17	Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 9B de Cabauw. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível $z_i/2$ e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível $z_i$ . . . . .	62
6.18	Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 9B de Cabauw. . . . .	62
6.19	Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Hanford ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia <i>et al.</i> [52] e Ulke [53] para diferentes espaçamentos de grade. O diagrama (a) refere-se a Grade 1 e o diagrama (b) refere-se a Grade 2. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. . . . .	65
6.20	Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $\text{s.m}^{-2}$ ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 2 de Hanford. . . . .	66
6.21	Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 2 de Hanford. . . . .	66
6.22	Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 2 de Hanford. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível $z_i/2$ e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível $z_i$ . . . . .	67
6.23	Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 2 de Hanford. . . . .	67
6.24	Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, para todas as condições de estabilidade, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia <i>et al.</i> [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. . . . .	73

6.25	Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass ( $C_o$ ) para atmosfera instável, e previstas pelo modelo Semi-Lagranegano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia <i>et al.</i> [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. . . . .	74
6.26	Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $\text{s.m}^{-2}$ ( $.10^{-4}$ ), para o experimento 1 de Prairie Grass. . . . .	75
6.27	Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 1 de Prairie Grass. . . . .	75
6.28	Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 1 de Prairie Grass. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível $z_i/2$ e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível $z_i$ . . . . .	76
6.29	Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 1 de Prairie Grass. . . . .	76
6.30	Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass ( $C_o$ ) para atmosfera estável, e previstas pelo modelo Semi-Lagranegano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia <i>et al.</i> [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. . . . .	77
6.31	Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $\text{s.m}^{-2}$ ( $.10^{-4}$ ), para o experimento 17 de Prairie Grass. . . . .	79
6.32	Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 17 de Prairie Grass. . . . .	79
6.33	Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 17 de Prairie Grass. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível $z_i/2$ e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível $z_i$ . . . . .	80
6.34	Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 17 de Prairie Grass. . . . .	80
6.35	Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 50 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade. . . . .	81

6.36	Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 100 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade. . . . .	82
6.37	Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 200 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade. . . . .	83
6.38	Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 400 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade. . . . .	84
6.39	Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 800 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. O gráfico (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e o gráfico (b) a condições de estabilidade. . . . .	85
6.40	Diagrama residual para atmosfera instável e comprimento de Monin-Obukhov.	86
6.41	Diagrama residual para atmosfera estável e comprimento de Monin-Obukhov.	86
7.1	Diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Copenhagen ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia <i>et al.</i> [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. O gráfico (a) refere-se ao período I, o gráfico (b) ao período II e o (c) ao período III. . . . .	94
8.1	Índices estatísticos $F_b$ (a), $F_s$ (b), $Nmse$ (c), $Cor$ (d) e $FA2$ (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Copenhagen. . . . .	97
8.2	Índices estatísticos $F_b$ (a), $F_s$ (b), $Nmse$ (c), $Cor$ (d) e $FA2$ (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Cabauw.	98
8.3	Índices estatísticos $F_b$ (a), $F_s$ (b), $Nmse$ (c), $Cor$ (d) e $FA2$ (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Hanford.	99
8.4	Índices estatísticos $F_b$ (a), $F_s$ (b), $Nmse$ (c), $Cor$ (d) e $FA2$ (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Prairie Grass. . . . .	100

8.5	Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano, com e sem as variações da velocidade de atrito $u_*$ (a), da escala de velocidade convectiva vertical $w_*$ (b), do comprimento de Obukhov $L$ (c), da altura da CLA $z_i$ (d) e do comprimento de rugosidade $z_0$ (e), para o experimento 1 de Copenhagen. . . . .	102
8.6	Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano, com e sem as variações da velocidade de atrito $u_*$ (a), da escala de velocidade convectiva vertical $w_*$ (b), do comprimento de Obukhov $L$ (c), da altura da CLA $z_i$ (d) e do comprimento de rugosidade $z_0$ (e), para o experimento 5 de Copenhagen. . . . .	103
8.7	Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano, com e sem as variações da velocidade de atrito $u_*$ (a), da escala de velocidade convectiva vertical $w_*$ (b), do comprimento de Obukhov $L$ (c), da altura da CLA $z_i$ (d) e do comprimento de rugosidade $z_0$ (e), para o experimento 9B de Cabauw. . . . .	104
8.8	Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano, com e sem as variações da velocidade de atrito $u_*$ (a), da escala de velocidade convectiva vertical $w_*$ (b), do comprimento de Obukhov $L$ (c), da altura da CLA $z_i$ (d) e do comprimento de rugosidade $z_0$ (e), para o experimento 2 de Hanford. . . . .	105
8.9	Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano, com e sem as variações da velocidade de atrito $u_*$ (a), da escala de velocidade convectiva vertical $w_*$ (b), do comprimento de Obukhov $L$ (c), da altura da CLA $z_i$ (d) e do comprimento de rugosidade $z_0$ (e), para o experimento 56 de Prairie Grass. . . . .	106
8.10	Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano, com e sem as variações da velocidade de atrito $u_*$ (a), da escala de velocidade convectiva vertical $w_*$ (b), do comprimento de Obukhov $L$ (c), da altura da CLA $z_i$ (d) e do comprimento de rugosidade $z_0$ (e), para o experimento 61 de Prairie Grass. . . . .	107

# Lista de Tabelas

5.1	Parâmetros micrometeorológicos do experimento Copenhagen. . . . .	38
5.2	Velocidade de atrito $u_*$ , em $ms^{-1}$ , para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Cada passo de tempo corresponde a 10 min.	39
5.3	Comprimento de Monin-Obukhov $L$ , em $m$ , para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Cada passo de tempo corresponde a 10 min. . . . .	39
5.4	Parâmetros micrometeorológicos do experimento Cabauw. . . . .	41
5.5	Parâmetros micrometeorológicos do experimento Hanford. . . . .	42
5.6	Parâmetros micrometeorológicos do experimento Prairie Grass (Casos Instáveis).	43
5.7	Parâmetros micrometeorológicos do experimento Prairie Grass (Casos Estáveis).	44
6.1	Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano para o experimento Copenhagen, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	48
6.2	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Copenhagen simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	48
6.3	Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano para o experimento Cabauw, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	56
6.4	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	57

6.5	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw (atmosfera instável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	57
6.6	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw (atmosfera estável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	58
6.7	Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano para o experimento Hanford, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	64
6.8	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Hanford simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke para diferentes espaçamentos de grade. . . . .	65
6.9	Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano (S-L) para o experimento Prairie Grass (atmosfera instável). Erro relativo para os valores de concentração previstas pelo modelo S-L utilizando as formulações de $K_z$ propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke, nas primeira e segunda linhas, respectivamente. . . . .	69
6.10	Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano (S-L) para o experimento Prairie Grass (atmosfera instável). Erro relativo para os valores de concentração previstas pelo modelo S-L utilizando as formulações de $K_z$ propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke, nas primeira e segunda linhas, respectivamente. . . . .	71
6.11	Índices estatísticos calculados para todos os dados dos experimentos de Prairie Grass simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. . . . .	72
6.12	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Prairie Grass (atmosfera instável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. . . . .	74

6.13	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Prairie Grass (atmosfera estável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. . . . .	77
6.14	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Prairie Grass nos diferentes arcos. . . . .	85
6.15	Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Copenhagen previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura. . . . .	87
6.16	Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos apresentados na literatura. . . . .	88
6.17	Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Hanford previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura. . . . .	88
6.18	Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos instáveis de Prairie Grass previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura. . . . .	89
6.19	Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos estáveis de Prairie Grass previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura. . . . .	89
6.20	Tempo de processamento e número de pontos de grade utilizados. . . . .	90
7.1	Valores de concentração integrada e normalizada pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia <i>et al.</i> e Ulke. . . . .	93
7.2	Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Copenhagen para os períodos I, II e III. . . . .	93



# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Trabalho Proposto . . . . .	3
1.2	Objetivos . . . . .	3
1.2.1	Objetivo Geral . . . . .	3
1.2.2	Objetivos Específicos . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Revisão Bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1	Camada Limite Atmosférica . . . . .	5
2.1.1	Características da Camada Limite Atmosférica . . . . .	5
2.1.2	Camada Limite Convectiva (CLC) . . . . .	7
2.1.3	Zona de Entranhamento . . . . .	8
2.1.4	Camada Residual (CR) . . . . .	8
2.1.5	Camada Limite Estável (CLE) . . . . .	8
2.1.6	Generalidades da Dispersão na CLA . . . . .	9
2.2	Estabilidade Atmosférica . . . . .	11
2.3	Modelos de Dispersão Atmosféricos . . . . .	12
2.3.1	Modelos Eulerianos . . . . .	13
2.3.2	Modelos Lagrangeanos . . . . .	14
2.3.3	Modelos de Pluma Gaussiana . . . . .	17
2.4	O Método Semi-Lagrangeano (S-L) . . . . .	20
2.4.1	Considerações Iniciais . . . . .	20
2.4.2	Descrição do Método Semi-Lagrangeano . . . . .	22
2.4.3	Interpolação . . . . .	24
2.4.4	Características do Método Semi-Lagrangeano . . . . .	25
2.4.5	Método Semi-Lagrangeano e a Dispersão de Poluentes . . . . .	26
<b>3</b>	<b>O Modelo Semi-Lagrangeano de Dispersão Atmosférica</b>	<b>27</b>
3.1	O problema físico . . . . .	27
3.2	Equação Governante . . . . .	28
3.3	Parametrização da Turbulência . . . . .	30

3.3.1	Formulação proposta por Degrazia et al. . . . . .	30
3.3.2	Formulação proposta por Ulke . . . . .	31
3.4	Perfil do Vento . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Implementação Numérica do Modelo</b>	<b>33</b>
4.1	Discretização do Domínio Computacional . . . . .	33
4.2	Discretização da Equação . . . . .	34
4.3	Algoritmo para a Solução Numérica . . . . .	36
<b>5</b>	<b>Dados utilizados para a validação do Modelo</b>	<b>37</b>
5.1	Experimento Copenhagen . . . . .	37
5.2	Experimento Cabauw . . . . .	40
5.3	Experimento Hanford . . . . .	41
5.4	Experimento Prairie Grass . . . . .	42
5.5	Análise Estatística . . . . .	44
<b>6</b>	<b>Resultados e Discussões - Experimentos Estacionários</b>	<b>46</b>
6.1	Evolução para Estacionaridade . . . . .	46
6.1.1	Resultados - Experimento Copenhagen . . . . .	47
6.1.2	Resultados - Experimento Cabauw . . . . .	55
6.1.3	Resultados - Experimento Hanford . . . . .	63
6.1.4	Resultados - Experimento Prairie Grass . . . . .	68
6.2	Comparação com diferentes modelos de dispersão . . . . .	87
6.3	Tempo computacional das simulações . . . . .	90
<b>7</b>	<b>Resultados e Discussões - Problema Transiente</b>	<b>91</b>
7.1	Experimento Copenhagen Transiente . . . . .	91
<b>8</b>	<b>Resultados e Discussões - Análise de sensibilidade</b>	<b>95</b>
8.1	Análise de sensibilidade do modelo às variações de parâmetros meteorológicos	95
<b>9</b>	<b>Conclusão</b>	<b>108</b>
	<b>Referências bibliográficas</b>	<b>111</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Atualmente há uma grande preocupação com os impactos ambientais causados pelas emissões de poluentes por fontes industriais. A poluição atmosférica representa hoje um grande problema para as comunidades urbanas e industriais, apresentando implicações de caráter ambiental, social, econômico e político. Assim, a investigação do processo de dispersão de poluentes tornou-se uma atividade de extrema importância para a proteção da qualidade do ar. Do ponto de vista de saúde pública, a preocupação está relacionada aos níveis de concentração dos poluentes nas proximidades das fontes emissoras, principalmente próximo à superfície. Existe, portanto, a necessidade de um entendimento detalhado do processo de dispersão no sentido de se preverem as possíveis consequências do impacto da poluição sobre os diversos ecossistemas.

O estudo do processo de dispersão de poluentes na atmosfera pode ser realizado de duas formas: experimentalmente ou por modelagem numérica. O primeiro consiste em realizar medidas dos valores de concentração e dos principais parâmetros físicos que influenciam a dispersão através de experimentos de campo. O segundo, consiste no desenvolvimento e aplicação de modelos que permitam obter soluções aproximadas para o problema matemático, analíticas ou a partir de simulações computacionais, com acurácia adequada e esforço computacional razoável, dando uma interpretação suficientemente correta do fenômeno estudado. Os experimentos de campo apresentam limitações de custo, tempo e equipamento, sendo comum a realização de medidas em apenas alguns pontos da região em que ocorrem os fenômenos de interesse. Assim, os modelos de simulação computacional tornam-se ferramentas importantes para a análise dos processos de dispersão na atmosfera. Esses são utilizados para diagnosticar quantitativamente, em diversos cenários, possíveis impactos ambientais das emissões atmosféricas, de forma relativamente fácil e com baixos custos.

De acordo com Zannetti [1], do ponto de vista do referencial de observação, os modelos de simulação computacional da dispersão podem ser classificados como: Eulerianos

e Lagrangeanos. A diferença básica entre eles é que o referencial Lagrangeano segue o movimento das porções de fluido, enquanto que o referencial Euleriano encontra-se fixo em relação à Terra.

Nos modelos Eulerianos, o processo dispersivo é formulado por uma equação diferencial parcial de conservação de massa, à qual é resolvida em uma grade fixa no tempo e no espaço. Segundo Moreira *et al.* [2], as principais desvantagens da aplicação destes modelos são: a difusão numérica produzida pela discretização do termo advectivo e o alto armazenamento de memória, uma vez que em formulações explícitas, para que a estabilidade numérica seja mantida, a determinação do passo de tempo da discretização temporal é dependente da condição de estabilidade de Courant.

Nos modelos Lagrangeanos, o transporte de uma substância é representado por um número finito de partículas que seguem o escoamento, e neste caso, o sistema de coordenadas move-se conforme a velocidade das partículas [3]. Assim, a concentração da substância é calculada através da determinação da trajetória das partículas de fluido que seguem passivamente o escoamento. Nestes modelos, geralmente, pode-se utilizar passos de tempo maiores do que nos modelos Eulerianos. Entretanto, estes apresentam algumas dificuldades, como a de simular um fluido que sofra uma grande deformação. Desta forma, um conjunto de partículas com distribuição regular no domínio pode evoluir para uma distribuição muito irregular, afetando numericamente o resultado final. Além disso, nos modelos Lagrangeanos a solução é limitada à região da pluma. Eventualmente, algumas partículas de fluido podem sair do domínio computacional de interesse durante a simulação. Além disso, estes modelos apresentam a dificuldade de representar transformações químicas.

Embora possuam características distintas e complementares, os modelos Eulerianos e Lagrangeanos podem ser combinados para evitar as desvantagens de cada método. O método que combina as duas abordagens é denominado Semi-Lagrangeano ou Euleriano-Lagrangeano. Este método divide o problema do transporte em dois passos. No primeiro passo, utiliza-se uma aproximação Lagrangeana para a solução da parte advectiva da equação de transporte. No segundo passo, os demais termos da equação são resolvidos pelo método Euleriano [4]. Neste caso, consideram-se diferentes conjuntos de partículas em cada passo de tempo e, determina-se a concentração da substância na posição de partida da partícula que chega, exatamente, em um ponto de grade no instante de tempo posterior.

É importante salientar que o passo de tempo que pode ser utilizado no método Semi-Lagrangeano não é limitado pelo critério do número de Courant, o que permite manter a estabilidade na integração, para passos de tempo maiores do que os permitidos em modelos Eulerianos explícitos. Assim, o método Semi-Lagrangeano, possibilita elevada

estabilidade numérica, característica dos modelos Lagrangeanos e, regularidade espacial da grade, característica dos modelos Eulerianos.

## 1.1 Trabalho Proposto

Neste trabalho é proposto um modelo numérico Semi-Lagrangeano, bidimensional, para investigar a dispersão de poluentes em todas as condições de estabilidade na Camada Limite Atmosférica (CLA).

## 1.2 Objetivos

### 1.2.1 Objetivo Geral

Desenvolver um modelo de dispersão atmosférica de poluentes, bidimensional empregando o método Semi-Lagrangeano.

### 1.2.2 Objetivos Específicos

- Desenvolver e implementar computacionalmente um modelo de dispersão de poluentes Semi-Lagrangeano.
- Testar o modelo em diferentes condições de estabilidade.
- Avaliar o modelo comparando as concentrações previstas pelo modelo proposto com as observadas nos experimentos de campo de Copenhagen, de Cabauw, de Hanford e de Prairie Grass.
- Comparar os resultados das simulações obtidas pelo modelo Semi-Lagrangeano com modelos já consagrados disponíveis na literatura.
- Realizar uma análise de sensibilidade das simulações com relação a variação dos parâmetros meteorológicos de entrada utilizados no modelo.

Este trabalho encontra-se estruturado em nove capítulos. No Capítulo 2 apresenta-se uma revisão bibliográfica e uma descrição do método Semi-Lagrangeano utilizado para resolver a parte advectiva da equação de difusão-advectação bidimensional. No Capítulo 3 são apresentados o modelo físico-matemático de poluição atmosférica, as parametrizações da turbulência e o perfil do vento utilizado. Já no Capítulo 4 são apresentados os passos para a implementação numérica do modelo. Apresentam-se no Capítulo 5 os dados dos experimentos de Copenhagen, de Cabauw, de Hanford e de Prairie Grass, bem como os

índices estatísticos utilizados para realizar o estudo comparativo entre os valores de concentrações observados nos experimentos e os valores previstos pelo modelo. Os resultados obtidos pelo modelo são apresentados nos Capítulos 6, 7 e 8. No Capítulo 9 encontra-se a conclusão.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

### 2.1 Camada Limite Atmosférica

Nesta seção define-se Camada Limite Atmosférica e apresentam-se as suas mais importantes características. Além disso, descreve-se como ocorre o processo de dispersão nesta região da atmosfera.

#### 2.1.1 Características da Camada Limite Atmosférica

A atmosfera é uma mistura de gases, que contém partículas sólidas e líquidas em suspensão. Ela é usualmente dividida em camadas em função do perfil médio de temperatura. A camada mais baixa da atmosfera, a troposfera, é caracterizada por apresentar uma diminuição da temperatura com a altura. Esta camada pode atingir, em média, a espessura de 10 km e pode ser dividida em duas partes: a parte mais baixa que é diretamente afetada pelo contato com a superfície da Terra é conhecida como Camada Limite Atmosférica (CLA) e a parte superior, região que fica acima da CLA, é denominada Atmosfera Livre (ver Figura 2.1). A CLA estende-se desde a superfície terrestre até a altura na qual esta superfície exerce influência importante no escoamento do ar. A espessura desta camada sofre mudanças no tempo e no espaço, variando de aproximadamente 10 m até em torno de 2 a 3 km, e depende da taxa de aquecimento e resfriamento da superfície da Terra, do cisalhamento do vento, da rugosidade da superfície, dos movimentos verticais de grande escala e da advecção horizontal de calor e umidade, entre outros fatores. O escoamento do ar nesta camada é turbulento, enquanto que na Atmosfera Livre o escoamento apresenta baixa intensidade da turbulência.

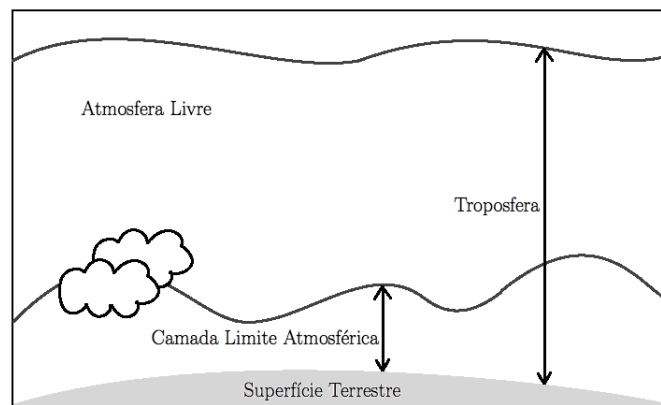


Figura 2.1: Divisão da troposfera em função da influência da superfície no escoamento do ar. Fonte: Stull [5] (Figura adaptada).

Segundo Garrat [6], a CLA possui características que variam com a altura e, portanto, pode ser classificada, a partir da superfície, em: Camada Limite Laminar ou Subcamada Interfacial, Camada Limite Superficial e Camada de Ekman.

- Camada Limite Laminar: possui poucos milímetros de espessura e a difusão molecular é um importante processo de transferência de calor e massa entre a superfície e o ar.
- Camada Limite Superficial (CLS): o escoamento do ar é principalmente dependente das características da superfície e é pouco afetado pelo movimento de rotação da Terra. De forma geral, estende-se até, no máximo, 10% da altura da CLA e os fluxos verticais turbulentos de calor e quantidade de movimento são considerados constantes com a altura. Nessa camada o perfil vertical de temperatura é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura, durante o dia, e um aumento da temperatura com a altura, durante a noite. Nesta camada são observados intensos gradientes de velocidade e temperatura.
- Camada de Ekman: o escoamento de ar depende da natureza da superfície e é influenciado pelo movimento de rotação da Terra.

A evolução da CLA é controlada pelos transportes turbulentos induzidos pela diferença de temperatura entre a atmosfera e a superfície terrestre (produção térmica) e pelos ventos em baixos níveis (produção mecânica). Tal evolução é controlada pelo aquecimento e resfriamento do solo ao longo de 24 horas. O solo absorve cerca de 50% da radiação solar incidente no topo da atmosfera e, desta forma, a variação diurna da temperatura é bastante acentuada próximo ao solo e não ocorre a grandes altitudes. As porções de ar quente que se elevam a partir da superfície são chamadas termals, turbilhões ou vórtices.



Quantidades tais como umidade, calor, quantidade de movimento e poluentes são transportados na baixa atmosfera, na direção horizontal pelo vento médio, e na vertical pela turbulência. É importante salientar que na presença de movimentos sinóticos e de mesoescala verticais, estes também são responsáveis pelo transporte na direção vertical. Segundo Stull [5], sobre a superfície terrestre, sob condições de alta pressão, a CLA tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia. Normalmente, em um período de 24 horas, a CLA pode ser classificada quanto aos seus forçantes como: Camada Limite Convectiva (ou Camada de Mistura), Camada Residual e Camada Limite Estável, conforme ilustra a Figura 2.2.

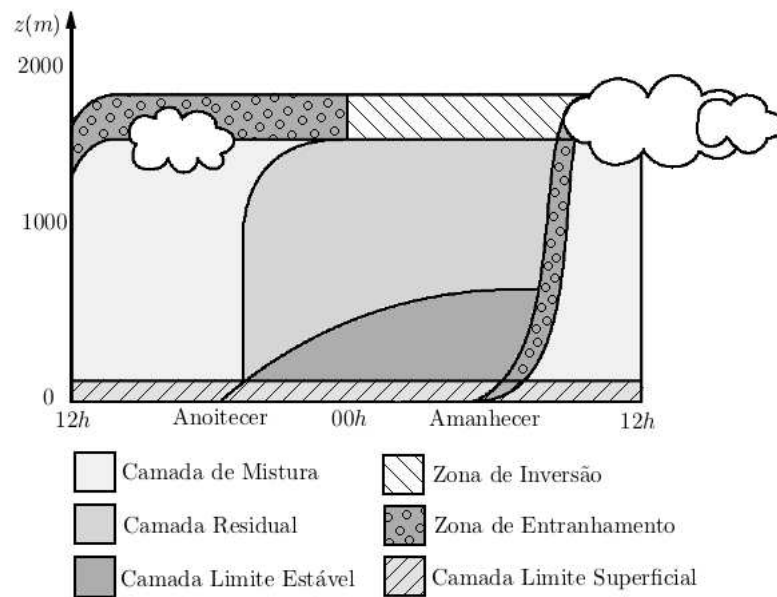


Figura 2.2: Evolução da Camada Limite Atmosférica. Fonte: Stull [5] (Figura adaptada).

### 2.1.2 Camada Limite Convectiva (CLC)

Ao amanhecer, o fluxo vertical de calor que ocorre no sistema Terra-atmosfera é positivo. Isto ocorre porque a radiação emitida pelo Sol acaba por atingir a superfície da Terra, aquecendo-a, antes que o ar tenha sido aquecido. Assim, a Terra, mais quente que a atmosfera, transfere calor sensível por condução para o ar em contato com ela, gerando um fluxo vertical de calor sensível positivo. O ar aquecido torna-se menos denso que o ar logo acima e, por isso tende a subir; enquanto o ar mais frio tende a descer e também se aquecer devido ao contato com a superfície. Este movimento convectivo ocorre sucessivamente dando origem à Camada Limite Convectiva. Sendo assim, a turbulência existente nesta camada é, em maior parte, produzida por efeito térmico. A CLC atinge uma altura típica de 1000 a 2000 m no meio da tarde; acima deste limite tem-se a camada de inversão que atua como uma cobertura, suprimindo os movimentos verticais e restringindo o domínio

da turbulência. Durante o decorrer do dia, as termas vão alcançando alturas cada vez maiores. A existência de nuvens, por sua vez, reduz a insolação ao nível do solo, reduzindo desta forma também a intensidade das termas. É justamente nestes dias que a CLC pode exibir um crescimento menor que em outros e torna-se menos turbulenta. Já em dias de céu claro, o fluxo turbulento de calor superficial aumenta fortemente após o Sol nascer, atinge seu máximo próximo ao meio dia e então começa a decair. Pode-se, desta forma, definir a CLC como aquela região da atmosfera que se estende do solo ( $z = 0$ ) até a base de uma inversão elevada ( $z = z_i$ ), e que é caracterizada por uma forte mistura vertical gerada pelo fluxo vertical de calor positivo.

### 2.1.3 Zona de Entranhamento

A Zona de Entranhamento é a região que atua como a interface entre a CLC e a atmosfera livre, sendo caracterizada por uma inversão de temperatura.

### 2.1.4 Camada Residual (CR)

Pouco antes do pôr-do-sol, a quantidade de radiação que atinge a superfície terrestre já não é mais suficiente para manter o processo convectivo intenso que gera turbulência. Então, ocorre um decaimento desta turbulência convectiva, isto é, um decaimento dos grandes turbilhões que formam a CLC, resultando numa Camada Residual. Nesta camada a turbulência existente é um resíduo daquela gerada convectivamente durante o dia. As variáveis de estado e de concentração iniciais desta camada são as mesmas da CLC previamente existente. Na ausência de advecção, traçadores passivos dispersados durante o dia dentro da camada de mistura, permanecerão durante a noite na CR. A Camada Residual é neutramente estratificada, o que faz com que a turbulência existente nesta camada seja aproximadamente igual em todas as direções. Esta camada não fica em contato com o solo, mas tem sua base modificada pelo avanço da Camada Limite Estável, que surge durante a noite. O restante da CR não é afetado pelo transporte das propriedades da superfície, o que faz com que esta camada não corresponda completamente às definições de Camada Limite Atmosférica, as quais afirmam que a atmosfera é considerada CLA até a altura na qual há influência da superfície no escoamento do ar. Portanto, deve-se considerar a Camada Residual como uma exceção às regras nos estudos da CLA.

### 2.1.5 Camada Limite Estável (CLE)

Durante a noite, surge a Camada Limite Estável, a qual é fortemente influenciada pela taxa de resfriamento radiativo e pela taxa de advecção da turbulência mecânica. Mesmo antes do Sol se pôr, o fluxo vertical de calor sensível torna-se negativo. Com isso, a

turbulência começa a decair e passa a ser dominada por pequenos turbilhões, resultando em uma estrutura turbulenta estavelmente estratificada. O fluxo de calor sensível negativo indica que a atmosfera está cedendo calor para a Terra, pois a superfície terrestre está mais fria do que o ar em contato com ela. Este resfriamento da superfície terrestre ocorre porque a quantidade de radiação proveniente do Sol que atinge a superfície é inferior à quantidade de radiação que ela está emitindo. O ar em contato com a superfície passa então a transferir calor também por condução para ela, esfria-se e, conseqüentemente, estabiliza-se. De uma maneira bastante simplificada, pode-se caracterizar uma Camada Limite Estável como pouco ou muito estável, dependendo do comportamento do vento e do resfriamento radiativo. A existência de uma CLE muito estável é favorecida em noites de céu claro (quando o resfriamento radiativo é bastante intenso), em localidades baixas (para onde o ar frio se desloca) e localidades protegidas por obstáculos (o que favorece a diminuição do vento próximo à superfície). Ao contrário, a existência de uma camada limite pouco estável ocorre em noites de céu nublado e em localidades altas e desprotegidas de obstáculos.

### 2.1.6 Generalidades da Dispersão na CLA

No processo de dispersão atmosférica, os poluentes gasosos e particulados emitidos na CLA são dispersos pelo vento médio (responsável pela advecção) e pela turbulência (responsável pela difusão). Outros fatores importantes para a dispersão são: a presença de obstáculos orográficos ou de edifícios, a altura de emissão, a geometria da fonte, a velocidade de emissão e o tipo de poluente. Nas regiões urbanas, os maiores prejuízos para a atmosfera são ocasionados pelo tráfego veicular, o qual produz substâncias que reagem quimicamente por efeito da radiação solar. Quando a camada de mistura está formada, o processo de dispersão na CLA ocorre principalmente devido às circulações convectivas (termais) que formam regiões de fluxos de ar ascendente (*updrafts*) e regiões de fluxos de ar descendente (*indrafts*). Enquanto as áreas de fluxo de ar ascendente apresentam menor extensão espacial e fluxo de ar mais intenso, as áreas de fluxo de ar descendente apresentam maior extensão espacial e fluxo de ar menos intenso. Pelo princípio de conservação de massa, o ar quente subindo terá uma velocidade maior do que o ar frio que desce. Modelos numéricos mostram que esta estrutura assimétrica da CLC é responsável por padrões de dispersão transversal à direção de propagação da pluma que são distintos dos tradicionais padrões Gaussianos. Assim, na presença de regiões de fluxo de ar ascendente e descendente, as plumas de poluentes emitidos na camada de mistura exibirão uma forma curva (*looping*), conforme ilustra a Figura 2.3. Devido a forte mistura presente na CLC, o resultado final consiste em uma distribuição uniforme dos poluentes, independentes da altura de emissão.

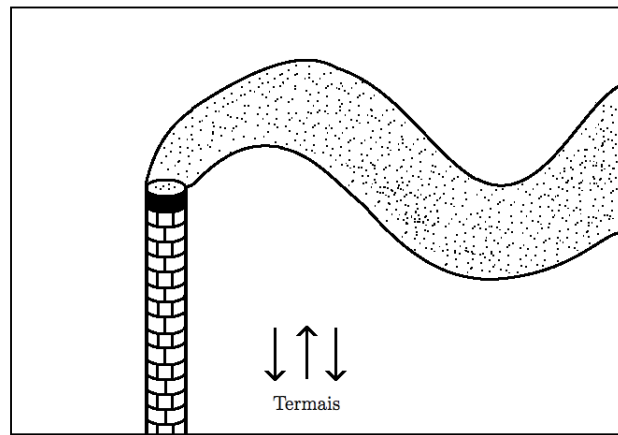


Figura 2.3: Representação da dispersão de uma pluma em regiões de *updrafts* e *downdrafts*.

Os poluentes emitidos em uma Camada Residual tendem a se dispersar em taxas iguais nas direções lateral e vertical, apresentando uma forma cônica. Em virtude da baixa intensidade da turbulência, no caso da existência de uma camada muito estável junto à superfície, o poluente emitido dentro da CR raramente vai ser disperso em direção ao solo. Esta pluma pode ser advectada a centenas de quilômetros a partir da fonte de emissão. Segundo Stull [5], os poluentes emitidos dentro da CR podem se dispersar até sua base e entrar em contato com o topo da Camada Limite Estável, conforme ilustra a Figura 2.4.

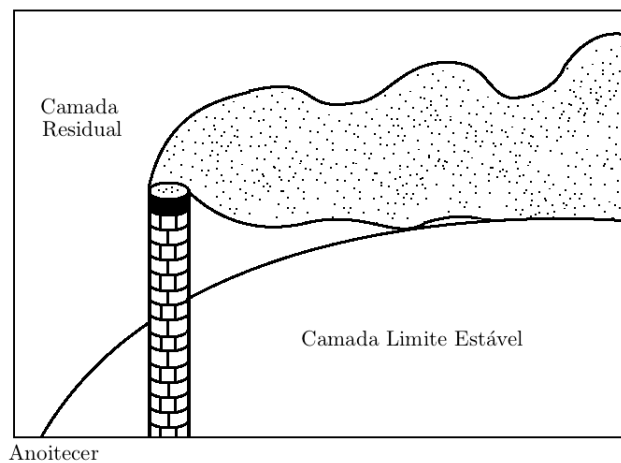


Figura 2.4: Representação da dispersão de uma pluma de contaminantes emitida durante a noite.

A forte estabilidade estática e a diminuição da turbulência reduzem a mistura para baixo dentro da CLE. O topo da pluma de poluentes, localizado acima da CLE em condições de estabilidade, pode, algumas vezes, continuar a ascender dentro do ar neutro.

Ao amanhecer, uma nova camada de mistura evolui atingindo a altura dos poluentes emitidos durante a noite. Estes poluentes são rapidamente misturados e alcançam a

superfície devido a intensificação da turbulência, conforme ilustra a Figura 2.5.

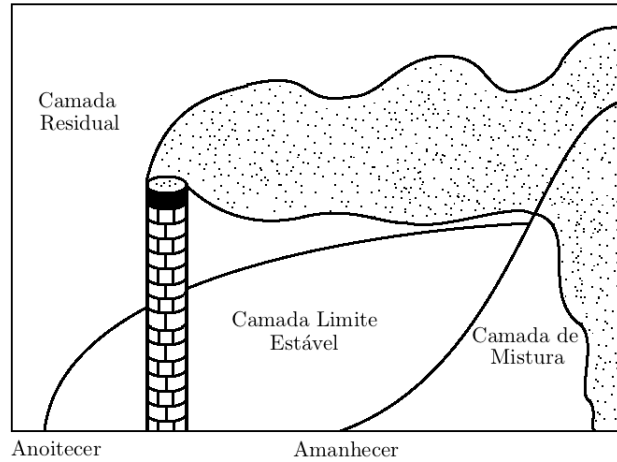


Figura 2.5: Representação da dispersão de uma pluma de contaminantes.

## 2.2 Estabilidade Atmosférica

O processo de dispersão atmosférica na CLA é fortemente influenciado pela estabilidade estática da atmosfera, a qual pode ser definida como a capacidade de restringir ou intensificar os movimentos verticais.

A partir dos trabalhos de Holtslag e van Ulden [7], Weil e Brower [8], van Ulden e Holtslag [9], entre outros, foi possível validar parâmetros fundamentais para a descrição das características da CLA com medidas realizadas nas proximidades da superfície. Assim, tornou-se possível o desenvolvimento de modelos que descrevem a difusão de poluentes e que utilizam como dados de entrada medidas de parâmetros meteorológicos no nível da superfície. Além disso, a turbulência atmosférica pode ser diretamente representada através dos valores do comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ), assim como por meio de classes empíricas como as de Pasquill-Gifford [10].

O comprimento de Monin-Obukhov relaciona os fluxos turbulentos de origem mecânica e convectiva. Fisicamente,  $|L|$  representa a altura aproximada na qual a turbulência gerada por forçantes mecânicas é igual à turbulência gerada por forçantes térmicas. A partir de  $z = |L|$  há predominância da turbulência gerada por forçantes térmicas. De acordo com a teoria de similaridade o comprimento de Monin-Obukhov é dado por:

$$L = -\frac{u_*^3 c_p \rho \theta_v}{kgH_0}, \quad (2.1)$$

onde  $c_p$  representa o calor específico do ar à pressão constante,  $\rho$  representa a densidade do ar,  $\theta_v$  representa a temperatura potencial virtual,  $H_0$  representa o fluxo vertical de

calor turbulento,  $k$  representa a constante de von Karman e  $g$  representa a aceleração da gravidade.

O fluxo vertical de calor turbulento, representado na equação (2.1), pode ser expresso por:

$$H_0 = c_p \rho \overline{w'\theta'_0}, \quad (2.2)$$

e a velocidade de atrito,  $u_*$ , como:

$$u_* = \left( \frac{\tau_0}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.3)$$

onde  $\tau_0 = -\rho \overline{u'w'}$  representa o fluxo vertical turbulento de quantidade de movimento,  $\overline{u'w'}$  representa a covariância entre as flutuações turbulentas de velocidade horizontal e vertical e  $\overline{w'\theta'_0}$  representa a covariância das flutuações turbulentas de velocidade vertical e de temperatura potencial, essas covariâncias medidas na Camada Limite Superficial.

O comprimento de Monin-Obukhov pode ser utilizado para avaliar a condição de estabilidade atmosférica. Se  $L < 0$ , tem-se um fluxo de calor vertical positivo, ou seja, a superfície da Terra está sendo aquecida devido à radiação solar, o que indica que a atmosfera encontra-se em uma condição instável, que ocorre predominantemente no período diurno, e temos a formação de uma camada limite convectiva. Caso o fluxo de calor seja negativo, ou seja,  $L > 0$ , tem-se o resfriamento radiativo da superfície terrestre e, neste caso, a condição atmosférica é considerada estável. Tem-se ainda uma terceira condição, a condição atmosférica neutra, que é caracterizada pelo fluxo de calor vertical tendendo a zero. Esta situação intermediária ocorre quando o comprimento de Monin-Obukhov tende a infinito.

## 2.3 Modelos de Dispersão Atmosféricos

Nesta seção é feita uma breve descrição dos tipos de modelos mais utilizados para simular a dispersão de poluentes na atmosfera, a saber: modelos Eulerianos, modelos Lagrangeanos e modelos Gaussianos.

### 2.3.1 Modelos Eulerianos

Nos modelos Eulerianos, o transporte advectivo e a dispersão de contaminantes na atmosfera são simulados por meio da equação de difusão-advectação, dada por [11]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S, \quad (2.4)$$

onde  $C$  representa a concentração média de poluentes,  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  representam os coeficientes de difusão turbulentos nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente,  $U$ ,  $V$  e  $W$  representam as componentes da velocidade média do vento nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  e  $S$  representa o termo fonte/sumidouro.

A equação (2.4), já na forma simplificada, obtida a partir da aplicação da decomposição de Reynolds na equação de conservação de uma espécie genérica  $C$ , desprezando a difusão molecular na presença da difusão turbulenta e considerando a teoria de transporte por gradiente, pode ser resolvida analiticamente ou numericamente. A solução analítica para forma mais geral da equação de difusão-advectação, ainda não foi determinada. Esta só é admitida se forem feitas simplificações adicionais no problema. No entanto, mesmo que as soluções analíticas descrevam modelos simplificados, que muitas vezes não são compatíveis com as situações reais, estas são de grande valia para estimar a concentração de poluentes na atmosfera sob muitas condições, visto que apresentam baixo custo computacional e são soluções exatas.

Vários autores obtiveram soluções analíticas para situações simplificadas. Dentre eles, podemos citar Roberts [12] que obteve uma solução para o campo de concentração de uma fonte tipo linha empregando a equação da difusão-advectação. Roberts considerou que o campo do vento médio horizontal e o coeficiente de difusão vertical eram descritos por lei de potência.

Nieuwstadt [13] também desenvolveu uma solução analítica para a determinação do campo de concentração de contaminantes liberados por fontes tipo área instantânea. As soluções para o campo de concentração são dadas em termos de polinômios de Legendre. O autor obteve os coeficientes de difusão vertical a partir da teoria de similaridade, considerando uma turbulência dominada pelo vento médio.

Sharan *et al.* [14] apresentaram uma solução analítica para a equação de difusão-advectação para condições de ventos fracos, em regime permanente. As seguintes hipóteses foram feitas para resolver a equação de difusão-advectação: difusividades turbulentas constantes, fonte pontual e velocidade vertical desprezível. A solução da equação foi obtida a partir da aplicação de Transformadas de Fourier.

Vilhena *et al.* [15] resolveram a equação de difusão-advecção utilizando a técnica de transformada de Laplace. O modelo simula o campo de concentração superficial de contaminantes liberados por fontes pontuais contínuas e elevadas, considerando perfil logarítmico do vento e perfil vertical do coeficiente de difusão descrito em termos dos turbilhões mais energéticos.

Wortmann *et al.* [16] desenvolveram uma solução analítica unidimensional para a dispersão atmosférica em regime permanente. A equação foi obtida considerando o campo de vento predominantemente na direção longitudinal e que a difusão ocorre apenas na direção transversal. O método proposto consiste em aplicar Técnica da Transformada Integral generalizada (GITT), desenvolvido por Cotta [19], na equação de difusão-advecção simplificada, e em seguida resolver o sistema de equações diferenciais ordinárias resultante, através da Técnica da Transformada de Laplace.

Moreira *et al.* [17] resolveram a equação da advecção-difusão combinando a transformada de Laplace e a técnica GILTT (Generalized Integral Laplace Transform Technique), desenvolvendo um modelo analítico bidimensional transiente para simular a dispersão de poluentes. A abordagem GILTT usa como base autofunções dadas em termos de funções cosseno. A avaliação do modelo foi realizada com simulações dos experimentos de Copenhague, as quais mostraram uma boa concordância dos dados observados e previstos. Recentemente, Gonçalves *et al.* [18], modificaram o modelo baseado na técnica GILTT propondo uma expansão da série, em termos das funções de Bessel.

Para a obtenção de soluções em condições mais realistas é usual resolver a equação (2.4) numericamente.

Armani *et al.* [20] apresentaram um sistema regulatório de modelagem da qualidade do ar para o estado do Paraná, o MODELAR. Este sistema foi desenvolvido no Laboratório de Estudos em Monitoramento e Modelagem Ambiental - LEMMA, da Universidade Federal do Paraná e, é composto por uma base de dados micrometeorológicos, uma interface gráfica e um modelo numérico euleriano estacionário de dispersão de poluentes atmosféricos.

### 2.3.2 Modelos Lagrangeanos

Nos modelos Lagrangeanos as partículas movem-se descrevendo trajetórias aleatórias, seguindo os vórtices turbulentos. Estes modelos são estatísticos, ou seja, as grandezas físicas responsáveis pelo deslocamento das partículas são especificadas em termos probabilísticos. A concentração do poluente emitido é obtida a partir da distribuição espacial das partículas em um certo instante de tempo.

A equação Lagrangeana fundamental para a dispersão de um único poluente é dada



por:

$$C(\vec{x}, t) = \int_0^t \int P(\vec{x}, t | \vec{x}', t') S(\vec{x}', t') d\vec{x}' dt', \quad (2.5)$$

onde  $C(\vec{x}, t)$  representa a concentração média,  $\vec{x}$  representa o vetor posição,  $t$  representa o tempo,  $S(\vec{x}', t')$  representa o termo fonte e  $P(\vec{x}, t | \vec{x}', t')$  representa a Função Densidade de Probabilidade (PDF), a qual expressa a probabilidade de uma partícula de fluido que estava na posição  $\vec{x}'$  no instante de tempo  $t'$  estar na posição  $\vec{x}$  no instante de tempo  $t$ .

A PDF é determinada a partir da liberação de um número de partículas suficientemente grande, seguindo-se suas trajetórias e calculando quantas delas chegam na vizinhança de  $\vec{x}$  no instante de tempo  $t$ . Segundo Carvalho [21], obtendo as trajetórias realistas das porções de ar, o simples cálculo da densidade dos pontos de trajetórias fornece uma estimativa da concentração.

De acordo com Zannetti [1], vários modelos podem ser classificados como Lagrangeanos. São eles, os modelos de pluma Gaussiana segmentada, modelos de caixa Lagrangeanos, modelos de *puff* Gaussianos e modelos de partículas Lagrangeanos. Os modelos de partículas Lagrangeanos têm sido empregados com sucesso em uma grande variedade de problemas complexos.

Os modelos de partículas Lagrangeanos são baseados na equação generalizada de Langevin, a qual é derivada a partir da hipótese de que a velocidade da partícula, em um dado instante de tempo, é dada pela soma de um termo determinístico e um termo estocástico. A posição de cada partícula, em cada passo de tempo é obtida pela integração numérica das seguintes equações:

$$du_j = a_j(x_j, u_j)dt + b_j(x_j, u_j)\xi(t)dt, \quad (2.6)$$

$$dx_j = (U_j + u_j)dt, \quad (2.7)$$

onde o subíndice  $j$  denota a direção transversal ( $j = 1$ ), longitudinal ( $j = 2$ ) e vertical ( $j = 3$ ),  $u_j$  representa a componente  $j$  do vetor velocidade Lagrangeana,  $x_j$  representa a componente  $j$  do vetor deslocamento,  $U_j$  representa a componente  $j$  do vetor velocidade média do vento,  $\xi(t)$  é uma função aleatória proveniente de uma distribuição de probabilidade Gaussiana, o primeiro termo do lado direito da equação (2.6) é um termo determinístico e o segundo é um termo estocástico.

O termo  $a$  contém duas informações: a informação da perda de memória da velocidade em um instante de tempo anterior e a informação da correção *drift*, a qual satisfaz a condição de bem misturado (se as partículas de um gás encontram-se uniformemente

distribuídas em uma camada, estas permanecem desta forma com o passar do tempo). Esse coeficiente depende da PDF da velocidade turbulenta e é determinado a partir da equação de Fokker-Planck para condições estacionárias.

O coeficiente estocástico  $b$  representa a difusão turbulenta. O produto de  $b$  com a função aleatória  $\xi(t)$  representa as acelerações aleatórias devido às flutuações de pressão.

Diversos modelos de partículas Lagrangeanos foram desenvolvidos a partir de diferentes técnicas para soluções da equação de Langevin. A seguir é feita uma breve revisão de alguns deles.

Uhlenbeck e Ornstein [22] resolveram a equação de Langevin para o caso de turbulência estacionária e homogênea, considerando valores constantes para  $a$  e  $b$ .

Wilson *et al.* [23] foram pioneiros no desenvolvimento de modelos de partículas Lagrangeanos considerando a adição de um termo de correção, denominado correção *drift*, com a finalidade de evitar o acúmulo de partículas em regiões onde as variâncias de velocidade são pequenas. Foi provado nesse estudo que quando a variância da velocidade vertical muda com a altura, as trajetórias das partículas devem ser desviadas para valores maiores de variância. Esta correção conduziu a resultados melhores para as distribuições de concentração em condições de turbulência não-homogênea, mas não apresentou melhora nos resultados de concentração onde a restrição acima não foi satisfeita.

Legg e Raupach [24] propuseram um modelo com uma correção *drift* diferente. Eles mostraram que quando existe um gradiente de variância de velocidade vertical, a equação de Langevin deve incluir um termo relativo à força média devido à ação do gradiente de pressão médio sobre a partícula.

Thomson [25] propôs um modelo de partículas Lagrangeano para o qual é prescrita uma forma para PDF da função aleatória dependente das condições da turbulência. Esta dependência é tal que em um estado estacionário a PDF das partículas é a mesma do ar.

Van Dop *et al.* [26] transformaram a equação de Langevin na equação de Fokker-Planck que é sua forma equivalente no referencial Euleriano. Eles determinaram os coeficientes da equação de Langevin, relacionando o modelo de deslocamento aleatório com as equações Eulerianas de conservação de massa e de espécies.

Carvalho *et al.* [27] desenvolveram o modelo de partículas Lagrangeano ILS (Iterative Langevin Solution), baseado na solução semi-analítica da equação de Langevin pelo método de aproximações sucessivas ou Método Iterativo de Picard. Foram obtidas soluções para condições de turbulência Gaussiana e não-Gaussiana, considerando funções densidade de probabilidade de Gauss, bi-gaussiana e Gram-Charlier. O modelo foi aplicado para es-

tudar a dispersão de poluentes em todas as condições de estabilidade atmosférica e em condições de baixa velocidade do vento. As simulações realizadas mostraram que o modelo apresenta resultados comparáveis aos obtidos por outros modelos, dentre eles, modelos eulerianos e gaussianos.

Mello [28] obteve uma solução analítica para a equação de Langevin utilizando um método para resolver equações diferenciais não lineares sem o emprego de linearização, considerando as funções densidade de probabilidade (PDF): Gaussiana, Bi-Gaussiana e Gram-Charlier. O Método de Decomposição de Adomian (ADM) foi empregado para a expansão da solução em séries de funções e o termo não linear em séries de polinômios definidos por Adomian. A partir da substituição destas expansões na equação a ser resolvida, foi obtido um sistema linear recursivo, o qual foi resolvido analiticamente.

### 2.3.3 Modelos de Pluma Gaussiana

Os modelos de pluma Gaussiana são modelos analíticos que assumem que a concentração de poluentes apresenta uma distribuição normal, com o coeficiente de difusão e velocidade do vento na vertical constantes. Em um sistema de referência ortogonal generalizado, a equação do modelo de pluma Gaussiana é dada por:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[ \exp\left(-\frac{(z - H_s)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z + H_s)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right], \quad (2.8)$$

sendo

$$\begin{aligned} \sigma_y^2 &= \frac{2K_y x}{\bar{U}}, \\ \sigma_z^2 &= \frac{2K_z x}{\bar{U}}, \end{aligned}$$

onde  $Q$  representa a taxa de emissão,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  representam os parâmetros de dispersão lateral e vertical, obtidos a partir de concentrações medidas experimentalmente,  $H_s$  representa a altura da fonte de emissão e  $\bar{U}$  representa a velocidade média do vento na direção  $x$ .

A Figura 2.6 ilustra uma pluma com distribuição Gaussiana em um sistema de coordenadas cartesianas  $x$ ,  $y$  e  $z$ .

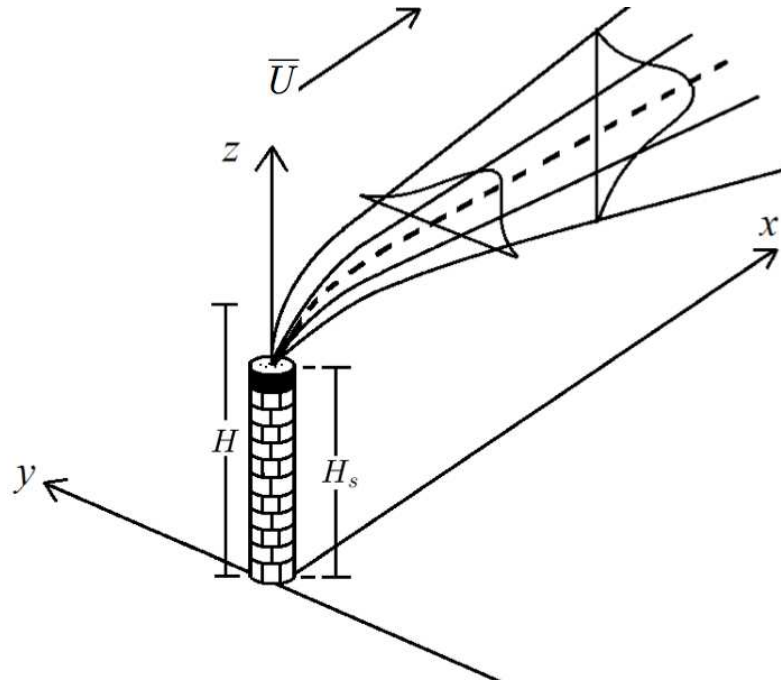


Figura 2.6: Representação esquemática de uma pluma Gaussiana. Fonte: Turner [29] (Figura adaptada).

Embora muitas hipóteses simplificadoras devam ser adotadas, como por exemplo, terreno plano, taxa de emissão constante, velocidade e direção do vento uniformes e condições homogêneas e estacionárias de turbulência atmosférica, devido à sua simplicidade, o modelo de pluma Gaussiana é um dos modelos de dispersão atmosférica mais utilizados para fins regulatórios.

Em 1998, Degrazia [30] propôs um modelo para dispersão de poluentes emitidos a partir de fontes elevadas em uma camada limite atmosférica dominada por convecção moderada. O modelo desenvolvido baseia-se na equação Gaussiana e as medidas de concentração, em qualquer ponto, são obtidas analiticamente.

Um exemplo de modelo de pluma Gaussiana é o ISC3 (Industrial Source Complex) [31], indicado para aplicações em fontes industriais em terreno simples. Este modelo é recomendado pela Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (U.S. EPA) para fins regulatórios. Uma das principais características deste modelo é que a quantidade de dados meteorológicos de entrada é relativamente pequena e o modelo pode ser executado com dados rotineiramente coletados em estações meteorológicas convencionais de superfície.

O modelo AERMOD desenvolvido através de um projeto de cooperação científica entre a Sociedade de Meteorologia Americana (American Meteorological Society, AMS) e a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (U.S. EPA) é um modelo de pluma Gaussiana analítico e estacionário. Detalhes a respeito da formulação matemática do modelo e suas principais características técnicas podem ser encontrados em [32]. O

modelo AERMOD utiliza dois pré-processadores para organizar os dados de entrada, o AERMET e o AERMAP. O AERMET tem como função principal, organizar os dados meteorológicos disponíveis e o AERMAP faz o pré-processamento dos dados de terreno e de localização das fontes e receptores para o uso no AERMOD. O modelo AERMOD foi concebido para substituir o ISC3 para fins regulatórios.

O modelo ADMS (Advanced Dispersion Modeling System) é um modelo de dispersão Gaussiano desenvolvido no Reino Unido através de uma parceria entre governo e indústria, liderada pelo CERC (Cambridge Environmental Research Consultant). Ele é capaz de simular plumas contínuas e lançamentos de curta duração. Além disso, é possível aplicá-lo a fontes tipo pontuais, em linhas e em área. Este modelo apresenta melhorias no tratamento da dispersão dentro da CLA com relação ao modelo ISC3. Embora o desenvolvimento desse modelo tenha sido financiado principalmente por fundos de órgãos públicos, ele é um modelo que precisa ser licenciado para aplicações comerciais. Mais detalhes sobre o modelo ADMS podem ser encontrados em [33].

O modelo dinamarquês OML, desenvolvido para fins regulatórios, principalmente para emissões de fontes industriais, também é um modelo de pluma Gaussiana. Este modelo é indicado para aplicação em distâncias de até 20 km da fonte de emissão. De acordo com Olesen [34], o processamento se dá a partir de dados meteorológicos e de emissão com base horária e retorna séries temporais de concentração calculadas em pontos especificados pelo usuário. Os detalhes sobre a formulação do modelo são apresentados por Berkowicz *et al.* em [35].

Hanna e Paine [36] desenvolveram o modelo HPDM (Hybrid Plume Dispersion Model) para aplicações em fontes elevadas e terreno quase plano. As estimativas de dispersão para a camada limite convectiva foram feitas a partir de experimentos em laboratórios e estudos de campo, com a finalidade de incorporar parâmetros relevantes na descrição da turbulência, como a escala de velocidade convectiva  $w_*$ , e a altura da CLA  $z_i$ . Para condições convectivas, a distribuição vertical da concentração é assumida não-Gaussiana, enquanto que em condições neutras e estáveis presume-se ser Gaussiana.

Outro modelo de pluma Gaussiana bastante utilizado é o CALPUFF (CALifornia PUFF Model), desenvolvido pelos cientistas da ASG (Atmospheric Studies Group) [37] e recomendado pela EPA. Trata-se de um modelo de dispersão de *puff* Gaussiano Lagrangeano não-estacionário e público, no qual a concentração de poluentes em cada *puff* é representada por uma distribuição Gaussiana evoluindo no tempo e no espaço. O movimento de cada *puff* é calculado em cada intervalo de tempo, movendo-se seu centro de massa de acordo com a direção do vento. O campo de concentração é calculado, a cada passo de tempo, somando a contribuição de cada *puff*.

## 2.4 O Método Semi-Lagrangiano (S-L)

Nesta seção será descrito o método Semi-Lagrangiano, bem como apresentadas as suas principais características.

### 2.4.1 Considerações Iniciais

Quando um meio contínuo está em movimento, grandezas como temperatura, velocidade e pressão, podem variar no decorrer do tempo e no espaço. Estas variações podem ser descritas de duas formas: descrição Lagrangeana (ou Material) e descrição Euleriana (ou Espacial).

Conforme introduzido no Capítulo 1, a descrição Euleriana baseia-se em um referencial fixo, ou seja, observa-se as variações das grandezas do escoamento em posições fixas no decorrer do tempo. Neste caso, a cada instante de tempo  $t$  tem-se uma “fotografia” da distribuição espacial de uma determinada grandeza. Na descrição Lagrangeana, por sua vez, utiliza-se um referencial móvel, ou seja, acompanha-se o movimento de uma parcela individual de fluido. Neste caso, as grandezas são expressas como funções do tempo  $t$  e da posição do elemento de fluido escolhido, que também dependerá de  $t$ .

Para ilustrar as abordagens Lagrangeana e Euleriana, considere a evolução de um traçador  $\psi$  em um escoamento sem fontes nem sumidouros. Por simplicidade, restrinja-se o problema a duas dimensões  $x$  e  $y$ . A equação de conservação de  $\psi$ , em coordenadas cartesianas, pode ser expressa na forma Lagrangeana como

$$\frac{D\psi}{Dt} = 0, \quad (2.9)$$

ou, na forma Euleriana como

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + u\frac{\partial\psi}{\partial x} + v\frac{\partial\psi}{\partial y} = 0. \quad (2.10)$$

Note que, a equivalência matemática das equações (2.9) e (2.10) resulta da definição de derivada material  $\frac{D}{Dt}$ , a qual é dada por

$$\frac{D}{Dt}() = \frac{\partial}{\partial t}() + u\frac{\partial}{\partial x}() + v\frac{\partial}{\partial y}(),$$

onde  $u = dx/dt$  e  $v = dy/dt$  representam as componentes do vetor velocidade.

Na forma Euleriana da equação de conservação de  $\psi$  avalia-se a evolução de  $\psi$  em pontos fixos no espaço, ou seja, mantém-se uma distribuição fixa dos pontos de grade. Esta é a grande vantagem de trabalhar com a equação nesta forma. No entanto, a maior

dificuldade no tratamento numérico da equação (2.10) surge a partir da discretização do termo advectivo, que pode ser não linear.

Na forma Lagrangeana da equação de conservação, o termo advectivo não é explicitado e numericamente obtém-se mais estabilidade. A descrição Lagrangeana apresenta como principal desvantagem o fato de que um conjunto inicial de partículas regularmente distribuídas, geralmente, irá evoluir para uma distribuição espacial muito irregular. Segundo Staniforth e Côté [38] importantes características do escoamento podem não ser representadas corretamente, principalmente, onde a distribuição destas partículas for mais esparsa.

Sawyer [39], no início da década de 60, foi o primeiro a utilizar um método Semi-Lagrangeano de integração para uma equação de conservação. Ele aprimorou o método desenvolvido por Winn-Nielsen [40], no final da década de 50, no qual a equação de conservação de vorticidade era resolvida em coordenadas Lagrangeanas. O método proposto por Sawyer consistia em realizar uma alteração do conjunto de elementos de fluido que seriam acompanhados seguindo o escoamento. Os elementos de fluido que se deslocassem para fora do domínio eram desconsiderados e novos elementos eram incluídos para manter a completa representação do domínio. Devido a essa característica de mudança dos elementos de fluido ao longo da integração, o método foi denominado Semi-Lagrangeano (ou Euleriano-Lagrangeano). Embora tenha sido mostrado nos trabalhos Sawyer que o método Semi-Lagrangeano era mais eficiente computacionalmente do que os Eulerianos explícitos, pois permitia a utilização de passos de tempo muito maiores, este método só foi amplamente aplicado na solução de problemas advectivos, a partir dos trabalhos propostos por Robert [41] na década de 80.

Robert [41] propôs um método no qual, a cada passo de tempo, seja escolhido um novo conjunto de partículas cujas posições coincidam com os pontos de grade do domínio. As partículas escolhidas são as que chegam em cada ponto de grade no instante de tempo  $t + \Delta t$ . A partir deste ponto determinam-se as coordenadas do ponto de partida de cada uma das partículas no instante  $t$ , realizando-se uma trajetória para trás. Neste método foram combinadas as vantagens de se obter uma resolução regular do domínio, característica dos métodos Eulerianos, aumentando a eficiência computacional, devido às características de estabilidade numéricas dos métodos Lagrangeanos.

Na próxima subseção será apresentada a descrição do método Semi-Lagrangeano, bem como suas principais características.

### 2.4.2 Descrição do Método Semi-Lagrangiano

Diferentes formulações Semi-Lagrangianas podem ser empregadas para resolver a parte advectiva de uma equação. Neste trabalho será utilizado o esquema de três níveis de tempo proposto por Robert [41], o qual consiste no cálculo da derivada total de uma variável dependente  $\psi(\vec{x}(t), t)$ , seguindo a trajetória de uma partícula de fluido, utilizando uma aproximação de diferença finita central do tipo:

$$\frac{D\psi}{Dt} \approx \frac{\psi(\vec{x}(t + \Delta t), t + \Delta t) - \psi(\vec{x}(t - \Delta t), t - \Delta t)}{2\Delta t}, \quad (2.11)$$

onde  $\vec{x}(t)$  representa o vetor posição da partícula de fluido no instante  $t$  e  $\vec{x}(t - \Delta t)$  representa o vetor posição estimado do ponto de partida da trajetória originada em  $t - \Delta t$  que chega no ponto de grade, cujo vetor posição é  $\vec{x}(t + \Delta t)$ , no instante de tempo  $t + \Delta t$ .

Por simplicidade, consideremos o problema em duas dimensões,  $x$  e  $z$ . Neste caso, o vetor posição será:

$$\vec{x}(t) = x \vec{i} + z \vec{k}. \quad (2.12)$$

As partículas escolhidas no instante de tempo  $t + \Delta t$  são aquelas cujas posições coincidem com os pontos de grade. Definindo os deslocamentos da partícula nas direções  $x$  e  $z$  a cada passo de tempo  $\Delta t$ , respectivamente, como  $a$  e  $b$ , e considerando a posição da partícula no ponto de grade, no instante  $t + \Delta t$ , como:

$$\vec{x}(t + \Delta t) = (x_i, z_k) \quad (2.13)$$

a aproximação dada pela equação (2.11) pode ser reescrita como:

$$\frac{D\psi}{Dt} \approx \frac{\psi(x_i, z_k, t + \Delta t) - \psi(x_i - 2a, z_k - 2b, t - \Delta t)}{2\Delta t}. \quad (2.14)$$

Assim, o método consiste em determinar os valores de  $\psi$  na posição de partida  $(x_i - 2a, z_k - 2b)$  da partícula que chega no ponto de grade  $(x_i, z_k)$  no instante  $t + \Delta t$ . Esta posição normalmente não coincide com um ponto de grade. No entanto, assumindo-se que os valores de  $\psi$  são conhecidos em todos os pontos de grade no instante  $t - \Delta t$ , pode-se determinar o valor de  $\psi(x_i - 2a, z_k - 2b, t - \Delta t)$  utilizando alguma fórmula de interpolação. Este assunto será abordado na próxima seção.

A posição de partida é calculada com base em uma trajetória linear para trás da partícula a partir do ponto de grade  $(x_i, z_k)$  em  $t + \Delta t$  até o ponto  $(x_i - 2a, z_k - 2b)$  em  $t - \Delta t$ , utilizando uma velocidade média constante calculada para o instante de tempo  $t$ . A Figura 2.7 apresenta a trajetória exata de uma partícula de fluido que chega no



ponto  $(x_i, z_k)$  no instante de tempo  $t + \Delta t$ , denotada pela linha s3lida  $AC$ , e a trajet3ria aproximada por uma linha reta, denotada pela linha tracejada  $A'C$ .

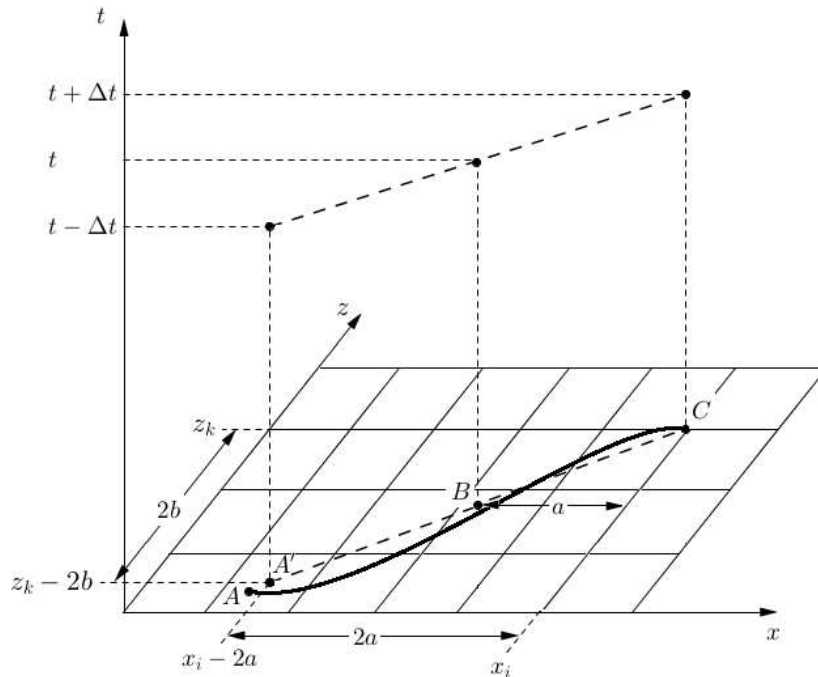


Figura 2.7: Esquema de tr3s n3veis de tempo para advec33o.

A determina33o dos deslocamentos  $a$  e  $b$  pode ser realizada a partir do processo iterativo gerado pelas equa33es:

$$a^{n+1} = \Delta t \cdot u(x_i - a^n, z_k - b^n, t), \quad (2.15)$$

$$b^{n+1} = \Delta t \cdot w(x_i - a^n, z_k - b^n, t), \quad (2.16)$$

onde o expoente  $n$  representa a  $n$ -3sima itera33o e  $u$  e  $w$  s3o, respectivamente, as componentes longitudinal e vertical da velocidade, avaliadas no instante intermedi3rio  $t$ , ilustrado pelo ponto  $B$  na Figura 2.7. Como  $(x_i - a^n, z_k - b^n)$  geralmente n3o 3 um ponto de grade, faz-se necess3ria, tamb3m, a utiliza33o de uma f3rmula de interpola33o para a determina33o de  $u(x_i - a^n, z_k - b^n)$  e  $w(x_i - a^n, z_k - b^n)$  no instante de tempo  $t$ .

Pudykiewics *et al.* [42] mostraram que a condi33o suficiente para a converg3ncia do processo iterativo resultante da aplica33o das equa33es (2.15) e (2.16) 3 dada por:

$$\Delta t < \left[ \max \left( \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|, \left| \frac{\partial u}{\partial z} \right|, \left| \frac{\partial w}{\partial x} \right|, \left| \frac{\partial w}{\partial z} \right| \right) \right]^{-1}. \quad (2.17)$$

### 2.4.3 Interpolação

De acordo com Staniforth e Côté [38] a escolha da fórmula de interpolação para avaliar  $\psi$ ,  $u$  e  $w$  na posição de partida, entre os pontos de grade, tem um importante impacto na acurácia e eficiência do método. Várias fórmulas de interpolação polinomial têm sido testadas, incluindo: linear, quadrática de Lagrange, cúbica de Lagrange e spline cúbica. De acordo com os trabalhos de McDonald [43] e Pudykiewics e Staniforth [44] a interpolação cúbica apresenta um bom compromisso entre a acurácia e custo computacional, pois os erros de truncamento resultantes desta interpolação são de quarta ordem. Além disso, a utilização da interpolação cúbica apresenta menor atenuação dos resultados, do que as fórmulas de interpolação linear e quadrática, por exemplo.

Neste trabalho será utilizada a fórmula de interpolação cúbica de Lagrange nas duas direções  $x$  e  $z$  no interior do domínio. O polinômio interpolador de Lagrange cúbico é definido pelo Teorema 2.1, cuja prova é apresentada por Hildebrand em [45].

**Teorema 2.1** *Sejam  $x_0, x_1, x_2$  e  $x_3$  pontos distintos e  $f$  uma função qualquer, cujos valores são conhecidos nesses pontos, então existe um único polinômio  $P(x)$  de grau pelo menos 3 para o qual*

$$f(x_i) = P(x_i), \quad \text{para cada } i = 0, 1, 2, 3.$$

*Esse polinômio é dado por*

$$\begin{aligned} P(x) = & \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} f(x_1) + \\ & + \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} f(x_2) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} f(x_3). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Portanto, neste caso, utilizam-se os 16 pontos de grade conhecidos em torno da posição estimada de partida  $(x_i - 2a, z_k - 2b)$ , conforme ilustra a Figura 2.8. Para efeitos de simplificação, denotaremos a posição de partida por  $(x_p, z_p)$ .

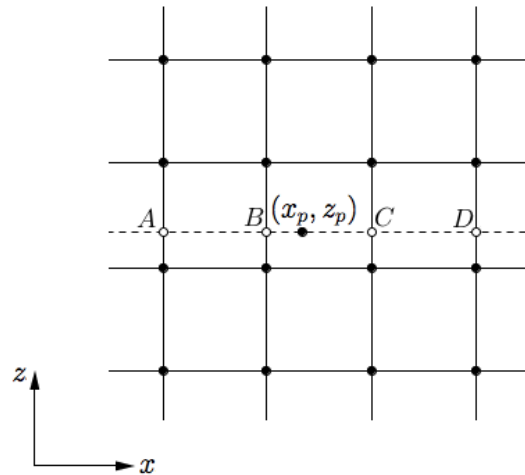


Figura 2.8: Esquema de pontos utilizados na interpolação.

Inicialmente são realizadas as interpolações da função na direção do eixo  $z$ , para que sejam determinadas as posições intermediárias, denotadas pelos pontos  $A$ ,  $B$ ,  $C$  e  $D$  na Figura 2.8. Em seguida, a função é interpolada na direção do eixo  $x$ , sobre a linha tracejada, utilizando os pontos intermediários.

Se a posição estimada de partida da partícula estiver fora do domínio, o valor da função será substituído pelo valor no ponto do contorno interceptado pela trajetória da partícula, conforme recomendado por Robert [41].

#### 2.4.4 Características do Método Semi-Lagrangeano

##### Estabilidade

Diversos autores como Bates e McDonald [46], McDonald [43] e Pudykiewics e Staniforth [44] realizaram estudos sobre as propriedades de estabilidade dos esquemas Semi-Lagrangeanos para a advecção, mostrando que o passo de tempo máximo que pode ser utilizado não é limitado pela máxima velocidade do fluido como no caso de esquemas Eulerianos e, conseqüentemente, é possível manter a estabilidade na integração com números de Courant ( $C = |U| \frac{\Delta t}{\Delta x}$ ) maiores do que a unidade. Apesar do custo computacional imposto pelas interpolações espaciais, a possibilidade de se utilizar passos de tempo maiores, não limitados pelo critério CFL, aumenta significativamente a eficiência do processamento.

Robert [41] apresenta a análise de estabilidade do esquema de três níveis de tempo aplicado a equação de advecção, demonstrando que o método é incondicionalmente estável.

## Acurácia

A acurácia do método Semi-Lagrangeano está diretamente relacionada aos erros cometidos na implementação do mesmo. São duas as principais fontes de erros. A primeira resulta das interpolações necessárias para se obter o valor da função no ponto estimado de partida, que em geral, não coincide com um ponto de grade. A segunda resulta da determinação do ponto de partida da trajetória da partícula de fluido.

Para minimizar a primeira fonte de erros, deve-se utilizar fórmulas de interpolação adequadas. Purser e Leslie [47] recomendam utilizar um polinômio de interpolação de pelo menos terceiro grau. Já a segunda fonte de erros depende do esquema de discretização temporal adotado. O método de três níveis de tempo, por exemplo, possui acurácia de segunda ordem, ou seja,  $O(\Delta t^2)$ .

### 2.4.5 Método Semi-Lagrangeano e a Dispersão de Poluentes

Na revisão bibliográfica realizada foi encontrado apenas um modelo numérico para simular a dispersão de poluentes na atmosfera utilizando um esquema Semi-Lagrangeano para discretizar o termo advectivo da equação da advecção-difusão. O modelo tridimensional foi proposto por Rizza [48] e utiliza um esquema Semi-Lagrangeano de dois níveis de tempo para discretizar termo advectivo e o método de Crank-Nicolson para calcular o termo difusivo. Para realização das interpolações, a técnica de Splines cúbicas foi aplicada.

O modelo foi avaliado para a dispersão de poluentes emitidos por fontes elevadas em uma CLA puramente convectiva, utilizando como parâmetros de entrada, o campo de velocidades do vento e um campo turbulento quase-estacionário da CLA gerado pelo LES (Large Eddy Simulation) para um domínio de  $10 \times 10$  km na direção horizontal e 2 km na direção vertical, com uma resolução de 128 pontos de grade nas direções  $x$  e  $y$  e 96 pontos de grade na direção  $z$ .

É importante salientar que a condição de quase-estacionaridade foi obtida rodando o modelo LES para 5000 passos de tempo (mais do que duas horas de simulação em tempo real).

De acordo com o autor, as simulações numéricas com este modelo concordam com os resultados dos experimentos de laboratório encontrados por Willis e Deardorff [49, 50].

# Capítulo 3

## O Modelo Semi-Lagrangeano de Dispersão Atmosférica

Neste capítulo é apresentada a formulação matemática do modelo Semi-Lagrangeano para dispersão de contaminantes na atmosfera.

### 3.1 O problema físico

O problema físico a ser modelado consiste no processo de dispersão atmosférica de traçadores químicos emitidos na CLA por fontes aéreas, sem empuxo, a uma altura  $H_s$  acima do solo, com intensidade  $Q$ , a uma taxa de emissão constante, conforme ilustra a Figura 3.1.

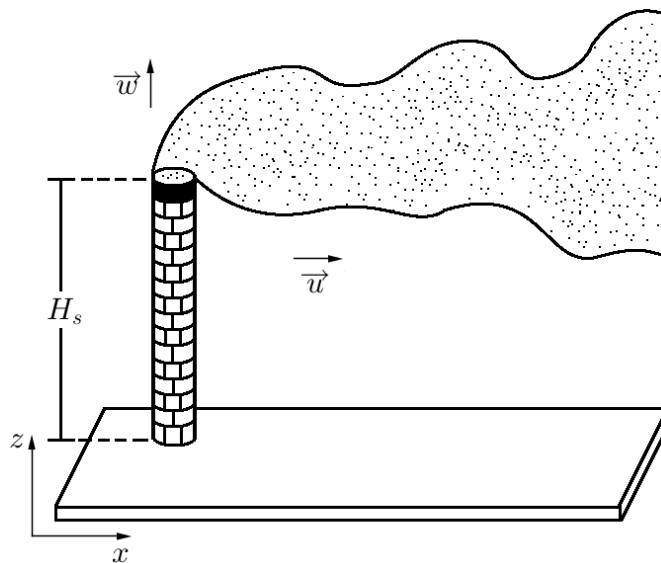


Figura 3.1: Esquema representativo do problema físico a ser estudado.

## 3.2 Equação Governante

Considerando uma espécie genérica  $c$  que se conserve na atmosfera, como por exemplo a concentração de um contaminante passivo, o modelo de dispersão atmosférica pode ser obtido aplicando-se a equação de conservação em  $c$ . Assim, em coordenadas cartesianas, desconsiderando-se fontes e sumidouros, temos

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \nu \nabla^2 c, \quad (3.1)$$

onde  $c$  representa a concentração de poluentes, em  $\text{gm}^{-3}$ ,  $\nu$  representa a difusividade molecular, em  $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ , e  $u$ ,  $v$  e  $w$  representam as velocidades instantâneas do vento, em  $\text{ms}^{-1}$ , nas direções longitudinal, transversal e vertical, respectivamente.

Aplicando-se a decomposição de Reynolds na equação (3.1), ou seja, fazendo-se

$$c = \bar{c} + c', \quad u = \bar{u} + u', \quad v = \bar{v} + v' \quad \text{e} \quad w = \bar{w} + w',$$

tomando-se a média temporal, considerando-se os postulados das regras da decomposição de Reynolds [51], e desconsiderando-se a difusão molecular na presença da difusão turbulenta, obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = - \left( \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \right), \quad (3.2)$$

onde  $\bar{c}$  denota a concentração média do contaminante passivo, em  $\text{gm}^{-3}$ ,  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$  são as componentes cartesianas do vento médio, em  $\text{ms}^{-1}$ , orientadas nas direções  $0 \leq x < \infty$ ,  $-\infty < y < \infty$  e  $0 \leq z < z_i$ , e os termos  $\overline{u'c'}$ ,  $\overline{v'c'}$  e  $\overline{w'c'}$  representam, respectivamente, o fluxo turbulento do contaminante, em  $\text{gs}^{-1}\text{m}^{-2}$ , nas direções longitudinal, transversal e vertical.

Note que, a equação (3.2) possui quatro variáveis (os fluxos turbulentos  $\overline{u'c'}$ ,  $\overline{v'c'}$ ,  $\overline{w'c'}$  e a concentração média  $\bar{c}$ ) e, assim, não pode ser resolvida diretamente. Este problema é conhecido como problema de fechamento da turbulência [5].

Uma forma amplamente utilizada para solucionar este problema é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) na qual, em analogia com a Lei de Fick da difusão molecular, assume-se que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. Assim, as expressões para os fluxos turbulentos

podem ser escritas como:

$$\overline{u'c'} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}, \quad (3.3)$$

$$\overline{v'c'} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}, \quad (3.4)$$

$$\overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \quad (3.5)$$

onde  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  representam os coeficientes de difusão turbulenta, em  $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ , nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente.

Substituindo-se as equações (3.3), (3.4) e (3.5) na equação (3.2), obtemos a equação da difusão-advecção, dada por:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right), \quad (3.6)$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo é o termo que expressa a dependência do tempo e os três termos restantes representam o transporte devido à advecção. No lado direito, os termos representam a difusão turbulenta.

Para o desenvolvimento de um modelo bidimensional integra-se a equação (3.6) transversalmente à direção do vento, e considera-se que a direção  $x$  coincide com a direção do vento médio. Assim, obtém-se

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right), \quad (3.7)$$

onde  $C$  representa a concentração integrada lateralmente,  $U$  e  $W$  representam, respectivamente, as componentes longitudinal ( $\bar{u}$ ) e vertical ( $\bar{w}$ ) da velocidade média do vento e  $K_x$  e  $K_z$  representam, respectivamente, os coeficientes de difusão turbulenta longitudinal e vertical.

Considera-se que a advecção na direção  $x$  é muito maior do que a difusão turbulenta nessa direção (aproximação da pluma alongada [10]). Essa hipótese é razoável em condições de vento moderado à forte. Assim, assume-se que

$$\left| U \frac{\partial C}{\partial x} \right| \gg \left| \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \right|, \quad (3.8)$$

a equação (3.7) pode ser escrita como:

$$\frac{\partial C(x, z, t)}{\partial t} + U \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial x} + W \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} \right). \quad (3.9)$$

Escrevendo o lado esquerdo da equação anterior na forma Lagrangeana e expandindo a derivada do lado direito, obtém-se a equação proposta a ser resolvida

$$\frac{DC}{Dt}(x, z, t) = K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}(x, z, t) + \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z}(x, z, t), \quad (3.10)$$

com

$$U = \frac{dx}{dt} \quad \text{e} \quad W = \frac{dz}{dt}, \quad (3.11)$$

sujeita às condições de contorno de fluxo nulo na base e no topo da CLA, e a existência de uma fonte contínua com taxa de emissão  $Q$ , em  $\text{gs}^{-1}$ , constante na altura  $H_s$ :

$$K_z \frac{\partial C(x, z, t)}{\partial z} = 0, \quad \text{em } z = 0 \text{ e } z = z_i, \quad (3.12)$$

$$C(0, z, t) = \frac{Q\delta(z - H_s)}{U}, \quad (3.13)$$

onde  $\delta$  é a função Delta de Dirac.

Como condição inicial considera-se que no início da emissão, não havia contaminantes no domínio de dispersão, isto é,

$$C(x, z, 0) = 0, \quad \text{para } t = 0. \quad (3.14)$$

### 3.3 Parametrização da Turbulência

Um importante ponto a ser considerado na modelagem da dispersão de poluentes na atmosfera é a escolha adequada do coeficiente de difusão turbulenta. Vários modelos para parametrizar a turbulência em diferentes condições de estabilidade atmosférica foram propostos por diversos autores. Os perfis dos coeficientes de difusão turbulentos apresentam valores nulos na superfície e no topo da CLA e alcançam suas magnitudes máximas em torno da região central da camada. Nesta seção serão apresentadas as formulações para os coeficientes de difusão, que descrevem a estrutura turbulenta da CLA, utilizados neste estudo. Essas foram escolhidas por serem formulações consagradas na literatura.

#### 3.3.1 Formulação proposta por Degrazia et al.

As formulações para o coeficiente de difusão turbulenta vertical propostas por Degrazia *et al.* [52] desenvolvidas a partir da teoria estatística de Taylor e de suas propriedades espectrais, para condições atmosféricas instáveis ( $L < 0$ ) e neutras ou estáveis ( $L \geq 0$ ),



são dadas, respectivamente, por:

$$K_z(z) = 0,22w_*z_i \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]^{\frac{4}{3}}, \quad (3.15)$$

$$K_z(z) = \frac{0,4 \left(1 + 3,7 \frac{z}{\Lambda}\right)^{\frac{1}{3}} u_* z}{\left[1 + 15 \frac{f_c z}{(u_*)_0} + 3,7 \frac{z}{\Lambda}\right]^{\frac{4}{3}}}, \quad (3.16)$$

sendo a escala de velocidade convectiva vertical ( $w_*$ ) e o comprimento de Monin-Obukhov local ( $\Lambda$ ), dados, respectivamente, por

$$w_* = (u_*)_0 \left(-\frac{z_i}{kL}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (3.17)$$

$$\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1,5\alpha_1 - \alpha_2}, \quad (3.18)$$

onde  $(u_*)_0$  representa a velocidade de atrito superficial,  $f_c = 10^{-4}s$  representa o parâmetro de Coriolis,  $k = 0,4$  é a constante de von Kármán,  $z_i$  é a altura da camada limite convectiva e  $h$  é a altura da camada limite estável. Para a CLA estável, segundo Degrazia *et al.* [52] assume-se  $\alpha_1 = 1,5$  e  $\alpha_2 = 1$ .

### 3.3.2 Formulação proposta por Ulke

As formulações para o coeficiente de difusão turbulenta vertical propostas por Ulke [53] para condições atmosféricas instáveis ( $L < 0$ ) e neutras ou estáveis ( $L \geq 0$ ) são dadas, respectivamente, por

$$K_z(z) = k(u_*)_0 z_i \left(\frac{z}{z_i}\right) \left(1 - \frac{z}{z_i}\right) \left(1 - 22 \frac{z_i}{L} \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (3.19)$$

e

$$K_z(z) = k(u_*)_0 h \left(\frac{z}{h}\right) \left(1 - \frac{z}{h}\right) \left(1 + 6,9 \frac{h}{L} \frac{z}{h}\right)^{-1}. \quad (3.20)$$

Estas formulações, estabelecidas considerando a hipótese de validade local das equações de energia cinética turbulenta, homogeneidade horizontal e regime permanente, foram utilizadas em modelos Eulerianos e fornecem uma transição suave entre diferentes regimes de estabilidade e diferentes alturas. Ulke [53] incluiu nas equações informações sobre turbulência gerada por empuxo e cisalhamento, inserindo nestas, a velocidade de atrito  $u_*$  e o parâmetro de estabilidade  $\frac{z_i}{L}$ .

### 3.4 Perfil do Vento

No modelo desenvolvido foi utilizado o perfil logarítmico para a velocidade média do vento (ver Figura 3.2), parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov. De acordo com Arya [10], esse perfil é dado por

$$U(z) = \begin{cases} \frac{u_*}{k} \left[ \ln \left( \frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left( \frac{z_0}{L} \right) \right], & \text{se } z \leq z_b, \\ U(z_b), & \text{se } z > z_b, \end{cases} \quad (3.21)$$

onde  $z_b = \min [|L|, 0, 1z_i]$ ,  $z_0$  é a rugosidade aerodinâmica e  $\Psi_m$  representa uma função de estabilidade dada por:

$$\Psi_m = \begin{cases} 2 \ln \left( \frac{1+A}{2} \right) + \ln \left( \frac{1+A^2}{2} \right) - 2 \arctan(A) + \frac{\pi}{2}, & \text{se } \frac{z}{L} < 0 \\ -\frac{5z}{L}, & \text{se } \frac{z}{L} \geq 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

sendo  $A$  definido por:

$$A = \left( 1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (3.23)$$

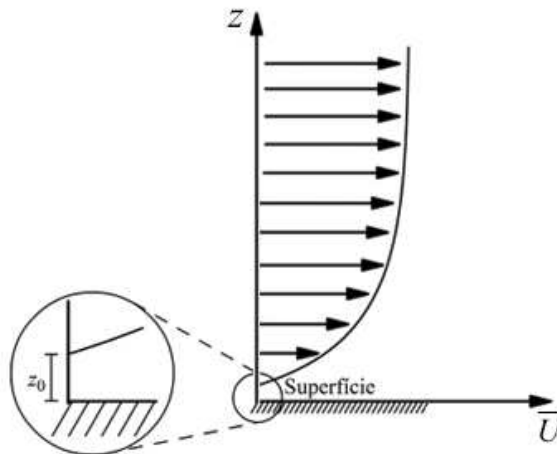


Figura 3.2: Perfil vertical da velocidade média do vento. O comprimento de rugosidade  $z_0$  é a altura onde a velocidade do vento é nula.

# Capítulo 4

## Implementação Numérica do Modelo

Neste capítulo é feita a descrição do procedimento adotado na discretização do domínio e das equações empregadas na implementação do modelo Semi-Lagrangiano, para simular a dispersão de poluentes na atmosfera.

### 4.1 Discretização do Domínio Computacional

Define-se o domínio do problema como uma região retangular plana limitada horizontalmente pela distância  $x_L$  a partir da fonte emissora e verticalmente pela altura da Camada Limite Atmosférica  $z_i$ , que varia de acordo com cada experimento.

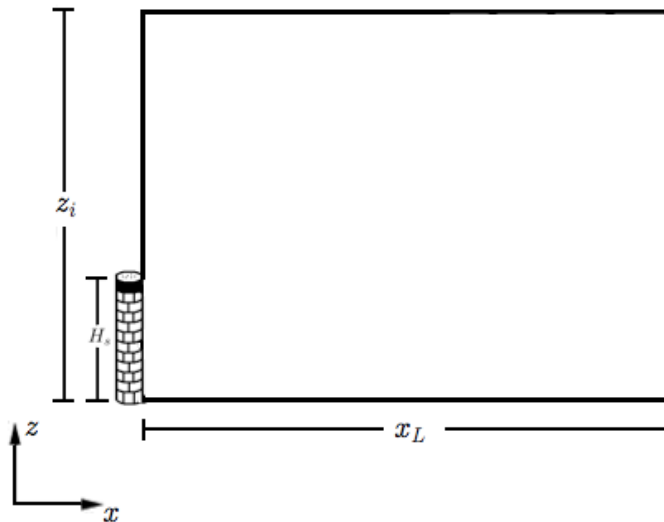


Figura 4.1: Esquema representativo do domínio de solução do problema.

Na direção horizontal a indexação é dada por  $i$ , com  $1 \leq i \leq n_x$ . A estrutura do modelo, nesta direção, é distribuída em pontos de grade uniforme. Dessa forma, faz-se necessário informar o comprimento do domínio  $x_L$  e o espaçamento de grade horizontal  $\Delta x$ .

Na direção vertical a indexação é dada por  $k$ , com  $1 \leq k \leq n_z$ . A estrutura do modelo, nesta direção, é definida por uma grade com espaçamento variável. É arbitrado um valor para a altura do primeiro nível a partir da superfície ( $v$ ), e o espaçamento de grade no último nível do modelo ( $\iota$ ). Entre os demais níveis, os espaçamentos de grade são definidos como uma função logarítmica da altura e são dados pelas equações:

$$a' = v - b \log(v), \quad (4.1)$$

$$b' = \frac{v - \iota}{\log(v/z_i)}, \quad (4.2)$$

$$\Delta z(k) = a' + b' \log(z(k)), \quad (4.3)$$

Este procedimento gera uma grade mais refinada nos níveis inferiores da CLA, ou seja, nas proximidades da superfície, onde ocorrem os maiores gradientes verticais das variáveis.

## 4.2 Discretização da Equação

Para que seja possível tratar numericamente a equação governante do modelo, a mesma também deve ser discretizada, ou seja, as derivadas devem ser representadas por expressões algébricas. Essas expressões são denominadas de *aproximações por diferenças finitas*.

A discretização do termo advectivo da equação (3.10) é feita utilizando-se o esquema de três níveis de tempo discutido no Capítulo 3. Para manter a estabilidade numérica no processo de integração, em relação ao termo de difusão turbulenta, o primeiro termo do lado direito da equação é discretizado utilizando-se o esquema trapezoidal implícito. Assim, as aproximações Semi-Lagrangeanas, para as equações (3.10) e (3.11), são dadas, respectivamente, por

$$\frac{C^+ - C^-}{2\Delta t} = \frac{1}{2} \left[ \left( K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)^+ + \left( K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)^- \right] + \left( \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} \right)^0, \quad (4.4)$$

$$a = \Delta t \cdot U(x - a, z - b, t), \quad (4.5)$$

$$b = \Delta t \cdot W(x - a, z - b, t), \quad (4.6)$$

onde os sobrescritos “+”, “0” e “−” denotam, respectivamente, a avaliação da variável ou de suas derivadas, no ponto de chegada ( $x, z, t + \Delta t$ ), no ponto médio da trajetória ( $x - a, z - b, t$ ) e no ponto de partida ( $x - 2a, z - 2b, t - \Delta t$ ).

Manipulando-se algebricamente a equação (4.4), obtém-se

$$C^+ - \Delta t \left( K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)^+ = C^- + \Delta t \left( K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)^- + 2\Delta t \left( \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} \right)^0. \quad (4.7)$$

Considere os três pontos mostrados na Figura 4.2, com espaçamentos  $z_{i+1} - z_i = \beta\Delta z$  e  $z_i - z_{i-1} = \alpha\Delta z$ , com  $0 < \alpha, \beta < 1$ ,  $\alpha \neq \beta$  e  $\Delta z$  um espaçamento de referência.

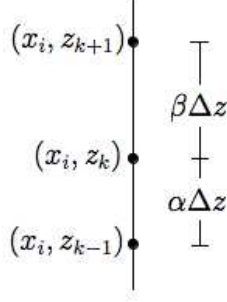


Figura 4.2: Pontos com espaçamento não uniforme na direção  $z$ .

As aproximações por diferenças finitas para as derivadas parciais apresentadas na equação 4.7, obtidas a partir da expansão em série de Taylor em torno do ponto  $(x_i, z_k)$ , são dadas por (Fortuna [55]):

$$\left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{i,k} \approx \frac{\alpha^2 C_{i,k+1} + (\beta^2 - \alpha^2) C_{i,k} - \beta^2 C_{i,k-1}}{(\alpha^2 \beta + \alpha \beta^2) \Delta z}, \quad (4.8)$$

$$\left. \frac{\partial K_z}{\partial z} \right|_{i,k} \approx \frac{\alpha^2 K_{z_{i,k+1}} + (\beta^2 - \alpha^2) K_{z_{i,k}} - \beta^2 K_{z_{i,k-1}}}{(\alpha^2 \beta + \alpha \beta^2) \Delta z}, \quad (4.9)$$

$$\left. \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right|_{i,k} \approx \frac{\alpha C_{i,k+1} - (\alpha + \beta) C_{i,k} + \beta C_{i,k-1}}{\frac{(\beta \alpha^2 + \alpha \beta^2)}{2} \Delta z^2}. \quad (4.10)$$

A equação 4.7 é escrita para os pontos de grade  $(x_i, z_k)$ , com  $2 \leq i \leq n_x$  e  $2 \leq z \leq n_z - 1$ . Utiliza-se o método TDMA (TriDiagonal Matrix Algorithm) para a solução dos sistemas lineares gerados pela aplicação da equação 4.7 em cada coluna do domínio (Fortuna [55]), começando pela coluna imediatamente após a da fonte. Assim, a cada passo de tempo o modelo resolverá  $n_x - 1$  sistemas lineares com  $n_z - 2$  equações.

Como as condições de contorno na fronteira inferior e superior são de fluxo nulo, faz-se  $C(i, 1) = C(i, 2)$  e  $C(i, n_z) = C(i, n_z - 1)$ , onde  $n_z$  é o índice que representa o topo da CLA.

### 4.3 Algoritmo para a Solução Numérica

A seguir é apresentado o algoritmo implementado em linguagem de programação FORTRAN para a obtenção das medidas de concentração.

1. Inicializar as variáveis: altura da fonte de emissão ( $H_s$ ), o comprimento de rugosidade aerodinâmica ( $z_0$ ), a altura da CLA ( $z_i$  ou  $h$ ), o comprimento do domínio horizontal ( $x_L$ ), o espaçamento de grade horizontal ( $\Delta x$ ), a altura do primeiro nível a partir da superfície ( $v$ ) e o espaçamento de grade no último nível do modelo ( $\iota$ );
2. Discretizar o domínio em  $n_x \times n_z$  pontos de grade;
3. Inicializar as variáveis micrometeorológicas e de emissão do experimento:

$$u_*, w_*, L, \text{ e } Q;$$

4. Calcular os valores de  $U$ ,  $W$  e  $K_z$  em todos os pontos de grade;
5. Calcular os valores das funções representadas no lado direito da equação (4.7) em todos os pontos de grade;
6. Avançar no tempo e determinar as posições de partida da partícula nos instantes  $t - \Delta t$  e  $t$ , aproximando o seu deslocamento com a velocidade na posição intermediária da trajetória no instante de tempo  $t$ . Essa aproximação é obtida com o processo iterativo gerado pelas equações (4.5) e (4.6). O critério de parada adotado foi de interromper as iterações quando o erro relativo do comprimento da trajetória calculado para duas iterações sucessivas fosse menor ou igual a 1%;
7. Calcular os valores das função do passo 4, nos pontos de partida nos instantes  $t - \Delta t$  e  $t$ , utilizando-se o polinômio interpolador cúbico de Lagrange, descrito no Capítulo 3.
8. Obter os valores de  $C^+$ , resolvendo a equação (4.7) utilizando o método direto TDMA.
9. Atualizar os valores das variáveis micrometeorológicas e da variável  $C$  nos instantes  $t - \Delta t$  e  $t$ , avançar no tempo e repetir a sequência a partir do passo 4 até atingir o tempo de integração desejado.

# Capítulo 5

## Dados utilizados para a validação do Modelo

Neste capítulo são apresentadas as principais características dos experimentos de campo e os índices estatísticos utilizados para validar o modelo proposto. A avaliação do modelo foi feita comparando-se os dados de concentração observados nos experimentos de Copenhagen, de Cabauw, de Hanford e de Prairie Grass, com os dados obtidos a partir da solução numérica da equação de difusão-advecção pelo método Semi-Lagrangiano.

### 5.1 Experimento Copenhagen

O experimento Copenhagen, descrito por Gryning e Lyck [56] e Gryning *et al.* [57], foi realizado entre setembro de 1978 e julho de 1979 na região norte da cidade de Copenhagen, Dinamarca, sob condições atmosféricas quase neutras e instáveis. Trata-se de um experimento de fonte elevada, onde o traçador  $SF_6$  (hexafluoreto de enxofre) foi liberado sem empuxo a partir de uma torre de 115 m de altura e coletado ao nível do solo, por unidades de amostragem localizadas em três arcos perpendiculares a direção do vento médio. As unidades de amostragem foram posicionadas a distâncias de 2 a 6 km, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do contaminante, conforme ilustra a Figura 5.1. O tempo médio das medidas foi de 1 h e sua incerteza experimental são de aproximadamente 10%.

A região era principalmente residencial com rugosidade aerodinâmica  $z_0 = 0,6$  m.

A Tabela 5.1 apresenta os dados meteorológicos, em médias horárias, dos experimentos de dispersão de Copenhagen que foram utilizados como parâmetros de entrada no modelo, para avaliar a evolução para o regime estacionário.

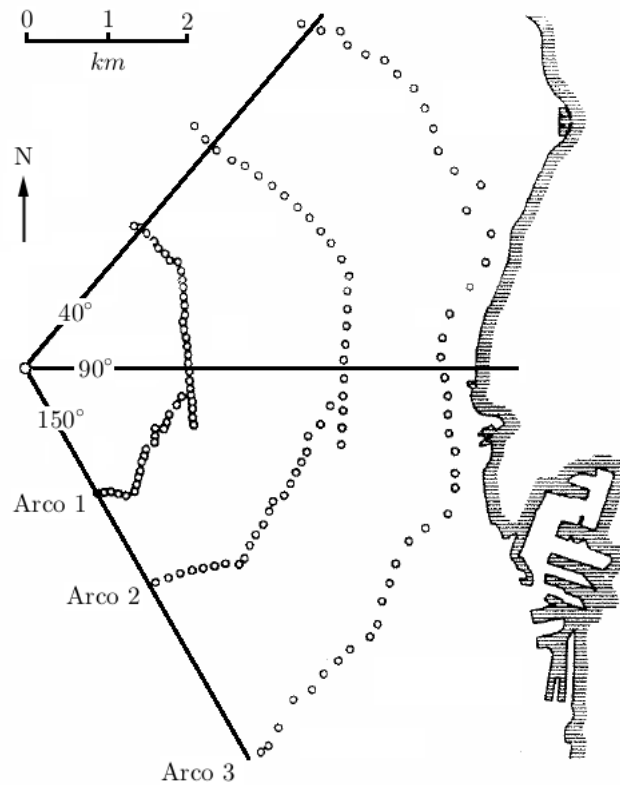


Figura 5.1: Experimento Copenhagen. Fonte: Figura adaptada de Gryning e Lyck [56]

Tabela 5.1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento Copenhagen.

Exp.	Data	$L$	$z_i$ (m)	$u_*$ (m)	$w_*$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$Q$ ( $\text{gs}^{-1}$ )	$U_{115m}$ (m)
1	20/09/1978	-37	1980	0,36	1,8	3,2	3,4
2	26/09/1978	-292	1920	0,73	1,8	3,2	10,6
3	19/10/1978	-71	1120	0,38	1,3	3,2	5,0
4	03/11/1978	-133	390	0,38	0,7	2,3	4,6
5	09/11/1978	-444	820	0,45	0,7	3,2	6,7
6	30/04/1979	-432	1300	1,05	2,0	3,1	13,2
7	27/06/1979	-104	1850	0,64	2,2	2,4	7,6
8	06/07/1979	-56	810	0,69	2,2	3,0	9,4
9	19/07/1979	-289	2090	0,75	1,9	3,3	10,5

Também foram utilizados os dados transientes do experimento Copenhagen. Os valores médios dos parâmetros micrometeorológicos  $u_*$  e  $L$  estão disponíveis a cada 10 min e as medidas médias de concentração a cada 20 min a partir da primeira hora de emissão. Estas medidas são apresentadas nas Tabelas 5.2 e 5.3. Mais detalhes sobre os dados do experimento transiente podem ser encontrados em Tirabassi e Rizza [58].

O experimento 6 foi desconsiderado, pois não constam na literatura os dados de  $u_*$



e  $L$  de 10 em 10 min para este experimento.  $z_i$  foi considerado fixo e igual aos valores descritos na Tabela 5.1 e  $w_*$  foi calculado utilizando a relação  $w_*/u_* = (-h/kL)^{1/3}$ .

Tabela 5.2: Velocidade de atrito  $u_*$ , em  $ms^{-1}$ , para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Cada passo de tempo corresponde a 10 min.

Passo de tempo	Experimento:							
	1	2	3	4	5	7	8	9
1	0,36	0,68	0,46	0,56	0,58	0,48	0,65	0,72
2	0,37	0,67	0,45	0,51	0,52	0,48	0,79	0,73
3	0,40	0,81	0,47	0,37	0,51	0,57	0,67	0,60
4	0,43	0,68	0,39	0,44	0,58	0,62	0,67	0,59
5	0,35	0,75	0,39	0,48	0,59	0,53	0,68	0,65
6	0,34	0,74	0,40	0,48	0,52	0,65	0,65	0,71
7	0,42	0,76	0,40	0,39	0,52	0,63	0,68	0,73
8	0,43	0,82	0,41	0,40	0,45	0,65	0,67	0,73
9	0,40	0,76	0,31	0,39	0,44	0,66	0,73	0,73
10	0,37	0,73	0,34	0,39	0,44	0,62	0,73	0,66
11	0,35	0,69	0,39	0,39	0,44	0,52	0,75	0,67
12	0,36	0,66	0,40	0,39	0,43	0,62	0,69	0,74

Tabela 5.3: Comprimento de Monin-Obukhov  $L$ , em  $m$ , para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen. Cada passo de tempo corresponde a 10 min.

Passo de tempo	Experimento:							
	1	2	3	4	5	7	8	9
1	-26	-178	-152	-75	-492	-71	-71	-793
2	-23	-227	-194	-42	-215	-80	-85	-471
3	-83	-311	-106	-23	-386	-64	-47	-202
4	-42	-160	-101	-32	-735	-111	-49	-3666
5	-36	-203	-129	-71	-366	-177	-45	-633
6	-42	-286	-70	-80	-273	-67	-63	-13588
7	-47	-155	-83	-83	-273	-87	-41	-593
8	-38	-228	-60	-101	-262	-71	-47	-471
9	-83	-184	-106	-129	-395	-56	-70	-389
10	-21	-389	-42	-129	-395	-111	-64	-375
11	-32	-133	-101	-129	-395	-215	-52	-262
12	-29	-375	-70	-129	-759	-123	-39	-252

## 5.2 Experimento Cabauw

O experimento Cabauw, descrito por Agterberg *et al.* [59] e Van Duuren e Nieuwstadt [60], foi realizado na cidade de Cabauw, Holanda, nos anos de 1977 e 1978, sob condições atmosféricas estáveis e instáveis. O traçador  $SF_6$  (hexafluoreto de enxofre) foi lançado sem empuxo a partir de alturas de 80 ou 200 m e coletado ao nível de 1,5 m do solo. Logo, trata-se de um experimento de fonte elevada. As concentrações foram medidas em intervalos de 30 min, por unidades de amostragem localizadas em um único arco posicionadas a distâncias de 3 a 5 km, dependendo da direção do vento, conforme ilustra a Figura 5.2. Nesse experimento, o comprimento de rugosidade aerodinâmica é função da direção do vento, variando de  $z_0 = 0,10$  m a  $z_0 = 0,20$  m.

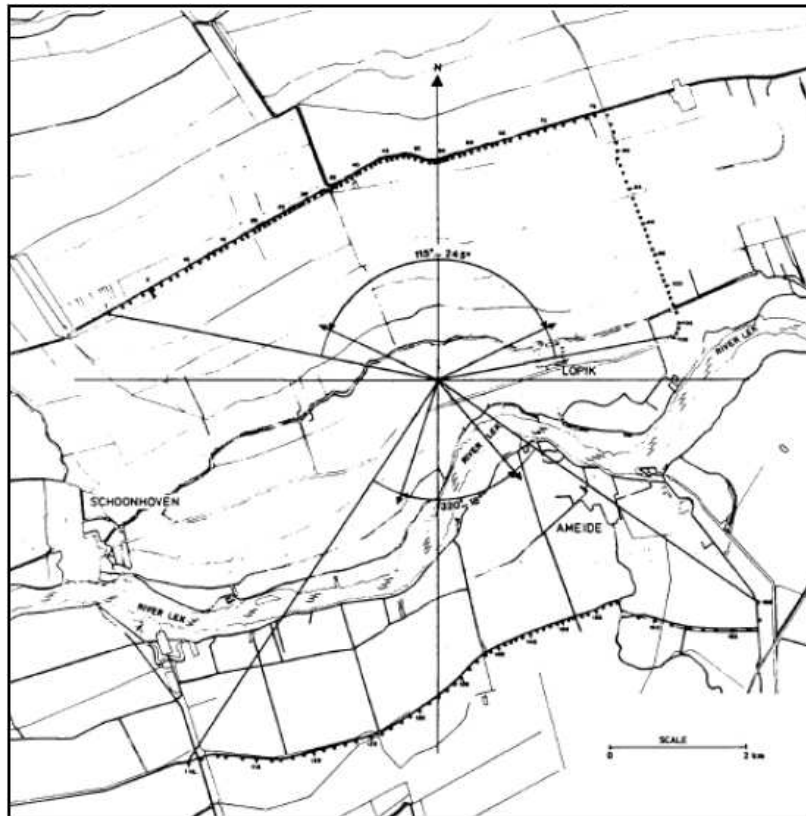


Figura 5.2: Mapa da área da região de Cabauw com os locais das estações lançamento pré-selecionados. Fonte: Figura adaptada de Agterberg *et al.* [59].

A Tabela 5.4 apresenta os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão de Cabauw que foram utilizados como parâmetros de entrada no modelo.

Tabela 5.4: Parâmetros micrometeorológicos do experimento Cabauw.

Exp.	Data	$L$ (m)	$z_i$ (m)	$h$ (m)	$u_*$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$Q$ ( $\text{gs}^{-1}$ )	$U_{z_r}$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$z_r$ (m)	$z_0$ (m)	$H_S$ (m)
1A	28/04/1977	-311,12	789	—	0,571	3,88	5,50	10	0,19	200
1B	28/04/1977	-328,79	1694	—	0,528	3,88	5,10	10	0,19	200
2A	12/10/1977	-531,06	540	—	0,657	3,51	6,40	10	0,19	200
2B	12/10/1977	-1079,05	590	—	0,682	3,51	6,70	10	0,19	200
3A	18/10/1977	-259,29	370	—	0,417	3,54	4,00	10	0,19	200
3B	18/10/1977	-343,89	420	—	0,399	3,54	3,85	10	0,19	200
4A	27/10/1977	105,49	—	500	0,230	2,47	2,55	10	0,19	200
4B	27/10/1977	180,67	—	500	0,208	2,47	2,20	10	0,19	200
5A	22/12/1977	-2535,20	250	—	0,444	1,79	5,10	10	0,10	80
5B	22/12/1977	638,11	—	250	0,410	1,79	4,80	10	0,10	80
6A	17/01/1978	-2033,41	900	—	0,401	1,34	4,60	10	0,10	80
6B	17/01/1978	554,41	—	900	0,383	1,34	4,50	10	0,10	80
7A	18/04/1978	-118,08	1450	—	0,523	3,22	5,70	10	0,10	200
8A	25/05/1978	-772,49	500	—	0,456	4,61	5,80	40	0,21	200
8B	25/05/1978	-772,49	500	—	0,456	4,61	5,80	40	0,21	200
9A	13/06/1978	-76,88	1580	—	0,498	4,42	6,35	40	0,11	200
9B	13/06/1978	-63,76	1580	—	0,466	4,42	5,85	40	0,11	200
10A	26/07/1978	-3953,37	600	—	0,541	2,80	5,35	10	0,19	200
10B	26/07/1978	-4495,50	600	—	0,577	2,80	5,70	10	0,19	200
13A	10/10/1978	186,14	—	200	0,208	1,42	2,20	10	0,19	80
13B	10/10/1978	557,34	—	200	0,375	1,42	3,80	10	0,19	80
14A	12/10/1978	-169,91	350	—	0,391	1,06	3,70	10	0,19	80
14B	12/10/1978	-1571,82	400	—	0,345	1,06	3,40	10	0,19	80
15A	31/10/1978	-1526,16	700	—	0,345	1,27	3,40	10	0,19	80
15B	31/10/1978	-311,78	700	—	0,384	1,27	3,70	10	0,19	80

### 5.3 Experimento Hanford

O experimento Hanford, descrito por Doran e Horst [61], foi realizado em uma região semi-árida de sul a leste do estado de Washington, EUA, no ano de 1983, sob condições atmosféricas estáveis e quase-neutras. Trata-se de um experimento de fonte baixa. Os traçadores  $SF_6$  (hexafluoreto de enxofre) e  $ZnS$  foram lançados, simultaneamente, sem empuxo de uma altura de 2 m a uma taxa média de liberação de  $0,3 \text{ gs}^{-1}$ . Ao todo foram conduzidos 6 experimentos, com tempo médio de liberação em torno de 30 min, exceto no experimento 5 que foi de 22 min. As concentrações foram medidas por unidades de amostragem localizadas em círculos concêntricos com raios de 100 m, 200 m, 800 m, 1600 m e 3200 m. O terreno onde foi realizado o experimento é plano com comprimento de rugosidade  $z_0 = 0,03 \text{ m}$ .

A Tabela 5.5 apresenta os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão de Hanford que foram utilizados como parâmetros de entrada no modelo.

Tabela 5.5: Parâmetros micrometeorológicos do experimento Hanford.

Exp.	Data	$L$ (m)	$h$ (m)	$u_*$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$Q$ ( $\text{gs}^{-1}$ )	$U_{2m}$ (m)
1	18/05/1983	166	325	0,40	0,3	3,63
2	26/05/1983	44	135	0,26	0,3	1,42
3	05/06/1983	77	182	0,27	0,3	2,02
4	12/06/1983	34	104	0,20	0,3	1,50
5	24/06/1983	59	157	0,26	0,3	1,41
6	27/06/1983	71	185	0,30	0,3	1,54

## 5.4 Experimento Prairie Grass

O experimento Prairie Grass, descrito por Barad [62], foi realizado em O'Neill, Nebraska, no ano de 1956, sob condições atmosféricas estáveis e instáveis. Trata-se de um experimento de fonte baixa. O traçador  $SO_2$  (dióxido de enxofre) foi lançado a partir de uma altura de 0,46 m e coletado ao nível de 1,5 m do solo. As concentrações foram medidas por unidades de amostragem localizadas em arcos concêntricos posicionados a distâncias de 50 m, 100 m, 200 m, 400 m e 800 m. O terreno de Prairie Grass é plano, com comprimento de rugosidade de 0,006 m.

Os experimentos 3, 4, 13 e 14 foram excluídos da avaliação, por apresentarem condições de estabilidade extrema com valores da velocidade de atrito  $u_*$  muito pequenos.

As Tabelas 5.6 e 5.7 apresentam os dados meteorológicos dos experimentos de dispersão de Prairie Grass, em condições atmosféricas instáveis e estáveis, respectivamente. Os dados de entrada do modelo apresentados nessas tabelas, bem como os dados de concentração, foram obtidos em <http://www.dmu.dk/en/air/models/background/excelprairie/>.

Tabela 5.6: Parâmetros micrometeorológicos do experimento Prairie Grass (Casos Instáveis).

Exp.	Data	Horário	$L$ (m)	$z_i$ (m)	$u_*$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$w_*$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$Q$ ( $\text{gs}^{-1}$ )	$U_{1m}$ (m)
1	03/07/1956	11:00	-8,89	264	0,2005	0,84	81,5	2,39
2	03/07/1956	15:00	-7,71	739	0,1471	0,91	83,9	1,74
5	06/07/1956	14:00	-31,25	782	0,4130	1,64	77,8	5,15
6	06/07/1956	17:00	-117,99	876	0,4719	1,25	89,5	5,99
7	10/07/1956	14:00	-12,41	1340	0,3320	2,15	89,9	4,02
8	10/07/1956	17:00	-24,81	1380	0,3275	1,70	91,1	4,06
9	11/07/1956	10:00	-53,00	548	0,4854	1,44	92,0	6,11
10	11/07/1956	12:00	-17,17	949	0,3385	1,75	92,1	4,15
11	14/07/1956	08:00	-87,52	193	0,5346	0,94	95,9	6,77
12	14/07/1956	10:00	-59,15	415	0,5719	1,49	99,1	7,21
15	23/07/1956	08:00	-9,82	96	0,2420	0,70	95,5	2,90
16	23/07/1956	10:00	-6,75	400	0,2521	1,33	93,0	2,96
19	25/07/1956	11:00	-37,08	650	0,4260	1,50	101,8	5,33
20	25/07/1956	14:00	-63,65	806	0,6545	2,07	101,2	8,26
25	01/08/1956	13:00	-8,57	682	0,2084	1,22	101,4	2,48
26	02/08/1956	12:00	-41,78	973	0,4529	1,76	97,6	5,68
27	02/08/1956	14:00	-30,52	1300	0,4333	2,05	98,8	5,40
30	03/08/1956	13:00	-46,13	1560	0,4999	2,19	98,4	6,28
31	03/08/1956	15:00	-93,67	2100	0,5453	2,09	96,0	6,91
33	07/08/1956	13:00	-80,71	650	0,5453	1,48	94,7	6,90
34	07/08/1956	15:00	-104,84	700	0,6670	1,70	97,4	8,46
43	15/08/1956	12:00	-21,38	574	0,3790	1,54	98,9	4,68
44	15/08/1956	14:00	-27,84	1330	0,4335	2,13	100,7	5,39
45	15/08/1956	17:00	-105,09	836	0,4187	1,13	100,8	5,31
47	20/08/1956	10:00	-7,00	311	0,2567	1,23	103,1	3,02
48S	20/08/1956	12:00	-8,16	1210	0,2334	1,68	104,0	2,77
48	20/08/1956	09:00	-74,11	413	0,5466	1,32	104,1	6,91
49	21/08/1956	11:00	-37,23	553	0,4819	1,61	102,0	6,03
50	21/08/1956	14:00	-31,13	754	0,4861	1,91	102,8	6,06
51	21/08/1956	15:00	-44,32	1880	0,4923	2,33	102,4	6,18
52	24/08/1956	11:00	-11,51	950	0,3347	1,98	104,0	4,04
57	25/08/1956	17:00	-238,66	1620	0,5039	1,29	101,5	6,42
61	27/08/1956	11:00	-50,78	455	0,5564	1,57	102,1	7,00

Tabela 5.7: Parâmetros micrometeorológicos do experimento Prairie Grass (Casos Estáveis).

Exp.	Data	Horário	$L$ (m)	$h$ (m)	$u_*$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$w_*$ ( $\text{ms}^{-1}$ )	$Q$ ( $\text{gs}^{-1}$ )	$U_{1m}$ (m)
17	23/07/1956	20:00	61,54	148	0,2207	-0,44	56,5	2,87
18	23/07/1956	22:00	30,56	100	0,2027	-0,51	57,6	2,68
21	25/07/1956	22:00	216,92	379	0,4132	-0,55	50,9	5,31
22	26/07/1956	00:00	241,02	438	0,4975	-0,63	48,4	6,39
23	29/07/1956	21:00	245,56	405	0,4181	-0,53	40,9	5,37
24	29/07/1956	23:00	327,37	461	0,4061	-0,47	41,2	5,21
28	03/08/1956	00:00	20,50	100	0,1578	-0,46	41,7	2,12
29	03/08/1956	02:00	35,86	122	0,2584	-0,62	41,5	3,40
32	06/08/1956	20:00	6,32	100	0,1076	-0,46	41,4	1,60
35S	07/08/1956	23:00	72,88	175	0,2621	-0,50	41,8	3,40
35	11/08/1956	22:00	3,63	100	0,0670	-0,35	38,8	1,10
36	11/08/1956	23:00	7,53	100	0,0942	-0,38	40,0	1,37
37	12/08/1956	03:00	115,92	240	0,3100	-0,50	40,3	4,00
38	12/08/1956	05:00	117,02	232	0,2868	-0,47	45,4	3,70
39	13/08/1956	22:00	8,06	100	0,1172	-0,46	40,7	1,69
40	14/08/1956	01:00	7,49	100	0,1086	-0,44	40,5	1,58
41	14/08/1956	03:00	38,48	122	0,2406	-0,57	39,9	3,16
42	14/08/1956	05:00	162,73	326	0,4094	-0,60	56,4	5,27
46	15/08/1956	19:00	155,16	306	0,3775	-0,56	99,7	4,86
53	24/08/1956	20:00	4,04	100	0,0972	-0,48	45,2	1,56
54	24/08/1956	22:00	48,27	142	0,2603	-0,57	43,4	3,40
55	25/08/1956	01:00	140,84	301	0,4013	-0,61	45,3	5,17
56	25/08/1956	02:00	104,64	232	0,3213	-0,54	45,9	4,15
58	25/08/1956	19:00	6,90	100	0,1123	-0,47	40,5	1,65
59	25/08/1956	22:00	12,59	100	0,1460	-0,50	40,2	2,02
60	26/08/1956	01:00	75,19	194	0,3116	-0,59	38,5	4,04
65	29/08/1956	20:00	51,46	157	0,3012	-0,64	44,1	3,93
66	29/08/1956	22:00	18,22	100	0,1894	-0,57	43,1	2,56
67	30/08/1956	01:00	104,62	223	0,2981	-0,50	45,0	3,85
68	30/08/1956	03:00	23,52	100	0,1640	-0,45	42,8	2,19

## 5.5 Análise Estatística

Índices estatísticos apropriados, recomendados pela Agência de Proteção Ambiental Americana (US EPA) e pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera, são utilizados para avaliar a qualidade das simulações com o modelo desenvolvido neste trabalho. Estes índices servem para comparar os dados de concentração obtidos pelas simulações com os dados observados nos experimentos de campo. São eles [36]:

1. Erro Quadrático Médio Normalizado ( $Nmse$ ): definido como

$$Nmse = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}.$$

Informa sobre todos os desvios entre concentrações simuladas nos modelos ( $C_p$ ) e concentrações observadas ( $C_o$ ). É uma estatística adimensional, e seu valor ótimo é zero.

2. Desvio Fracional ( $F_b$ ): definido como

$$F_b = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}.$$

Este coeficiente informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

3. Desvio Padrão Fracional ( $F_s$ ): definido como

$$F_s = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)},$$

onde  $\sigma_o$  e  $\sigma_p$  representam, respectivamente, os desvios padrões das concentrações observadas e simuladas. Este índice compara variabilidades dos dados observados e modelados. O valor ótimo é zero.

4. Fator de 2 ( $FA2$ ): representa a fração de dados que estão entre  $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$ . Quanto mais próximo de 1 estiver este valor, maior é a confiabilidade do modelo.

5. Coeficiente de Correlação ( $Cor$ ): definido como

$$Cor = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}.$$

Este índice representa o grau de concordância entre as variáveis comparadas. O valor ótimo é 1.

Para um modelo de dispersão atmosférica perfeito, ou seja, que represente fielmente as condições observadas, teremos  $F_b$ ,  $F_s$  e  $Nmse$  iguais a 0, e  $Cor$  e  $FA2$  iguais a 1. Chang e Hanna [63], sugerem que para um desempenho “aceitável” do modelo, os índices estatísticos devem estar dentro dos seguintes limites de tolerância:  $|F_b| < 0,3$ ,  $FA2 > 0,5$  e  $Nmse < 4$ .

# Capítulo 6

## Resultados e Discussões - Experimentos Estacionários

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos através das simulações numéricas realizadas com o modelo Semi-Lagrangiano e as comparações com os dados observados em experimentos estacionários e com resultados obtidos por diferentes modelos de dispersão.

### 6.1 Evolução para Estacionaridade

Devido à natureza parabólica da equação da advecção-difusão, com as condições de contorno no domínio constantes no decorrer do tempo, espera-se que a solução da equação evolua para o regime estacionário. Assim, embora o modelo desenvolvido seja transiente, foram realizadas simulações numéricas com o objetivo de verificar se esta evolução para estacionaridade seria replicada, mantendo a estabilidade do processo iterativo.

Para esta avaliação, são obtidas médias de concentração em cada ponto de grade, a partir do instante em que o regime é considerado estacionário, a fim de compará-las com os dados observados experimentalmente. As simulações foram realizadas para um período que fosse pelo menos 2 vezes a escala de tempo característica do escoamento, definida como:

$$T = \frac{x_L}{\bar{U}},$$

onde  $\bar{U}$  denota a média dos valores de  $U$  na direção  $z$ . O cálculo das médias temporais em cada ponto de grade foi iniciado a partir do instante  $1,6T$ .

Para verificar se o período de média era representativo do processo estacionário, foi realizado o seguinte procedimento: foram escolhidos 9 pontos no interior do domínio, a saber, 3 pontos na superfície, 3 pontos na altura correspondente a aproximadamente



metade da altura da CLA e 3 pontos no topo da CLA. O período para o cálculo das médias foi dividido em dois subperíodos  $T_1$  e  $T_2$  e foram calculadas médias de concentração para cada um dos pontos escolhidos nestes subperíodos. O mesmo procedimento foi feito para o cálculo da concentração média em todo domínio. O processo foi considerado estacionário desde que o maior valor do erro relativo das médias calculadas nos subperíodos sucessivos de tempo fosse menor ou igual a 0,01%.

### 6.1.1 Resultados - Experimento Copenhagen

Para as simulações do experimento Copenhagen com o modelo Semi-Lagrangeano, consideramos  $W = 0$ . O domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores (6100 m) e o domínio vertical foi fixado igual a altura da CLA,  $z_i$ . O passo no tempo foi mantido constante e obtido de modo que a condição estabelecida pela equação (2.17) fosse satisfeita. As condições de contorno e os parâmetros micrometeorológicos foram mantidos constantes no decorrer do tempo (ver Tabela 5.1).

A influência do espaçamento de grade nos resultados obtidos foi avaliada realizando simulações com duas grades diferentes. Neste texto apresentamos os resultados para duas grades. A Grade 1 com espaçamento horizontal  $\Delta x = 50$  m e espaçamento vertical definido por  $v = 2$  m e  $\iota = 30$  m, e a Grade 2 com espaçamento horizontal  $\Delta x = 50$  m e espaçamento vertical definido por  $v = 5$  m e  $\iota = 40$  m.

Para cada uma das grades foram conduzidas simulações utilizando-se diferentes parametrizações para a difusividade turbulenta vertical, ambas para condições atmosféricas instáveis. As formulações utilizadas foram propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53], descritas no Capítulo 3.

A Tabela 6.1 apresenta erro relativo (ER) calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano para o experimento Copenhagen. Os índices estatísticos calculados para comparar os dados observados e os previstos pelo modelo, para cada grade e cada parametrização são apresentados na Tabela 6.2.

A Figura 6.1 ilustra os diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Copenhagen ( $C_o$ ) pelos resultados das concentrações simuladas ( $C_p$ ), comparando as diferenças entre as previsões para as diferentes grades e diferentes formulações de  $K_z$ . O diagrama (a) refere-se a Grade 1 e o diagrama (b) refere-se a Grade 2. A reta bisetritz (linha contínua) indica os valores de ( $C_o$ ) e ( $C_p$ ) iguais. Portanto, quanto mais próximos os pontos estiverem dessa reta, melhores os resultados. As linhas tracejadas indicam o Fator de 2. Valores dentro dessa faixa são considerados aceitáveis.

Tabela 6.1: Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano para o experimento Copenhagen, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Exp.	Dist.	Grade 1		Grade 2	
		ER $C_p/Q$ (Degrazia)	ER $C_p/Q$ (Ulke)	ER $C_p/Q$ (Degrazia)	ER $C_p/Q$ (Ulke)
1	1900	0,46 %	6,94 %	6,01 %	6,17 %
	3700	66,23 %	74,89 %	60,60 %	72,72 %
2	2100	20,07 %	30,48 %	29,36 %	29,18 %
	4200	16,94 %	14,23 %	12,88 %	14,57 %
3	1900	3,17 %	12,80 %	12,19 %	12,68 %
	3700	20,25 %	28,13 %	22,99 %	28,45 %
	5400	7,90 %	21,39 %	12,09 %	26,51 %
4	4000	7,46 %	19,55 %	20,84 %	25,55 %
5	2100	14,58 %	2,38 %	12,35 %	0,14 %
	4200	4,45 %	21,23 %	0,34 %	20,89 %
	6100	1,00 %	27,56 %	3,82 %	26,55 %
6	2000	8,58 %	38,13 %	28,28 %	31,56 %
	4200	2,70 %	24,32 %	8,10 %	17,56 %
	5900	5,46 %	28,41 %	9,28 %	22,40 %
7	2000	38,05 %	38,50 %	39,55 %	38,35 %
	4100	33,53 %	22,76 %	24,92 %	23,96 %
	5300	24,21 %	9,41 %	9,41 %	10,76 %
8	1900	27,64 %	7,69 %	4,56 %	6,00 %
	3600	62,87 %	29,20 %	51,98 %	31,18 %
	5300	69,07 %	46,71 %	67,76 %	50,65 %
9	2100	12,00 %	20,74 %	19,86 %	19,21 %
	4200	27,00 %	21,22 %	20,57 %	21,54 %
	6000	37,83 %	28,57 %	26,25 %	28,57 %

Tabela 6.2: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Copenhagen simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (Grade 1 - $K_z$ Degrazia)	0,03	0,05	-0,04	0,87	1,0
S-L (Grade 1 - $K_z$ Ulke)	0,16	0,07	0,19	0,87	1,0
S-L (Grade 2 - $K_z$ Degrazia)	0,10	0,06	0,19	0,87	1,0
S-L (Grade 2 - $K_z$ Ulke)	0,16	0,08	0,23	0,86	1,0

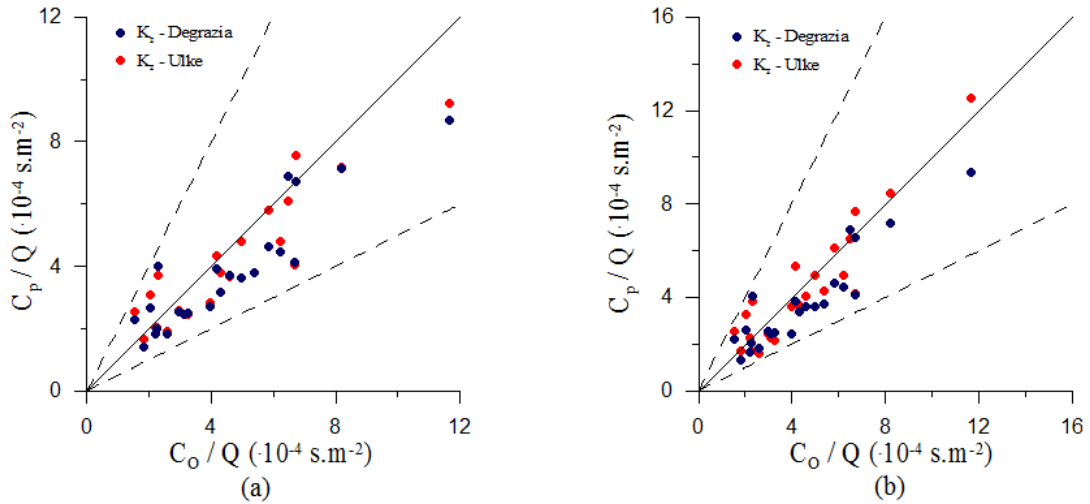


Figura 6.1: Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Copenhague ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* [52] (azul) e Ulke [53] (vermelho) para diferentes espaçamentos de grade. O diagrama (a) refere-se a Grade 1 e o diagrama (b) refere-se a Grade 2. As linhas tracejadas indicam o fator de 2.

Analisando os resultados, verificamos que para os espaçamentos de grade utilizados, os resultados são satisfatórios. Todos os índices estatísticos estão dentro do limite de tolerância definidos por Chang e Hanna [63]. Mais especificamente, o modelo subestima levemente o campo de concentração observado ( $F_b > 0$ ), apresenta uma correlação razoável ( $Cor = 0,87$ ) e pequenos desvios entre as concentrações observadas e previstas ( $Nmse = 0,05$ ). Como já era esperado, a implementação de grades mais refinadas apresenta melhor concordância entre os resultados observados e previstos. É importante salientar que considerando por exemplo, o experimento 6 de Copenhague, para as grades 1 e 2, temos os números de Courant, respectivamente, iguais a  $Courant_1 = 1,27$  e  $Courant_2 = 2,52$ , o que caracterizaria instabilidade numérica se o termo advectivo fosse tratado na abordagem Euleriana.

Considerando as diferentes parametrizações de  $K_z$ , verifica-se uma variação muito pequena entre as soluções obtidas. Todos os índices estatísticos estão dentro do limite de tolerância e, para ambas as parametrizações, o modelo mantém a mesma tendência de subestimar os valores de concentração. Observa-se também que as soluções obtidas com a parametrização proposta por Degrazia *et al.* [52] apresentaram erros menores do que as obtidas com a formulação proposta por Ulke [53], visto que os valores dos índices estatísticos estão mais próximos dos valores desejados.

Observa-se pelo diagrama de dispersão da Figura 6.1 que o modelo apresenta um bom desempenho, pois os resultados para ambas as grades e diferentes formulações de  $K_z$  estão próximos da reta bissetriz e entre as linhas tracejadas que indicam o Fator de Dois.

A seção reta vertical de distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), simuladas pelo modelo Semi-Lagrangiano, utilizando-se a formulação para  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], para o experimento mais instável (experimento 1 de Copenhagen) pode ser visualizada na Figura 6.2. A Figura 6.3 ilustra a seção reta vertical de distribuição das concentrações integradas e normalizadas para condição mais próxima da neutralidade (experimento 5 de Copenhagen).

Para os mesmos experimentos, as Figuras 6.4 e 6.5 apresentam a evolução temporal da concentração na superfície.

Ambos os experimentos apresentam a mesma taxa de emissão e, pela análise das figuras, verificamos que para a condição de instabilidade atmosférica, os maiores valores de concentração encontram-se mais próximos da fonte do que para condições de neutralidade, o que já era esperado devido a forte mistura de propriedades presente em situações mais convectivas. Nota-se um comportamento típico de uma pluma de poluentes nas condições atmosféricas descritas, concordando com os experimentos de laboratório de Willis e Dear-dorff [49, 50].

Para verificar se o período de média era representativo do processo estacionário, foi realizado o procedimento descrito no início da seção 6.1. No caso do experimento 1 as médias foram calculadas a partir do instante  $t = 2400\text{s}$ , e no experimento 5 a partir do instante  $t = 1900\text{s}$ . O maior valor do erro relativo das médias calculadas nos subperíodos sucessivos de tempo, para o experimento de Copenhagen, foi de 0,00043%.

As Figuras 6.6 e 6.8 ilustram a evolução temporal da concentração integrada normalizada para os 9 pontos escolhidos ( $x = 500\text{ m}$ ,  $x = 3000\text{ m}$ ,  $x = 6000\text{ m}$ ,  $z = z_0$ ,  $z = z_i/2$  e  $z = z_i$ ) para os experimentos 1 e 5 de Copenhagen, respectivamente, e as Figuras 6.7 e 6.9 apresentam a evolução temporal da concentração média no domínio. A análise destas figuras sugere que o processo de integração numérica da equação (4.4), utilizando o esquema Semi-Lagrangiano para a discretização do termo advectivo, é estável.

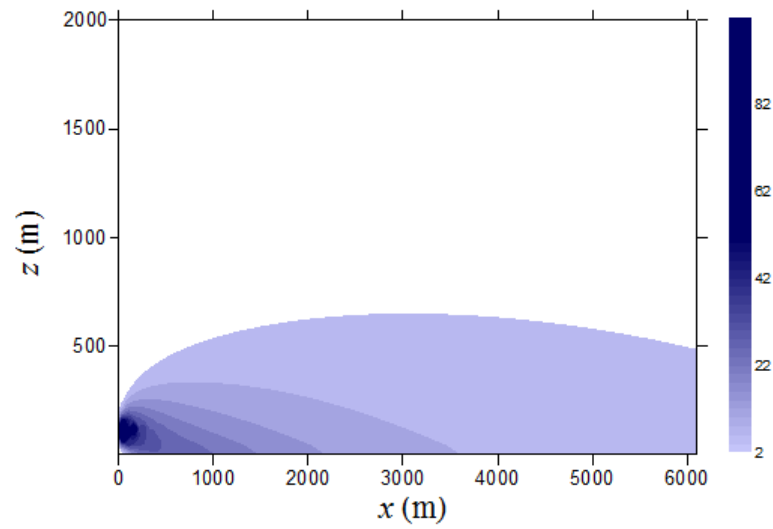


Figura 6.2: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 1 de Copenhagen.

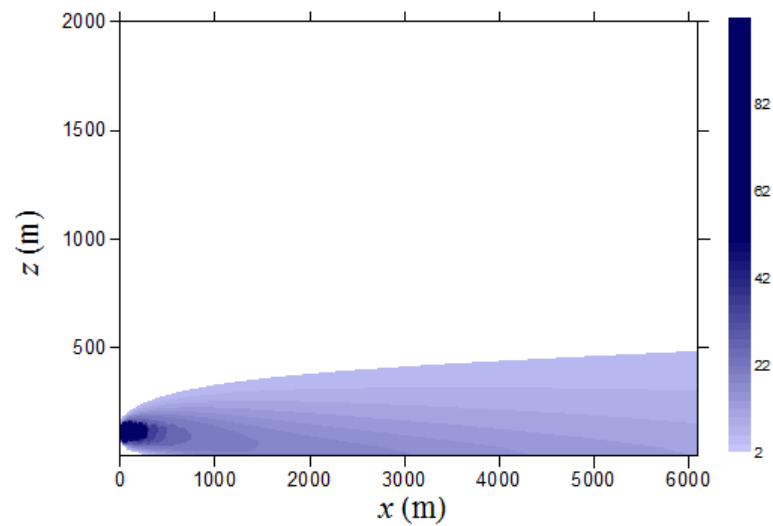


Figura 6.3: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 5 de Copenhagen.

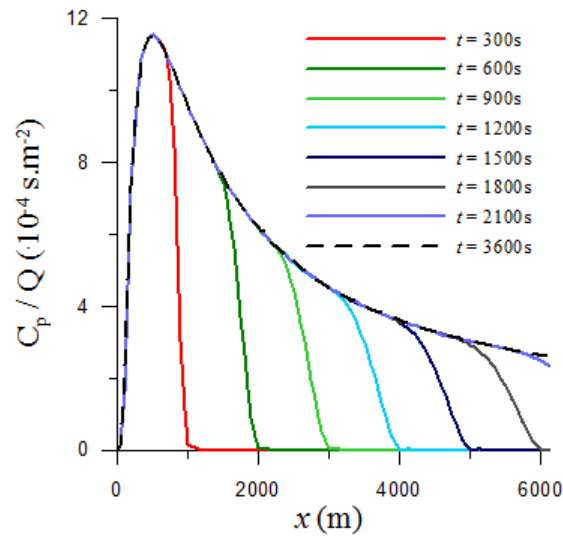


Figura 6.4: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 1 de Copenhague.

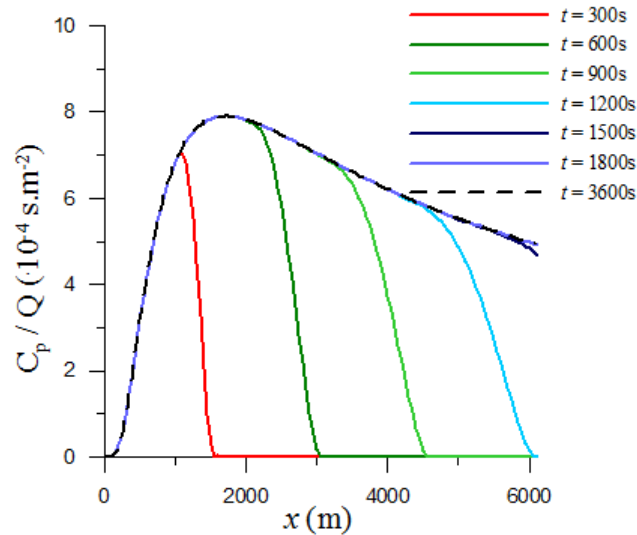


Figura 6.5: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 5 de Copenhague.

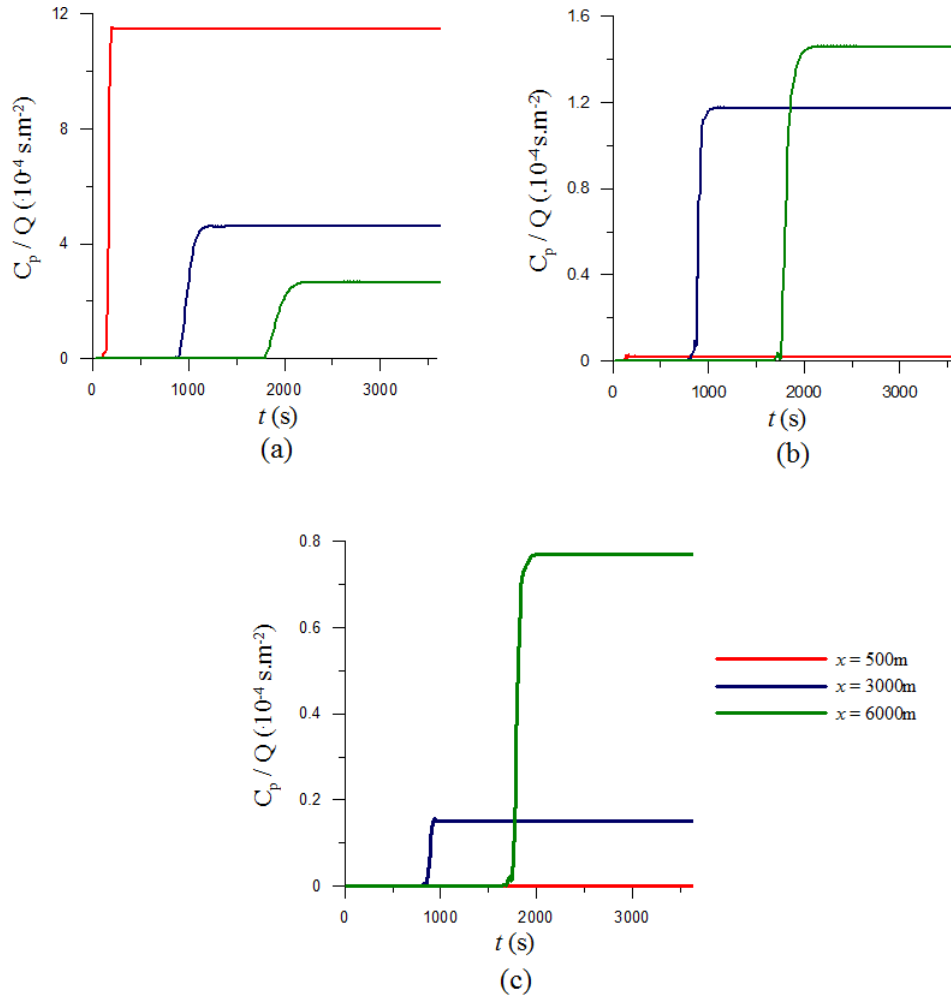


Figura 6.6: Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 1 de Copenhagen. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível  $z_i/2$  e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível  $z_i$ .

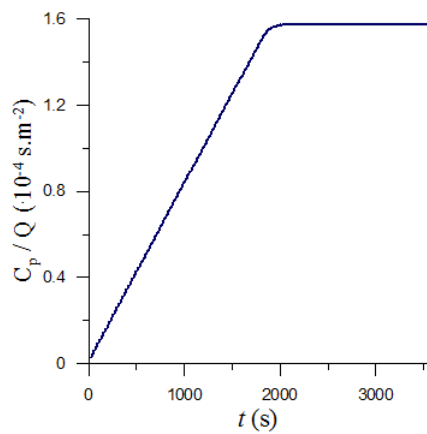


Figura 6.7: Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 1 de Copenhagen.

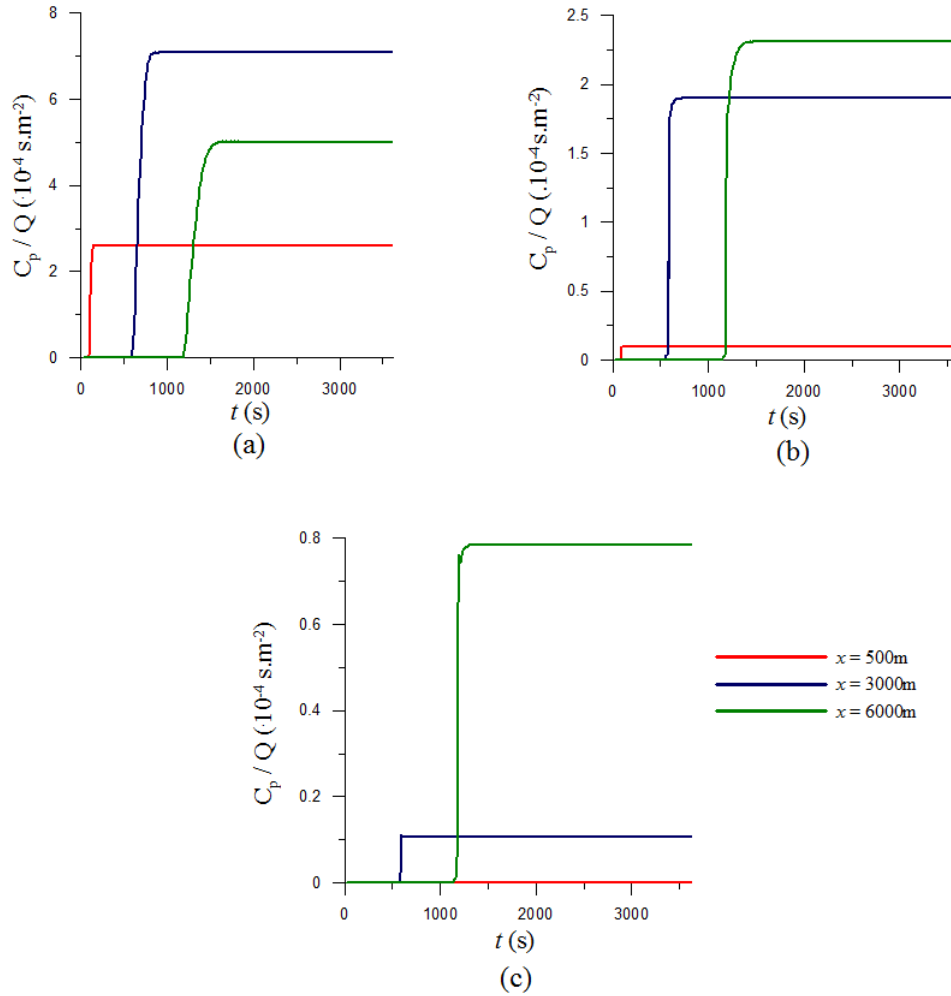


Figura 6.8: Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 5 de Copenhagen. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível  $z_i/2$  e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível  $z_i$ .

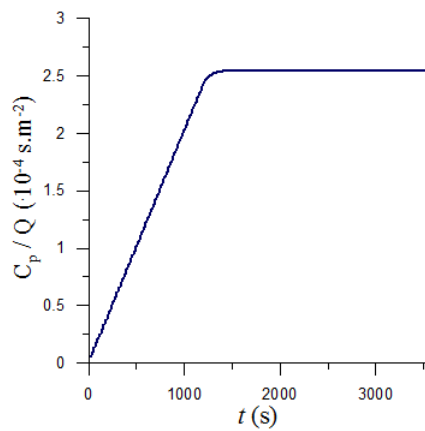


Figura 6.9: Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 5 de Copenhagen.



### 6.1.2 Resultados - Experimento Cabauw

Para as simulações do experimento Cabauw com o modelo Semi-Lagrangiano, também consideramos  $W = 0$ . O domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores (4400 m) e o domínio vertical foi fixado igual a altura da CLA,  $z_i$ . Para este experimento também foi avaliada a influência do espaçamento de grade nos resultados obtidos. Simulações com duas grades diferentes foram realizadas. A Grade 1 com espaçamento horizontal  $\Delta x = 10$  m e espaçamento vertical definido por  $v = 2$  m e  $\iota = 30$  m, e a Grade 2 com espaçamento horizontal  $\Delta x = 10$  m e espaçamento vertical definido por  $v = 5$  m e  $\iota = 40$  m. As condições de contorno e os parâmetros micrometeorológicos foram mantidos constantes no decorrer do tempo (ver Tabela 5.4).

Para cada uma das grades foram conduzidas simulações utilizando-se diferentes parametrizações para a difusividade turbulenta vertical, para condições atmosféricas estáveis e instáveis. As formulações utilizadas foram propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53], descritas no Capítulo 3.

A Tabela 6.3 apresenta os resultados das simulações. Os índices estatísticos calculados para comparar os dados observados e os previstos pelo modelo, para cada grade e cada parametrização, para ambas as condições de estabilidade, são apresentados na Tabela 6.4.

A Figura 6.10 ilustra os diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Cabauw ( $C_o$ ) pelos resultados das concentrações simuladas ( $C_p$ ), para as diferentes grades e diferentes formulações de  $K_z$ .

Analisando as Tabelas 6.3 e 6.4 e a Figura 6.10 verificamos que o modelo proposto também reproduziu satisfatoriamente os dados observados no experimento Cabauw para ambas as formulações de  $K_z$  e diferentes grades. Todos os índices estatísticos estão dentro do limite de tolerância estabelecidos por Chang e Hanna [63]. Para este experimento, o modelo superestimou os dados observados ( $F_b < 0$ ), o que em geral é melhor do que subestimar, visto que trata-se de um modelo para monitorar a qualidade do ar. Neste caso, também observa-se um melhor desempenho do modelo utilizando a formulação para o coeficiente de difusão turbulento proposto por Degrazia *et al.* [52] e para a grade mais refinada.

É importante salientar que os números de Courant calculados para os experimentos 4A e 9B de Cabauw para a grade 1, são dados, respectivamente, por  $Courant_{4A} = 2,08$  e  $Courant_{9B} = 3,28$ .

Tabela 6.3: Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano para o experimento Cabauw, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Exp.	Dist.	Grade 1		Grade 2	
		ER $C_p/Q$ (Degrazia)	ER $C_p/Q$ (Ulke)	ER $C_p/Q$ (Degrazia)	ER $C_p/Q$ (Ulke)
1A	3150	46,68 %	51,91 %	43,86 %	50,10 %
1B	3160	12,77 %	8,81 %	15,85 %	11,45 %
2A	3400	5,52 %	0,0 %	15,66 %	5,99 %
2B	3310	26,20 %	37,93 %	44,82 %	48,27 %
3A	3160	14,34 %	7,45 %	0,38 %	9,94 %
3B	3160	1,47 %	2,70 %	7,86 %	8,10 %
4A	3150	50,0 %	95,83 %	83,33 %	91,66 %
4B	3160	32,65 %	81,63 %	36,73 %	57,14 %
5A	3880	16,91 %	4,77 %	23,52 %	1,83 %
5B	3400	24,49 %	32,48 %	29,94 %	41,37 %
6A	3280	18,55 %	5,89 %	22,53 %	6,62 %
6B	3310	43,14 %	44,68 %	52,38 %	55,00 %
7A	3160	13,36 %	7,83 %	14,74 %	9,67 %
8A	4100	45,33 %	39,40 %	58,47 %	48,72 %
8B	4300	129,60 %	117,76%	149,34%	132,23%
9A	4250	15,61 %	17,47 %	15,61 %	17,47 %
9B	4300	2,86 %	4,50 %	3,27 %	4,91 %
10A	3250	12,23 %	66,90 %	10,07 %	76,97 %
10B	3480	53,14 %	12,20 %	41,73 %	7,48 %
13A	3160	89,52 %	93,16 %	104,52%	115,52%
13B	3160	8,90 %	15,96 %	15,16 %	24,69 %
14A	4200	22,13 %	34,52 %	18,57 %	27,95 %
14B	3950	4,38 %	22,48 %	5,21 %	23,12 %
15A	3110	36,20 %	16,96 %	38,10 %	16,07 %
15B	3200	128,32 %	100,0 %	128,61%	99,13 %

Como o experimento Cabauw foi realizado em condições atmosféricas instáveis e estáveis, uma análise estatística foi feita para os resultados das simulações para cada condição de estabilidade atmosférica, separadamente. As Tabelas 6.5 e 6.6 apresentam os resultados destas análises.

Analisando as Tabelas 6.5 e 6.6, percebe-se que as soluções para condições de estabilidade e instabilidade atmosférica são bastante diferentes. Os índices estatísticos calculados para os dados da condição instável são próximos aos valores obtidos no experimento Copenhagen. No entanto, para a formulação de  $K_z$  proposta por Degrazia o valor de  $F_b$  é negativo, indicando superestimativa dos valores observados, enquanto que, para a for-

Tabela 6.4: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw simulados pelo modelo Semi-Lagrangiano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (Grade 1 - $K_z$ Degrazia)	-0,16	0,23	-0,30	0,86	0,87
S-L (Grade 1 - $K_z$ Ulke)	-0,12	0,24	-0,24	0,83	0,84
S-L (Grade 2 - $K_z$ Degrazia)	-0,21	0,27	-0,34	0,86	0,83
S-L (Grade 2 - $K_z$ Ulke)	-0,18	0,31	-0,32	0,82	0,80

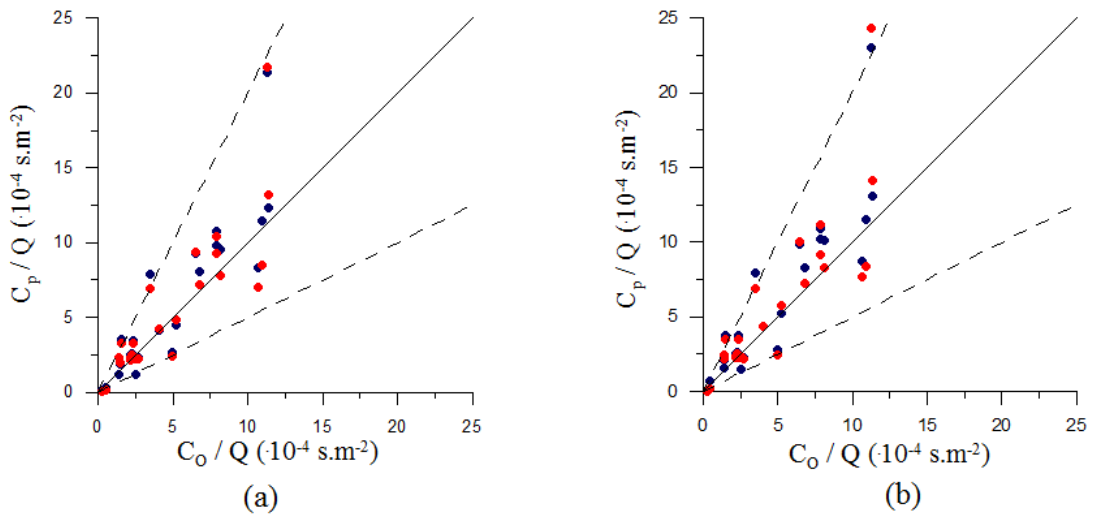


Figura 6.10: Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Cabauw ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* [52] (azul) e Ulke [53] (vermelho) para diferentes espaçamentos de grade. O diagrama (a) refere-se a Grade 1 e o diagrama (b) refere-se a Grade 2. As linhas tracejadas indicam o fator de 2.

mulação de  $K_z$  proposta por Ulke o valor de  $F_b$  é positivo, indicando subestimativa dos valores observados.

Tabela 6.5: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw (atmosfera instável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangiano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (Grade 1 - $K_z$ Degrazia)	-0,08	0,13	-0,10	0,82	0,84
S-L (Grade 1 - $K_z$ Ulke)	0,03	0,11	0,18	0,81	0,89
S-L (Grade 2 - $K_z$ Degrazia)	-0,12	0,13	-0,11	0,83	0,89
S-L (Grade 2 - $K_z$ Ulke)	-0,04	0,11	0,16	0,82	0,89

Tabela 6.6: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw (atmosfera estável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Modelo	$F_b$	$Nm_{se}$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (Grade 1 - $K_z$ Degrazia)	-0,33	0,33	-0,44	0,77	1,0
S-L (Grade 1 - $K_z$ Ulke)	-0,35	0,37	-0,48	0,78	0,67
S-L (Grade 2 - $K_z$ Degrazia)	-0,39	0,42	-0,50	0,77	0,65
S-L (Grade 2 - $K_z$ Ulke)	-0,35	0,34	-0,48	0,78	0,67

A qualidade dos resultados para a condição estável é bastante inferior a dos resultados para condição de instabilidade. Os valores dos índices  $F_b$  e  $F_s$  estão próximos ao limite máximo aceitável, mas são maiores que esses. Os demais índices estão dentro do limite de tolerância estabelecido por Chang e Hanna [63].

A partir da análise da Figura 6.11, que apresenta a distribuição das concentrações integradas e normalizadas obtidas utilizando-se a formulação para  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], para a condição de estabilidade atmosférica (experimento 4A de Cabauw), verifica-se que o comportamento da pluma é, praticamente, horizontal durante todo o seu percurso ao longo de  $x$ . Este perfil é típico de uma pluma de contaminantes dispersos em uma camada limite estável.

A Figura 6.12 ilustra a seção reta vertical de distribuição das concentrações integradas e normalizadas, obtidas utilizando-se a formulação para  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], para a condição de instabilidade atmosférica (experimento 9B de Cabauw). A figura mostra uma boa concordância com o comportamento de uma pluma dispersa em condições de instabilidade.

Para os mesmos experimentos, as Figuras 6.13 e 6.14 apresentam a evolução temporal do perfil de concentração na superfície. O mesmo procedimento descrito na seção anterior foi adotado para verificar se o período de média é representativo do processo estacionário. No caso dos experimentos de Cabauw o maior valor do erro relativo calculado para as médias de concentração nos subperíodos  $T_1$  e  $T_2$  foi de 0,00122%.

As Figuras 6.15 e 6.17 ilustram a evolução temporal da concentração integrada normalizada para os 9 pontos escolhidos ( $x = 500$  m,  $x = 2000$  m,  $x = 4000$  m,  $z = z_0$ ,  $z = z_i/2$  e  $z = z_i$ ), para os experimentos 4A e 9B de Cabauw, respectivamente, e as Figuras 6.16 e 6.18 apresentam a evolução temporal da concentração média no domínio para os mesmos experimentos, respectivamente. Da mesma forma que nas simulações anteriores, verifica-se, analisando as figuras, que o processo de integração numérica da equação (4.4) é estável.

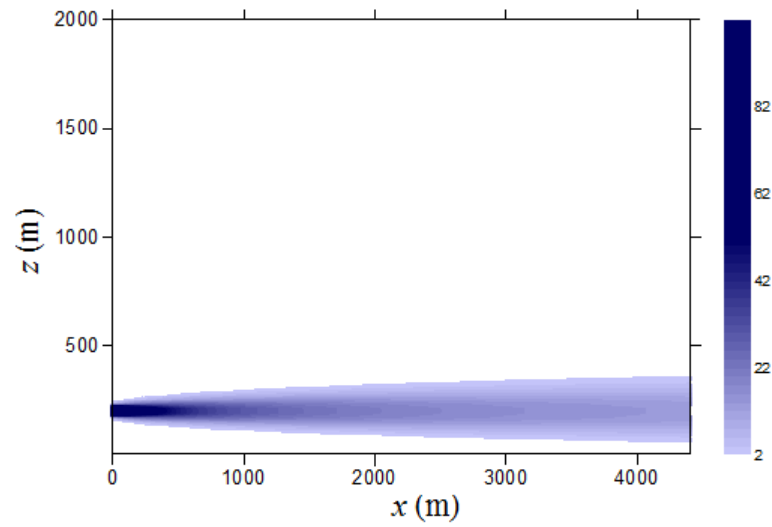


Figura 6.11: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 4A de Cabauw.

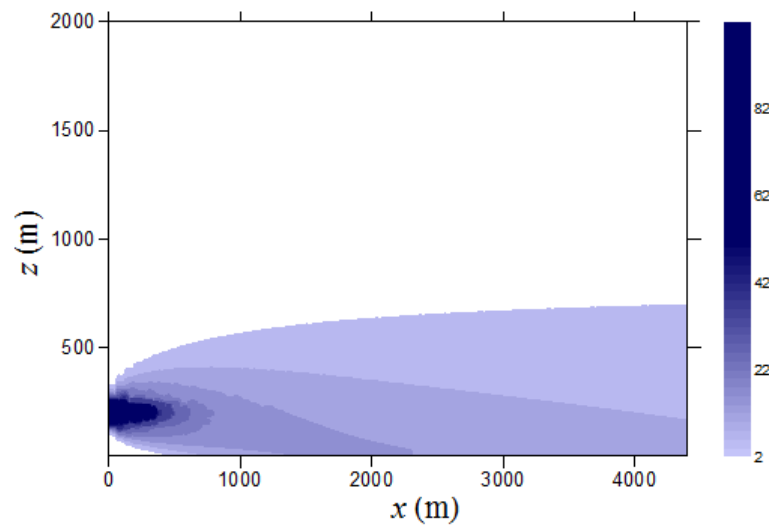


Figura 6.12: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 9B de Cabauw.

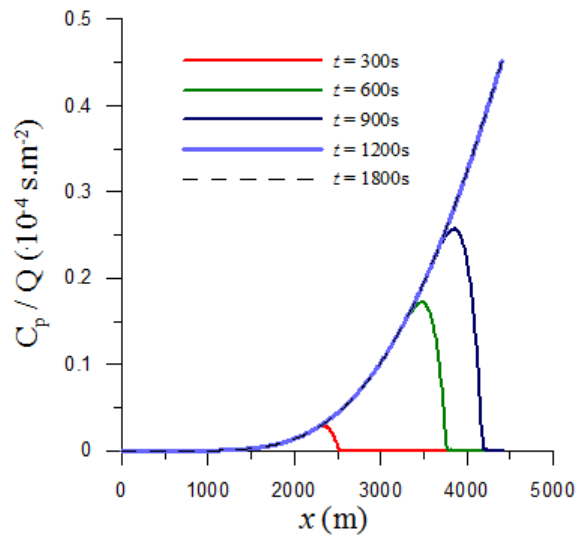


Figura 6.13: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 4A de Cabauw.

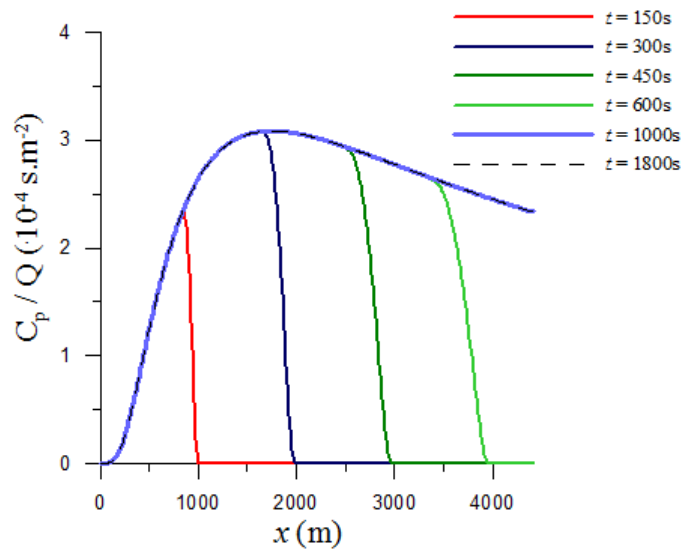


Figura 6.14: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 9B de Cabauw.

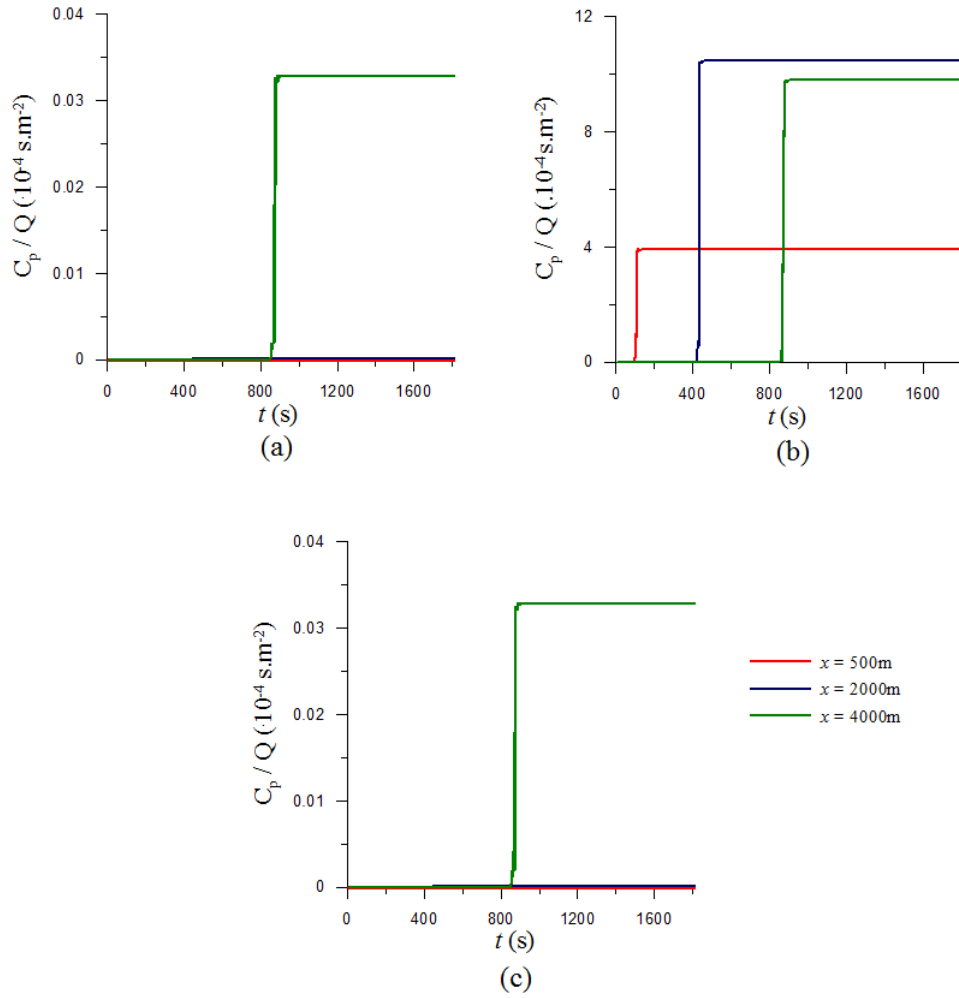


Figura 6.15: Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 4A de Cabauw. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível  $z_i/2$  e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível  $z_i$ .

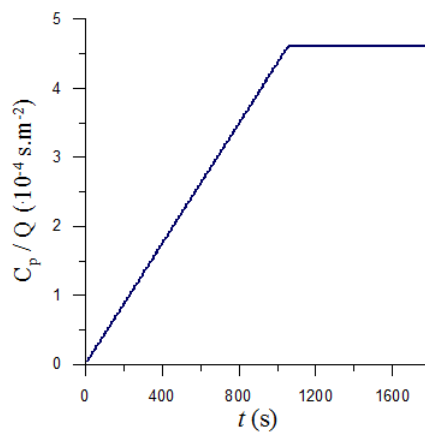


Figura 6.16: Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 4A de Cabauw.

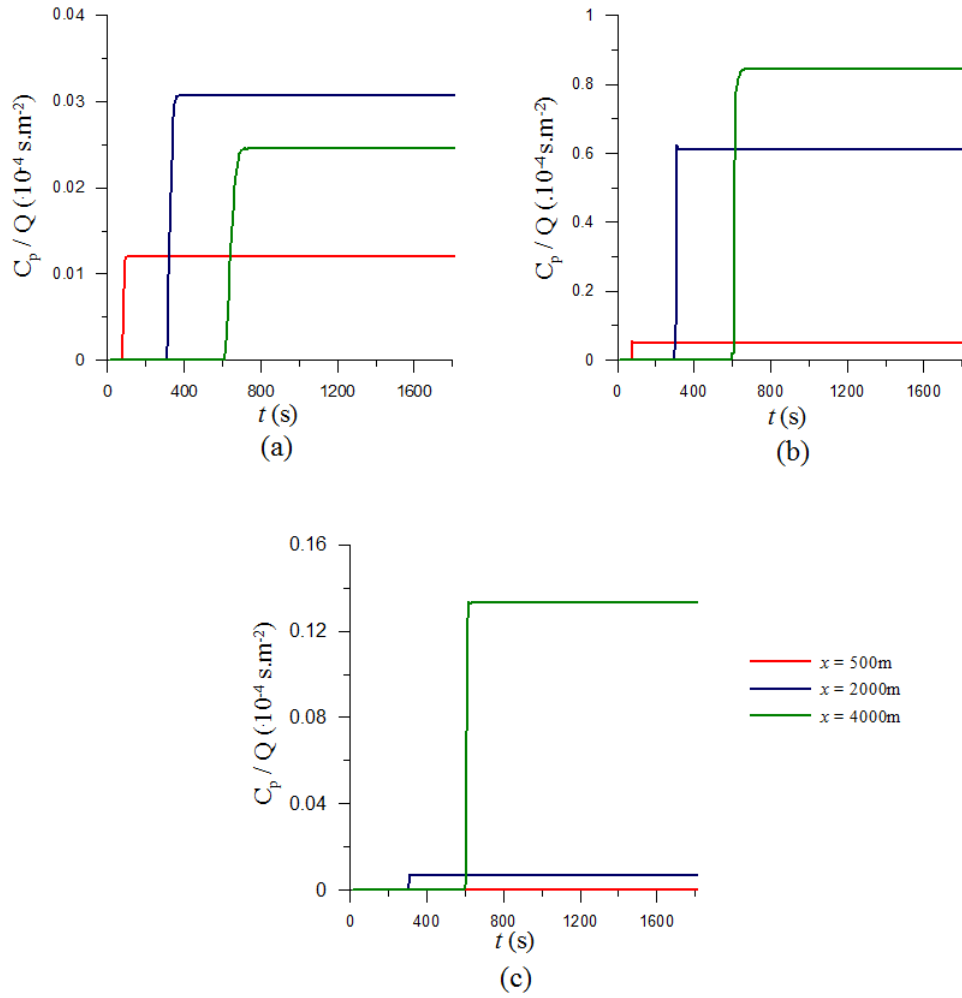


Figura 6.17: Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 9B de Cabauw. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível  $z_i/2$  e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível  $z_i$ .

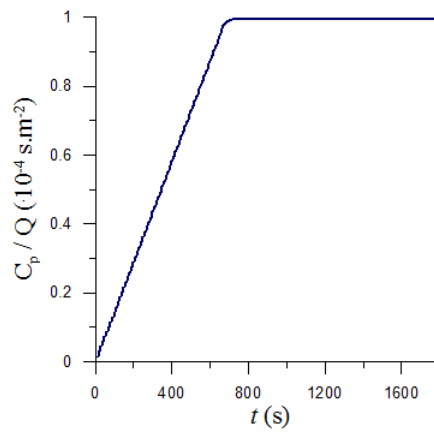


Figura 6.18: Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 9B de Cabauw.



### 6.1.3 Resultados - Experimento Hanford

Para as simulações do experimento Hanford com o modelo Semi-Lagrangeano, também consideramos  $W = 0$ . O domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores (3200 m) e o domínio vertical foi fixado igual a altura da CLA,  $z_i$ . O passo no tempo foi mantido constante e obtido de modo que a condição estabelecida pela equação (2.17) fosse satisfeita. Como Hanford é um experimento de fonte baixa ( $H_s = 2$  m) e, foi conduzido em condições de estabilidade atmosférica com altura da CLA de no máximo 325 m, para as simulações deste experimento foram utilizadas grades mais refinadas na direção vertical. A Grade 1 com espaçamento horizontal  $\Delta x = 25$  m e espaçamento vertical definido por  $v = 1$  m e  $\iota = 5$  m, e a Grade 2 com espaçamento horizontal  $\Delta x = 25$  m e espaçamento vertical definido por  $v = 2$  m e  $\iota = 10$  m. As condições de contorno e os parâmetros micrometeorológicos foram mantidos constantes no decorrer do tempo (ver Tabela 5.5).

Neste caso, também foram conduzidas simulações utilizando-se diferentes parametrizações para a difusividade turbulenta vertical, para cada grade. As formulações utilizadas, para condições atmosféricas estáveis, foram as propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53], descritas no Capítulo 3.

Os resultados de tais simulações são apresentados na Tabela 6.7 e os índices estatísticos calculados para comparar os dados observados e os previstos pelo modelo, para cada grade e cada parametrização são dados na Tabela 6.8.

A Figura 6.19 ilustra os diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Cabauw ( $C_o$ ) pelos resultados das concentrações simuladas ( $C_p$ ), para as diferentes grades e diferentes formulações de  $K_z$ .

Analisando as Tabelas 6.7 e 6.8 e a Figura 6.19 verificamos que para a grade mais refinada, os resultados obtidos foram melhores. A medida de erro quadrático médio normalizado ( $Nmse$ ) indica que para as simulações com a grade 2 ocorrem erros maiores nos valores de concentrações do que na utilização da grade 1. Para a implementação da formulação de  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], o modelo subestimou os valores de concentração observados ( $F_b > 0$ ) e apresentou apenas 10% dos valores previstos com erro absoluto superior a 100%, enquanto que, para  $K_z$  proposto por Ulke, o modelo superestimou levemente o campo de concentração ( $F_b < 0$ ) e apresentou 20% dos valores previstos com erro absoluto superior a 100%. Para a Grade 2, a tendência do modelo foi subestimar os dados de concentração para ambas as formulações de  $K_z$ .

Tabela 6.7: Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangiano para o experimento Hanford, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Exp.	Dist.	Grade 1		Grade 2	
		ER $C_p/Q$ (Degrazia)	ER $C_p/Q$ (Ulke)	ER $C_p/Q$ (Degrazia)	ER $C_p/Q$ (Ulke)
1	100	69,59 %	75,18 %	44,56 %	48,62 %
	200	72,31 %	80,28 %	55,44 %	60,94 %
	800	87,31 %	104,02%	78,71 %	92,70 %
	1600	90,32 %	113,13%	84,11 %	104,76%
	3200	86,15 %	114,84%	79,53 %	109,07%
2	100	6,17 %	16,14 %	9,75 %	1,30 %
	200	5,74 %	5,56 %	15,14 %	4,99 %
	800	2,32 %	20,98 %	4,37 %	14,18 %
	1600	9,04 %	10,60 %	16,22 %	5,79 %
	3200	27,03 %	8,33 %	34,63 %	11,59 %
3	100	87,52 %	99,20 %	59,93 %	69,85 %
	200	73,76 %	88,16 %	56,63 %	69,11 %
	800	94,41 %	121,82%	84,14 %	109,67%
	1600	110,48%	147,43%	99,45 %	137,28%
	3200	141,45%	193,35%	124,74%	183,96%
4	100	19,94 %	11,22 %	32,08 %	24,80 %
	200	4,43 %	8,61 %	14,01 %	2,03 %
	800	9,72 %	8,07 %	16,34 %	2,81 %
	1600	12,19 %	8,12 %	19,77 %	4,67 %
	3200	19,11 %	3,14 %	27,22 %	0,93 %
5	100	35,89 %	31,00 %	45,39 %	41,21 %
	200	20,99 %	13,11 %	28,81 %	21,84 %
	800	19,10 %	38,2 %	12,03 %	30,33 %
	1600	10,37 %	7,06 %	16,42 %	2,09 %
	3200	26,77 %	9,54 %	33,26 %	13,22 %
6	100	47,97 %	44,47 %	55,67 %	52,70 %
	200	53,31 %	49,15 %	57,93 %	54,37 %
	800	21,97 %	10,26 %	26,09 %	15,28 %
	1600	3,30 %	22,40 %	2,11 %	17,21 %
	3200	27,04 %	55,43 %	18,16 %	50,25 %

Tabela 6.8: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Hanford simulados pelo modelo Semi-Lagrangiano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Modelo	$F_b$	$Nm_{se}$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (Grade 1 - $K_z$ Degrazia)	0,08	0,33	0,30	0,85	0,90
S-L (Grade 1 - $K_z$ Ulke)	-0,01	0,30	0,23	0,85	0,80
S-L (Grade 2 - $K_z$ Degrazia)	0,21	0,48	0,46	0,85	0,90
S-L (Grade 2 - $K_z$ Ulke)	0,10	0,41	0,39	0,85	0,76

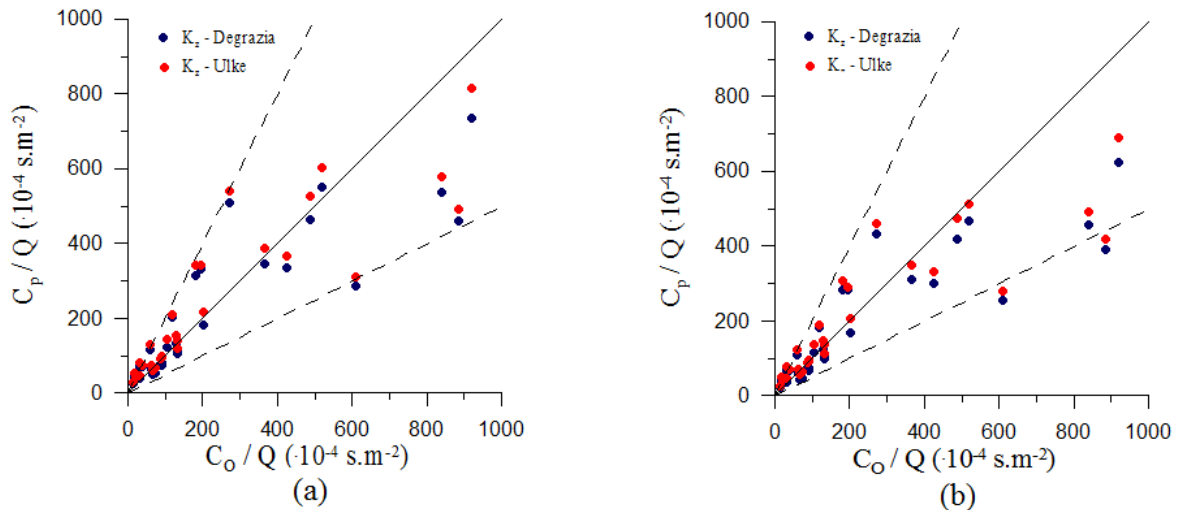


Figura 6.19: Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Hanford ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53] para diferentes espaçamentos de grade. O diagrama (a) refere-se a Grade 1 e o diagrama (b) refere-se a Grade 2. As linhas tracejadas indicam o fator de 2.

A Figura 6.20 apresenta a distribuição das concentrações integradas e normalizadas obtidas utilizando-se a formulação para  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], para o experimento 2 de Hanford. A evolução temporal do perfil de concentração na superfície, para o mesmo experimento, é apresentada na Figura 6.21.

Observa-se que o pico de concentração superficial ocorre na proximidade da fonte de emissão, o que era esperado, uma vez que trata-se de um experimento de fonte baixa. Além disso, nota-se que a pluma apresenta um perfil típico de contaminantes dispersos em uma CLE, com a pluma limitada nos primeiros 50 m da CLA.

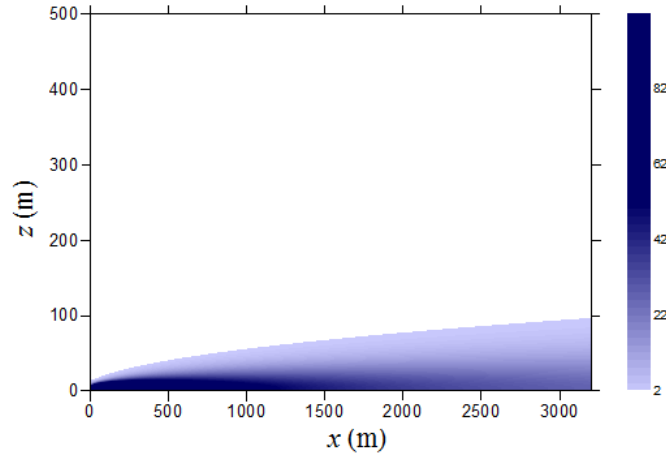


Figura 6.20: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 2 de Hanford.

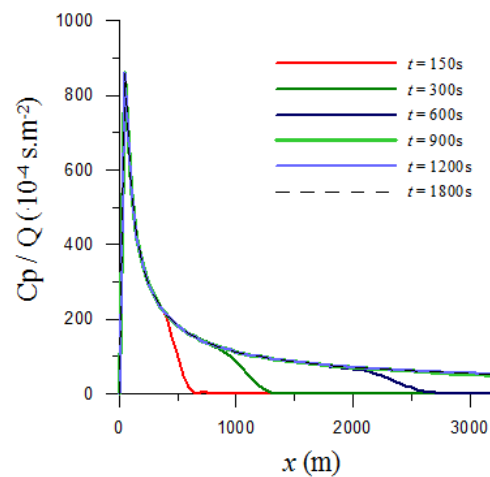


Figura 6.21: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 2 de Hanford.

No caso dos experimentos de Hanford, o maior valor do erro relativo calculado para as médias de concentração nos subperíodos  $T_1$  e  $T_2$  foi de 0,000231%.

A Figura 6.22 ilustra a evolução temporal da concentração integrada e normalizada para os 9 pontos escolhidos ( $x = 300$  m,  $x = 1500$  m,  $x = 3000$  m,  $z = z_0$ ,  $z = z_i/2$  e  $z = z_i$ ), para o experimento 2 de Hanford e a Figura 6.23 apresenta a evolução temporal da concentração média no domínio para o mesmo experimento. Nota-se um pequeno ruído na solução até que o regime estacionário seja atingido. Isto se deve, provavelmente, ao problema de representar a condição de contorno de entrada do contaminante, neste caso a função Delta de Dirac. Da mesma forma que nas simulações anteriores, verifica-se, analisando as figuras, que o processo de integração numérica da equação (4.4) é estável.

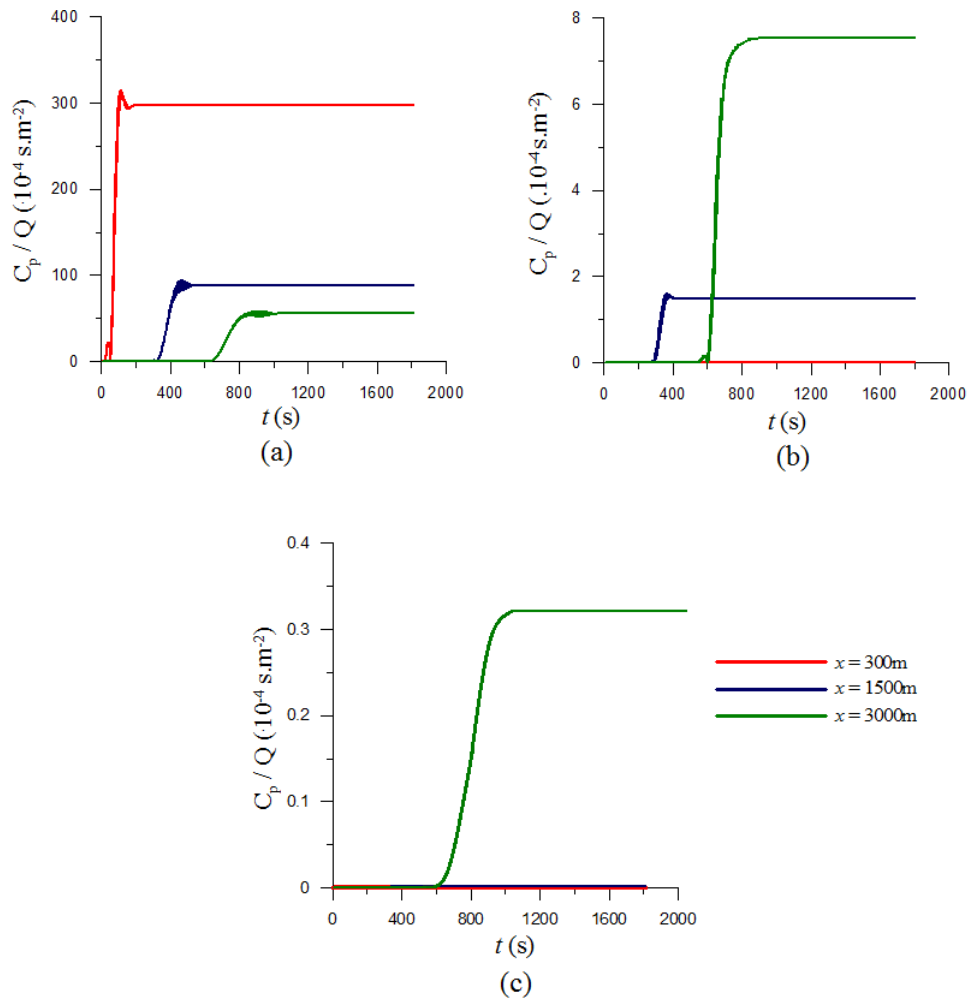


Figura 6.22: Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 2 de Hanford. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível  $z_i/2$  e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível  $z_i$ .

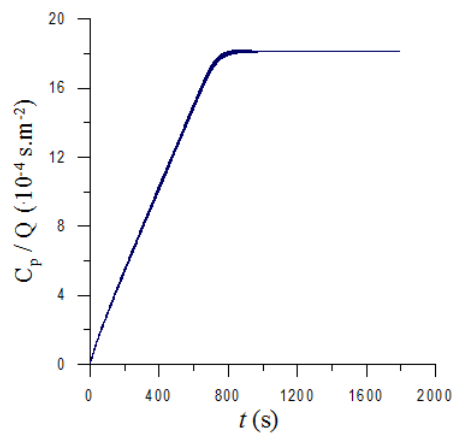


Figura 6.23: Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 2 de Hanford.

### 6.1.4 Resultados - Experimento Prairie Grass

Para as simulações do experimento Prairie Grass com o modelo Semi-Lagrangeano,  $W$  foi considerado zero. O domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores (800 m) e o domínio vertical foi fixado igual a altura da CLA,  $z_i$ . O passo no tempo foi mantido constante e obtido de modo que a condição estabelecida pela equação (2.17) fosse satisfeita. A estrutura horizontal da grade foi definida por  $\Delta x = 10$  m e a estrutura vertical por  $v = 0,5$  m e  $\iota = 20$  m. As condições de contorno e os parâmetros micrometeorológicos foram mantidos constantes no decorrer do tempo (ver Tabelas 5.6 e 5.7).

Foram conduzidas simulações utilizando-se as formulações para a difusividade turbulenta vertical propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53], para as condições atmosféricas de instabilidade e estabilidade, descritas no Capítulo 3.

As Tabelas 6.9 e 6.10 apresentam resultados de tais simulações para os experimentos instáveis e estáveis de Prairie Grass, respectivamente. Os índices estatísticos calculados para comparar todos os dados observados do experimento e os previstos pelo modelo, para cada parametrização de  $K_z$ , são apresentados na Tabela 6.11.

A Figura 6.24 ilustra os diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass ( $C_o$ ) pelos resultados das concentrações simuladas ( $C_p$ ), comparando as diferenças entre as previsões para as diferentes formulações de  $K_z$ .

Analisando as Tabelas 6.9 e 6.10 e a Figura 6.24, verifica-se que o modelo Semi-Lagrangeano apresentou resultados muito bons. Também para este experimento as simulações utilizando-se a implementação da formulação de  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52] apresentou resultados melhores do que a formulação proposta por Ulke [53]. A medida do erro quadrático médio normalizado ( $Nmse$ ) indica que para a formulação de  $K_z$  proposta por Ulke o modelo erra mais as concentrações simuladas do que para a formulação de Degrazia *et al.* [52]. Observa-se nos resultados obtidos, que o modelo tende a superestimar o campo de concentrações observado ( $F_b < 0$ ) e, embora alguns resultados simulados estejam fora dos intervalos aceitáveis, o coeficiente de correlação é alto (91%).

Tabela 6.9: Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangiano (S-L) para o experimento Prairie Grass (atmosfera instável). Erro relativo para os valores de concentração previstas pelo modelo S-L utilizando as formulações de  $K_z$  propostas por Degrazia *et al.* e Ulke, nas primeira e segunda linhas, respectivamente.

Exp.	ER C/Q (50m)	ER C/Q (100m)	ER C/Q (200m)	ER C/Q (400m)	ER C/Q (800m)
1	31,45 %	28,79 %	174,99 %	345,15 %	493,50 %
	25,78 %	43,27 %	216,34 %	420,97 %	573,40 %
2	12,48 %	38,31 %	177,59 %	592,75 %	420,09 %
	2,33 %	60,62 %	240,24 %	797,13 %	599,20 %
5	21,17 %	2,58 %	17,34 %	68,97 %	157,62 %
	21,92 %	1,20 %	16,07 %	72,34 %	174,19 %
6	18,70 %	1,04 %	28,65 %	80,78 %	104,90 %
	25,68 %	14,06 %	8,05 %	52,25 %	80,07 %
7	23,61 %	13,41 %	64,35 %	302,16 %	977,73 %
	23,61 %	17,58 %	79,94 %	370,46 %	1247,54 %
8	21,70 %	5,87 %	15,51 %	67,33 %	115,74 %
	24,49 %	8,38 %	16,41 %	78,28 %	145,31 %
9	24,51 %	10,90 %	8,62 %	43,70 %	111,22 %
	24,84 %	12,43 %	4,81 %	40,13 %	111,79 %
10	16,85 %	24,26 %	69,33 %	199,57 %	541,22 %
	18,29 %	24,56 %	76,66 %	229,92 %	646,15 %
11	18,00 %	2,95 %	6,49 %	38,18 %	95,36 %
	21,31 %	9,99 %	3,59 %	23,61 %	73,06 %
12	21,34 %	10,18 %	7,63 %	12,00 %	26,39 %
	21,15 %	10,21 %	6,19 %	17,08 %	35,30 %
15	31,66 %	11,78 %	23,35 %	143,06 %	351,16 %
	29,74 %	9,14 %	25,90 %	135,26 %	288,79 %
16	17,19 %	36,06 %	154,04 %	477,00 %	1587,04 %
	10,04 %	54,09 %	202,10 %	612,00 %	1974,09 %
19	24,25 %	0,47 %	48,22 %	148,73 %	449,04 %
	25,11 %	2,56 %	44,33 %	148,03 %	467,46 %
20	29,92 %	9,34 %	9,19 %	43,55 %	88,30 %
	35,06 %	16,75 %	1,75 %	38,84 %	91,83 %
25	31,86 %	16,55 %	118,39 %	179,44 %	494,85 %
	23,67 %	36,31 %	168,64 %	262,13 %	697,81 %
26	14,96 %	4,47 %	12,91 %	52,68 %	124,30 %
	18,30 %	7,80 %	11,78 %	58,23 %	146,04 %
27	23,38 %	11,11 %	2,64 %	25,19 %	50,90 %
	24,68 %	11,46 %	0,23 %	35,82 %	74,34 %
30	26,36 %	13,64 %	2,62 %	44,69 %	155,56 %
	30,52 %	18,55 %	0,93 %	46,56 %	176,35 %

Exp.	ER C/Q (50m)	ER C/Q (100m)	ER C/Q (200m)	ER C/Q (400m)	ER C/Q (800m)
31	14,41 %	1,63 %	4,27 %	16,65 %	19,62 %
	24,85 %	15,78 %	10,41 %	4,10 %	23,35 %
33	4,84 %	5,57 %	31,31 %	77,01 %	158,24 %
	13,92 %	6,13 %	17,44 %	63,25 %	149,85 %
34	15,95 %	0,18 %	11,62 %	39,34 %	64,69 %
	26,02 %	14,46 %	4,24 %	22,90 %	52,46 %
43	32,31 %	15,63 %	0,83 %	46,88 %	123,43 %
	30,68 %	11,67 %	9,34 %	66,39 %	162,78 %
44	28,68 %	12,81 %	2,32 %	22,48 %	82,35 %
	29,35 %	12,25 %	1,82 %	34,73 %	113,71 %
45	21,69 %	10,95 %	3,86 %	16,08 %	18,69 %
	31,72 %	24,63 %	18,81 %	0,92 %	8,71 %
47	28,28 %	3,92 %	61,35 %	132,73 %	474,65 %
	19,10 %	21,80 %	96,24 %	189,22 %	595,45 %
48	5,40 %	24,15 %	47,46 %	76,62 %	117,02 %
	3,54 %	11,96 %	33,80 %	64,58 %	109,43 %
49	25,39 %	14,28 %	2,11 %	29,56 %	80,39 %
	27,32 %	15,89 %	1,61 %	35,41 %	96,30 %
50	28,97 %	15,78 %	21,98 %	37,71 %	125,54 %
	29,78 %	15,64 %	25,95 %	48,85 %	156,21 %
51	30,27 %	14,31 %	15,58 %	56,53 %	215,12 %
	34,20 %	19,13 %	11,81 %	59,29 %	243,45 %
52	31,61 %	11,07 %	115,08 %	367,17 %	1406,28 %
	26,10 %	24,72 %	154,03 %	484,92 %	1888,00 %
57	8,97 %	31,76 %	24,52 %	46,28 %	74,85 %
	27,48 %	1,75 %	10,17 %	6,80 %	34,61 %
61	22,02 %	9,70 %	9,17 %	3,31 %	42,96 %
	26,06 %	14,60 %	12,74 %	2,49 %	46,97 %



Tabela 6.10: Erro relativo calculado para os valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte previstos pelo modelo Semi-Lagrangiano (S-L) para o experimento Prairie Grass (atmosfera instável). Erro relativo para os valores de concentração previstas pelo modelo S-L utilizando as formulações de  $K_z$  propostas por Degrazia *et al.* e Ulke, nas primeira e segunda linhas, respectivamente.

Exp.	ER C/Q (50m)	ER C/Q (100m)	ER C/Q (200m)	ER C/Q (400m)	ER C/Q (800m)
17	25,76 %	16,21 %	0,98 %	19,12 %	26,63 %
	22,65 %	11,28 %	8,85 %	31,31 %	43,45 %
18	16,17 %	12,95 %	7,38 %	4,07 %	10,14 %
	10,44 %	4,60 %	3,84 %	10,26 %	6,19 %
21	32,72 %	21,72 %	8,62 %	5,55 %	13,74 %
	31,81 %	20,16 %	5,96 %	10,08 %	20,89 %
22	26,55 %	13,13 %	1,84 %	23,45 %	61,94 %
	25,66 %	11,56 %	4,58 %	28,43 %	71,68 %
23	16,65 %	7,87 %	3,09 %	36,44 %	49,29 %
	15,68 %	6,29 %	5,69 %	41,56 %	57,60 %
24	14,13 %	0,89 %	13,41 %	24,35 %	53,69 %
	13,47 %	2,04 %	15,33 %	27,54 %	59,72 %
28	10,96 %	5,57 %	11,22 %	25,10 %	63,26 %
	3,66 %	5,52 %	27,53 %	46,96 %	96,81 %
29	30,35 %	23,71 %	14,50 %	7,92 %	6,30 %
	25,92 %	16,95 %	4,81 %	5,14 %	24,94 %
32	14,25 %	17,47 %	14,26 %	8,79 %	17,32 %
	24,62 %	4,73 %	4,82 %	15,39 %	6,77 %
35S	25,51 %	19,19 %	6,43 %	0,91 %	16,37 %
	22,72 %	14,92 %	0,20 %	10,48 %	30,94 %
35	59,95 %	18,70 %	25,55 %	37,84 %	199,08 %
	70,77 %	33,56 %	51,89 %	72,39 %	297,51 %
36	6,75 %	5,36 %	12,09 %	27,34 %	21,43 %
	16,72 %	9,22 %	35,95 %	59,00 %	54,80 %
37	7,51 %	0,14 %	16,75 %	31,87 %	33,63 %
	5,20 %	3,72 %	22,58 %	41,05 %	46,50 %
38	22,49 %	11,11 %	4,19 %	16,89 %	23,49 %
	20,62 %	8,02 %	9,23 %	24,78 %	35,00 %
39	44,82 %	86,39 %	126,61 %	190,49 %	909,85 %
	58,67 %	115,43 %	174,64 %	262,04 %	1185,65 %
40	54,81 %	93,42 %	144,14 %	332,62 %	170,85 %
	69,40 %	123,52 %	177,10 %	441,35 %	246,08 %
41	6,25 %	3,19 %	8,68 %	13,95 %	19,48 %
	0,59 %	4,95 %	20,43 %	29,46 %	39,69 %
42	20,33 %	7,16 %	5,42 %	22,77 %	29,09 %
	18,84 %	4,64 %	9,53 %	29,66 %	39,47 %

Exp.	ER C/Q (50m)	ER C/Q (100m)	ER C/Q (200m)	ER C/Q (400m)	ER C/Q (800m)
46	32,23 %	25,37 %	17,26 %	8,99 %	5,45 %
	30,92 %	23,28 %	13,95 %	3,78 %	14,03 %
53	29,87 %	24,80 %	46,80 %	62,68 %	75,25 %
	39,46 %	41,62 %	79,04 %	110,36 %	132,36 %
54	15,09 %	6,46 %	3,25 %	11,35 %	16,49 %
	10,67 %	0,32 %	13,03 %	24,93 %	34,52 %
55	21,85 %	8,88 %	4,13 %	36,20 %	48,28 %
	20,16 %	6,03 %	8,76 %	44,83 %	61,55 %
56	23,05 %	12,34 %	2,40 %	15,92 %	21,12 %
	20,90 %	8,86 %	8,04 %	24,77 %	33,77 %
58	6,77 %	16,02 %	11,49 %	9,11 %	15,53 %
	16,70 %	2,94 %	7,94 %	14,38 %	8,53 %
59	5,86 %	24,09 %	19,46 %	14,25 %	7,68 %
	3,09 %	13,15 %	4,72 %	3,94 %	14,59 %
60	11,12 %	1,82 %	4,89 %	23,79 %	26,13 %
	7,79 %	3,35 %	12,38 %	35,67 %	42,18 %
65	8,86 %	5,20 %	4,37 %	9,03 %	14,41 %
	4,26 %	1,45 %	14,02 %	22,10 %	31,95 %
66	9,95 %	12,67 %	9,56 %	7,15 %	2,27 %
	2,07 %	1,63 %	4,70 %	10,18 %	24,55 %
67	11,29 %	13,03 %	9,50 %	5,75 %	3,15 %
	8,86 %	9,63 %	4,60 %	1,30 %	6,76 %
68	14,14 %	21,43 %	15,74 %	14,97 %	21,01 %
	7,51 %	12,83 %	4,20 %	0,94 %	5,51 %

Tabela 6.11: Índices estatísticos calculados para todos os dados dos experimentos de Prairie Grass simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	-0,03	0,18	-0,07	0,93	0,86
S-L ( $K_z$ Ulke)	-0,12	0,31	-0,20	0,91	0,84

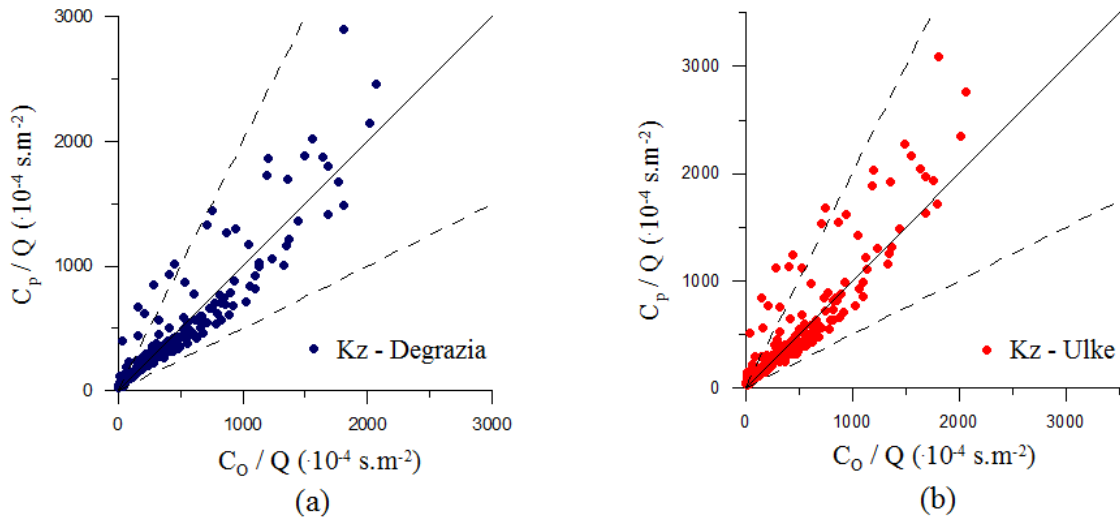


Figura 6.24: Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, para todas as condições de estabilidade, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2.

### Análise estatística para as diferentes condições de estabilidade

Como descrito anteriormente, o experimento de Prairie Grass foi realizado em condições atmosféricas instáveis e estáveis. Assim, a seguir é apresentada uma análise dos resultados das simulações para cada condição de estabilidade, separadamente.

#### Atmosfera Instável

A Tabela 6.12 fornece os índices estatísticos calculados para comparar os dados observados do experimento Prairie Grass e os previstos pelo modelo, para cada parametrização de  $K_z$ , para condições de instabilidade atmosférica.

A Figura 6.25 ilustra o diagrama de dispersão das concentrações observadas nos experimentos instáveis de Prairie Grass ( $C_o$ ) pelos resultados das concentrações simuladas ( $C_p$ ), comparando as diferenças entre as previsões para as diferentes formulações de  $K_z$ . A reta bissetriz (linha contínua) indica os valores de ( $C_o$ ) e ( $C_p$ ) iguais. Portanto, quanto mais próximos os pontos estiverem dessa reta, melhores os resultados. As linhas tracejadas indicam o Fator de 2. Valores dentro dessa faixa são considerados aceitáveis.

Analisando a Tabela 6.12 e a Figura 6.25, nota-se que os resultados obtidos para as duas formulações de  $K_z$ , em condições de instabilidade atmosférica, são bastante semelhantes. Para estes experimentos o modelo Semi-Lagrangiano tende a subestimar levemente as medidas de concentração, apresenta um coeficiente de correlação alto (94%) e os demais índices estatísticos estão dentro dos limites aceitáveis.

Tabela 6.12: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Prairie Grass (atmosfera instável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	0,03	0,14	0,31	0,96	0,77
S-L ( $K_z$ Ulke)	0,02	0,16	0,28	0,94	0,77

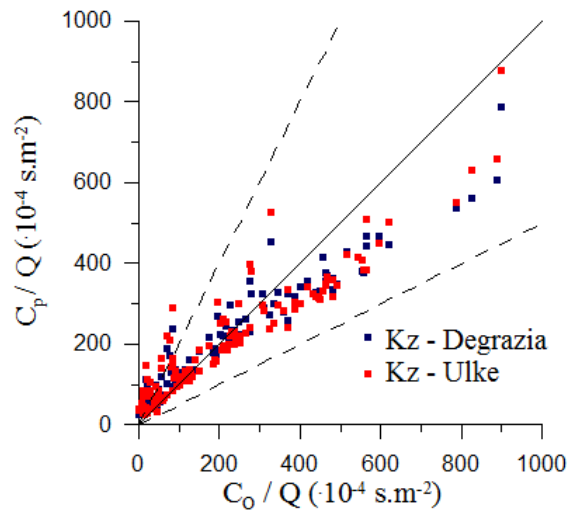


Figura 6.25: Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass ( $C_o$ ) para atmosfera instável, e previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2.

A Figura 6.26 apresenta a distribuição das concentrações integradas e normalizadas obtidas utilizando-se a formulação para  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], para o experimento 1 de Prairie Grass. A evolução temporal do perfil de concentração superficial, para o mesmo experimento, é apresentada na Figura 6.27.

Observa-se um pico de concentração acentuado na superfície, na área próxima à fonte. Isto já era esperado, pois o experimento de Prairie Grass, assim como o de Hanford, é um experimento de fonte baixa.

No caso dos experimentos instáveis de Prairie Grass o maior valor do erro relativo calculado para as médias de concentração nos subperíodos  $T_1$  e  $T_2$  foi de 0,000115%.

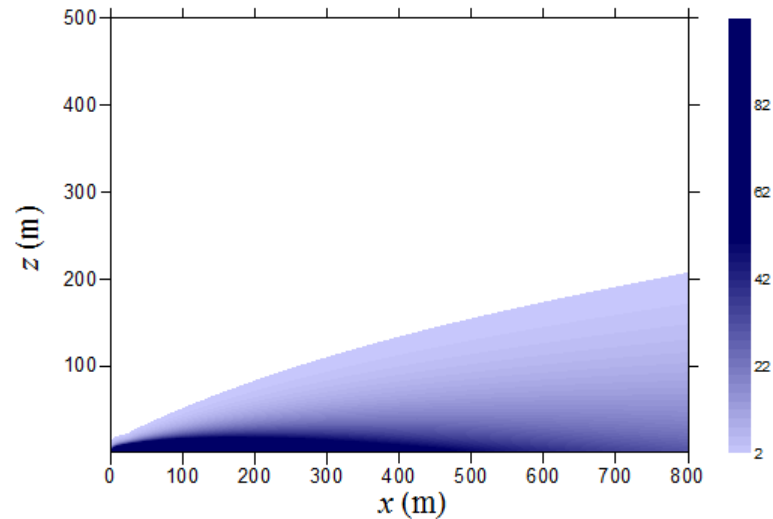


Figura 6.26: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 1 de Prairie Grass.

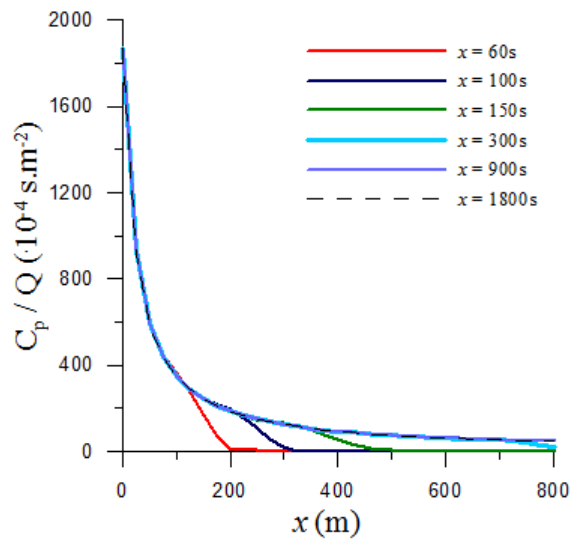


Figura 6.27: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 1 de Prairie Grass.

A Figura 6.28 ilustra a evolução temporal da concentração integrada e normalizada para os 9 pontos escolhidos ( $x = 50 \text{ m}$ ,  $x = 400 \text{ m}$ ,  $x = 800 \text{ m}$ ,  $z = z_0$ ,  $z = z_i/2$  e  $z = z_i$ ), para o experimento 1 de Prairie Grass e a Figura 6.29 apresenta a evolução temporal da concentração média no domínio para o mesmo experimento. Verifica-se analisando as figuras, que o processo de integração numérica da equação (4.4) é estável.

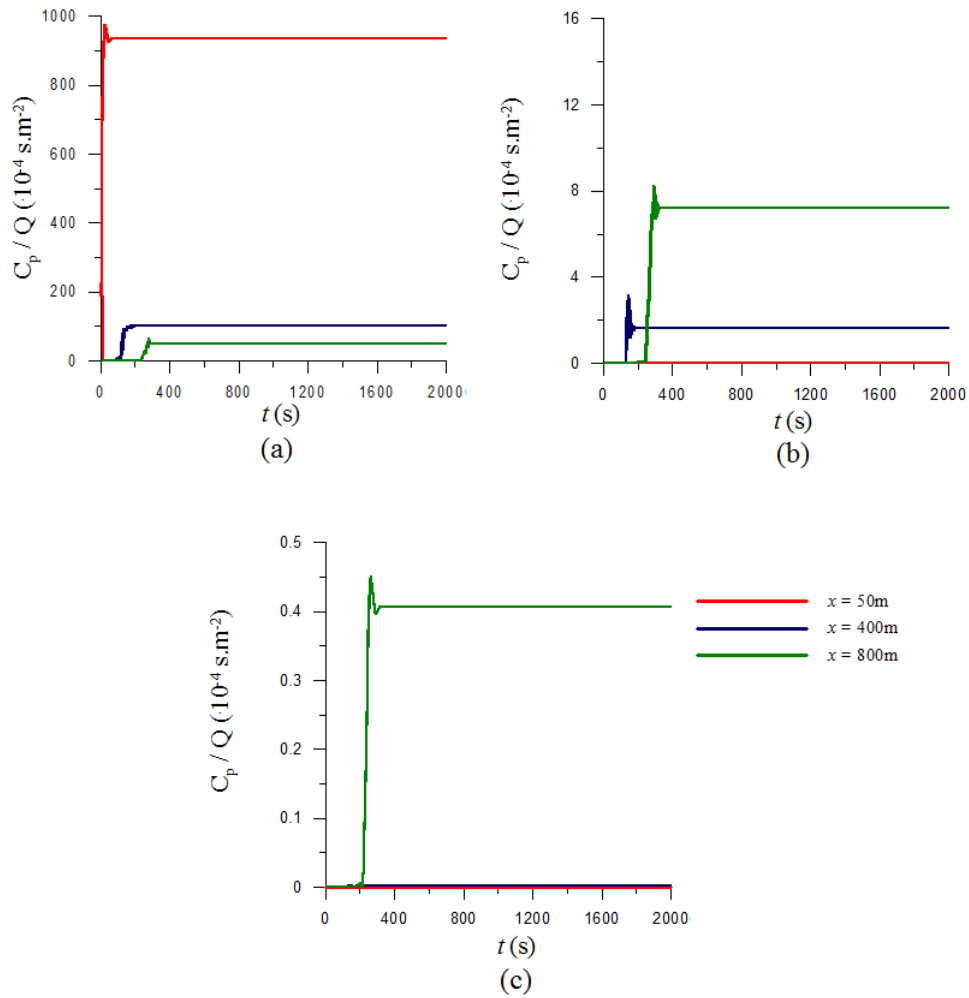


Figura 6.28: Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 1 de Prairie Grass. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível  $z_i/2$  e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível  $z_i$ .

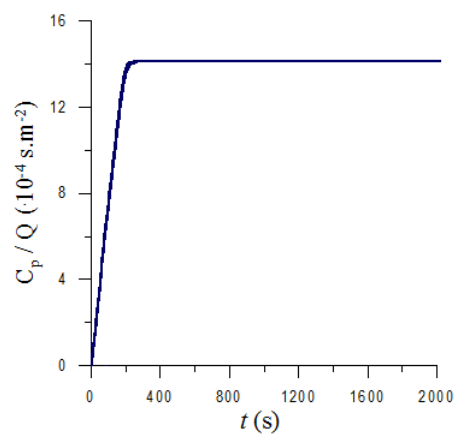


Figura 6.29: Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 1 de Prairie Grass.

## Atmosfera Estável

A Tabela 6.13 fornece os índices estatísticos calculados para comparar os dados observados nos experimentos estáveis de Prairie Grass e os previstos pelo modelo, para cada parametrização de  $K_z$ .

A Figura 6.30 ilustra o diagrama de dispersão das concentrações observadas nos experimentos estáveis de Prairie Grass ( $C_o$ ) pelos resultados das concentrações simuladas ( $C_p$ ), comparando as diferenças entre as previsões para as diferentes formulações de  $K_z$ . A reta bissetriz (linha contínua) indica os valores de ( $C_o$ ) e ( $C_p$ ) iguais. Portanto, quanto mais próximos os pontos estiverem dessa reta, melhores os resultados. As linhas tracejadas indicam o Fator de 2. Valores dentro dessa faixa são considerados aceitáveis.

Tabela 6.13: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Prairie Grass (atmosfera estável) simulados pelo modelo Semi-Lagrangiano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	-0,05	0,14	-0,11	0,91	0,95
S-L ( $K_z$ Ulke)	-0,17	0,26	-0,23	0,90	0,92

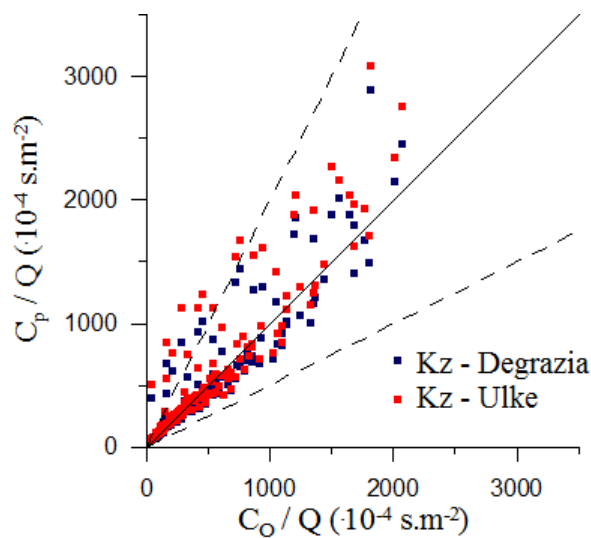


Figura 6.30: Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass ( $C_o$ ) para atmosfera estável, e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2.

Analisando a Tabela 6.13 e a Figura 6.30, observa-se que os resultados obtidos para as duas formulações de  $K_z$ , em condições de estabilidade atmosférica, são satisfatórios. Todos os índices estatísticos estão dentro dos limites estabelecidos por Chang e Hanna [63]. Além disso, observa-se que para os experimentos de Prairie Grass estáveis, o modelo Semi-Lagrangeano tende a superestimar as medidas de concentração, mantendo um alto coeficiente de correlação (90%).

A Figura 6.31 apresenta a distribuição das concentrações integradas e normalizadas obtidas utilizando-se a formulação para  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], para o experimento 17 de Prairie Grass. A evolução temporal do perfil de concentração superficial, para o mesmo experimento, é apresentada na Figura 6.32.

Também, neste caso, observa-se um pico de concentração acentuado na superfície, na área próxima à fonte. Nota-se que o comportamento da pluma é típico de uma pluma de contaminantes dispersa em uma camada limite estável.

No caso dos experimentos estáveis de Prairie Grass o maior valor do erro relativo calculado para as médias de concentração nos subperíodos  $T_1$  e  $T_2$  foi de 0,000275%.

A Figura 6.33 ilustra a evolução temporal da concentração integrada e normalizada para os 9 pontos escolhidos, para o experimento 1 de Prairie Grass e a Figura 6.34 apresenta a evolução temporal da concentração média no domínio para o mesmo experimento. Pelas figuras, observa-se, que o processo de integração numérica da equação (4.4) é estável.



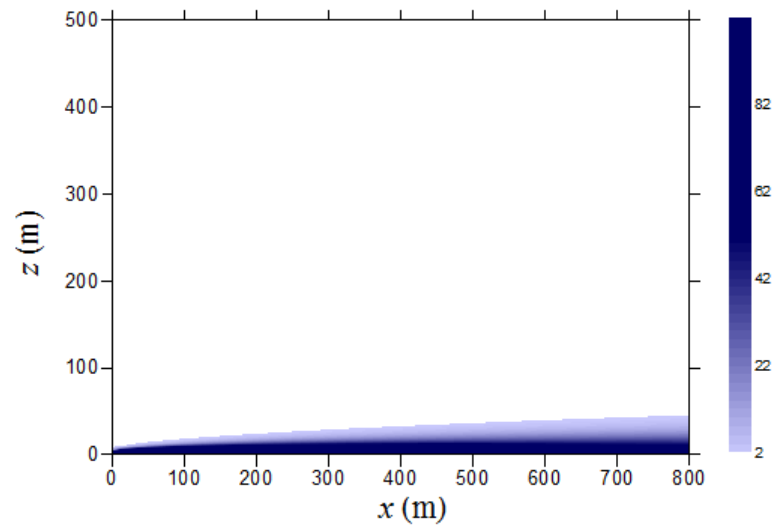


Figura 6.31: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em  $\text{s.m}^{-2}$  ( $\cdot 10^{-4}$ ), para o experimento 17 de Prairie Grass.

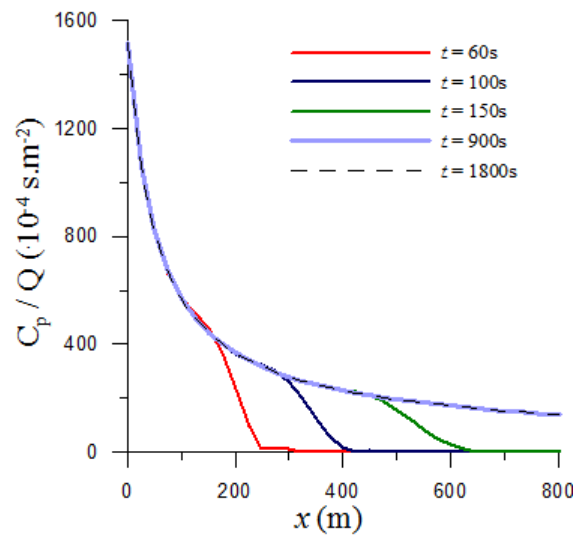


Figura 6.32: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 17 de Prairie Grass.

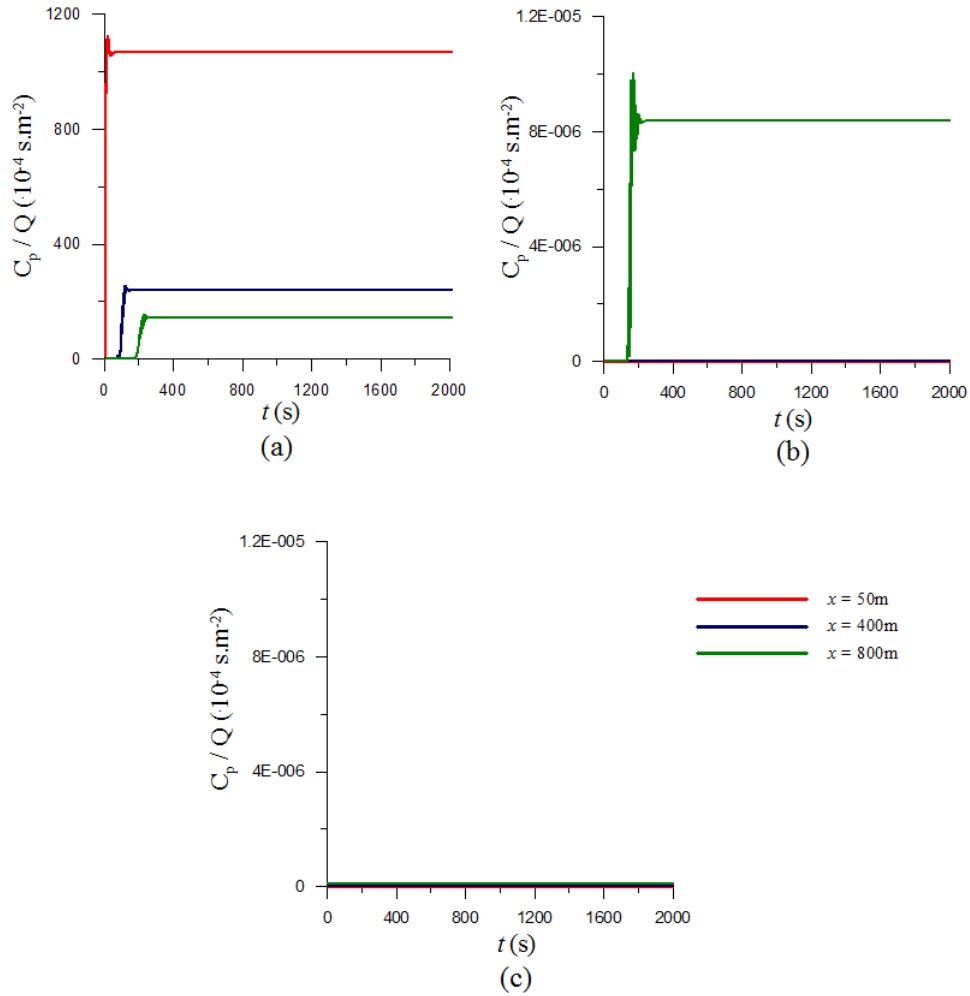


Figura 6.33: Evolução temporal da concentração integrada e normalizada para diferentes pontos do domínio, para o experimento 17 de Prairie Grass. O gráfico (a) refere-se a pontos na superfície, o gráfico (b) refere-se a pontos no nível  $z_i/2$  e o gráfico (c) refere-se aos pontos no nível  $z_i$ .

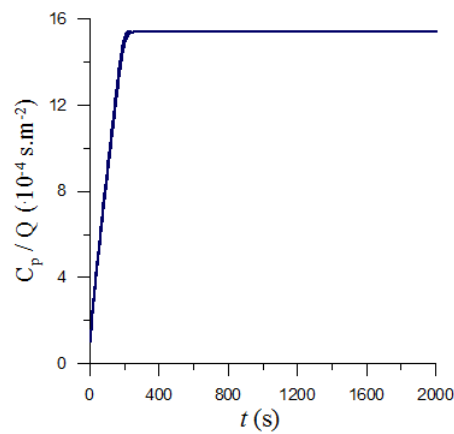


Figura 6.34: Evolução temporal da concentração média no domínio, para o experimento 17 de Prairie Grass.

## Análise em arcos distantes da fonte

Com o objetivo de avaliar o desempenho do modelo Semi-Lagrangiano em relação a distância da fonte de emissão, foi realizada uma análise dos resultados obtidos para as simulações dos experimentos de Prairie Grass para as amostras de dados de concentração com a mesma distância da fonte. Essa metodologia de análise segue a empregada por Armani *et al.* [20].

A Figura 6.35 ilustra os diagramas residuais para os dados de atmosfera instável (Figura a) e estável (Figura b) no arco de 50 m. As Figuras apresentam as taxas de concentrações simuladas pelas concentrações observadas em cada experimento.

A Tabela 6.14 fornece os índices estatísticos calculados para comparar as concentrações observadas nos experimentos de Prairie Grass e as previstas pelo modelo, para os dados com a mesma distância da fonte.

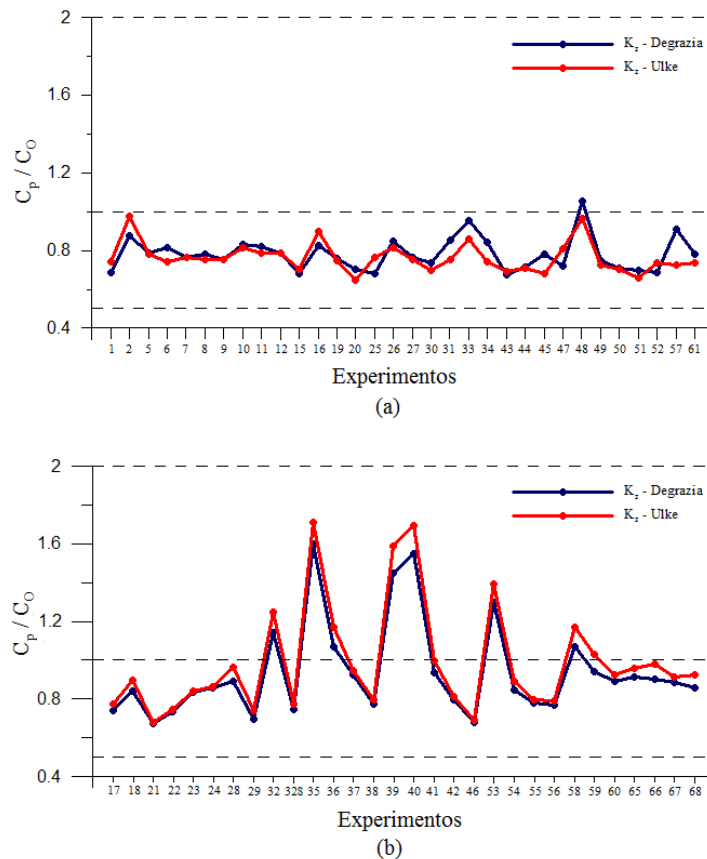


Figura 6.35: Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 50 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia *et al.* e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade.

Os resultados apresentados na Figura 6.35 e na Tabela 6.14 mostram que, para o arco de 50 m, todos os valores de concentração previstos estão dentro do limite aceitável e apresentam um coeficiente de correlação elevado. Além disso, percebe-se que o modelo

Semi-Lagrangeano subestima a maioria dos dados de concentração para as duas condições de estabilidade atmosférica. Pelas medidas do erro quadrático médio normalizado ( $Nmse$ ) e do desvio padrão fracional ( $F_s$ ), verifica-se que para a formulação do coeficiente de difusão turbulento proposta por Degrazia as concentrações simuladas estão mais próximas dos valores observados do que para a formulação proposta por Ulke.

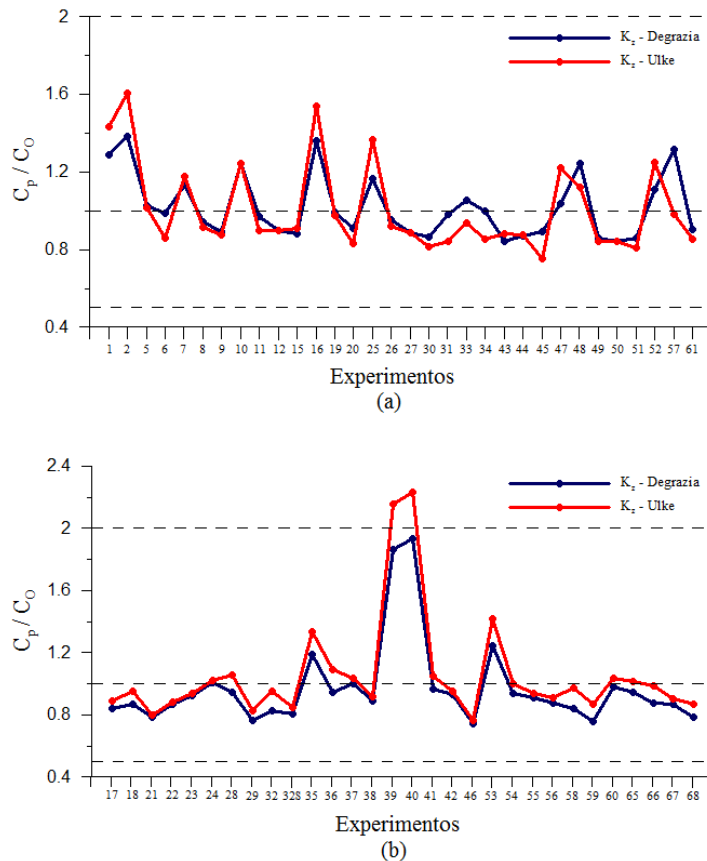


Figura 6.36: Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 100 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia *et al.* e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade.

Analisando a Tabela 6.14 e a Figura 6.36, que ilustra os diagramas residuais para os dados de atmosfera instável (Figura a) e estável (Figura b) no arco de 100 m, observa-se que a maioria dos valores de concentração são subestimados para os resultados obtidos com a implementação de  $K_z$  proposta por Degrazia *et al.* [52], enquanto que para a formulação proposta por Ulke [53], a maioria dos valores de concentração foi superestimada. Também nota-se que, para a formulação do coeficiente de difusão turbulento proposta por Degrazia *et al.* [52], o modelo prevê melhor os valores das concentrações simuladas em comparação aos valores obtidos utilizando a formulação proposta por Ulke. Para ambas as condições de estabilidade atmosférica, o coeficiente de correlação é alto e, neste arco, as concentrações simuladas estão mais próximas dos valores observados do que no arco anterior.

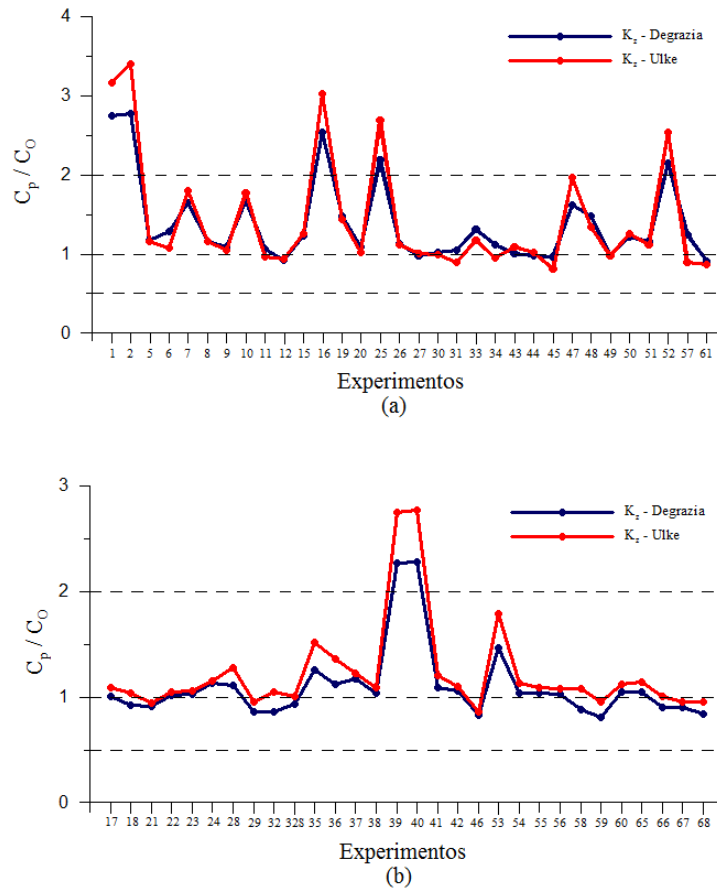


Figura 6.37: Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 200 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia *et al.* e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade.

De acordo com a Tabela 6.14 e a Figura 6.37 que ilustra os diagramas residuais para os dados de atmosfera instável (Figura a) e estável (Figura b) no arco de 200 m, os valores de concentração tendem a ser superestimados. Nota-se que todas as estatísticas estão dentro dos limites estabelecidos por Chang e Hanna [63]. O modelo apresenta comportamento semelhante para as duas formulações de  $K_z$ , embora os resultados das concentrações obtidas pela formulação proposta por Ulke [53] apresentem erros maiores do que os obtidos com a formulação proposta por Degrazia *et al.* [52]. Observa-se grandes picos nos valores das taxas de concentrações simuladas pelas concentrações observadas, os quais ocorrem nos mesmos experimentos, a saber, experimentos 1, 2, 16, 25 e 52 (instáveis) e 39 e 40 (estáveis).

A Figura 6.38 apresenta os diagramas residuais para os dados de atmosfera instável (gráfico a) e estável (gráfico b) no arco de 400 m.

Analisando a Tabela 6.14 e a Figura 6.38 também verificamos grandes picos nos valores das taxas de concentrações simuladas pelas concentrações observadas, no arco de 400 m. O modelo tende a superestimar os valores de concentração. Para condições instáveis,

dos 30 experimentos simulados, 10 resultaram em valores de concentração fora dos limites aceitáveis. Já para condição de estabilidade atmosférica, dos 32 experimentos, apenas 2 resultaram em valores fora dos limites. Embora a maioria dos índices estatísticos esteja dentro dos limites aceitáveis, estabelecidos por Chang e Hanna [63], os valores de concentração simulados para este arco, apresentam erros maiores do que nos arcos anteriores, considerando cada formulação de  $K_z$ .

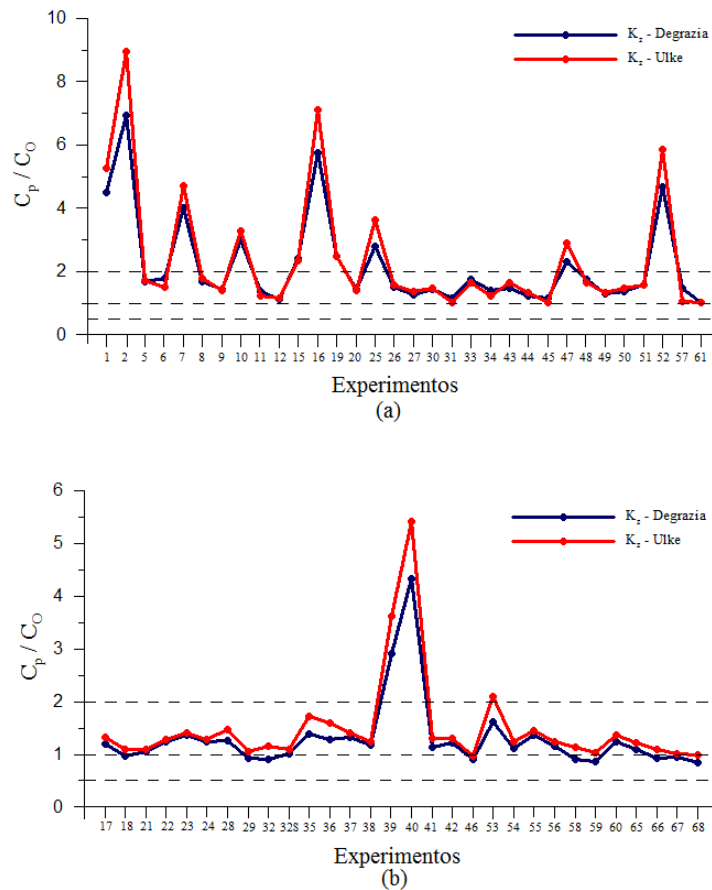


Figura 6.38: Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 400 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia *et al.* e Ulke. A Figura (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e a Figura (b) a condições de estabilidade.

Para o arco de 800 m, pela Figura 6.39 e Tabela 6.14, nota-se que para condições de instabilidade atmosférica o modelo superestimou bastante o campo de concentrações, apresentando picos elevados nos valores das taxas de concentrações simuladas pelas concentrações observadas, em vários experimentos. Em condições de estabilidade também verifica-se a tendência do modelo em superestimar os valores de concentração. O comportamento do modelo foi bastante parecido para as duas formulações de  $K_z$ , sendo que para a formulação proposta por Ulke [53] as concentrações simuladas assumem valores maiores do que para a formulação de Degrazia *et al.* [52].

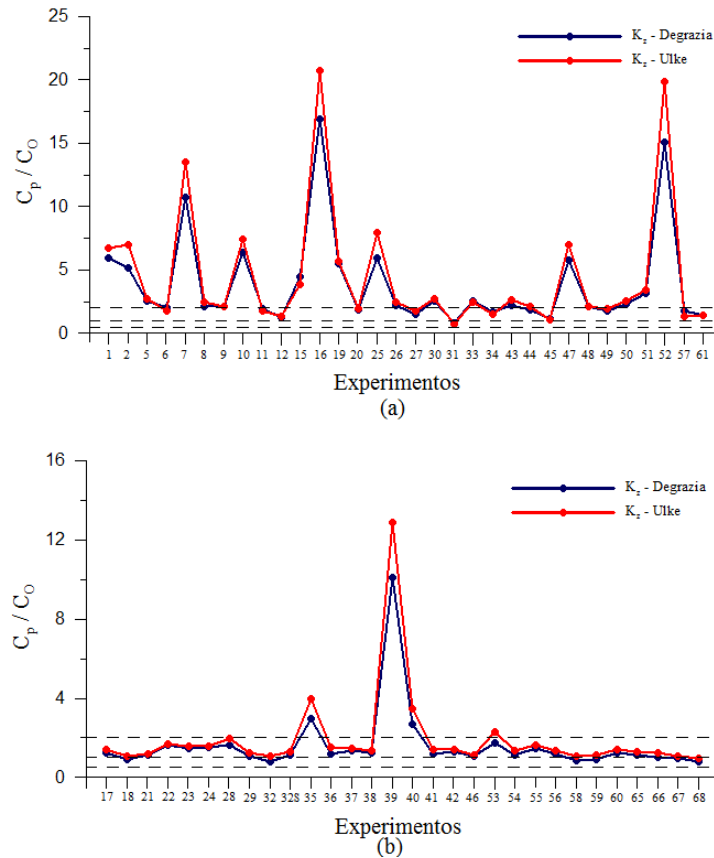


Figura 6.39: Diagrama residual para o experimento de Prairie Grass e arco de 800 m, utilizando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia *et al.* e Ulke. O gráfico (a) refere-se a condições de instabilidade atmosférica e o gráfico (b) a condições de estabilidade.

Tabela 6.14: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Prairie Grass nos diferentes arcos.

Modelo	Arco	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	50 m	0,08	0,10	-0,29	0,92	1,00
S-L ( $K_z$ Ulke)	50 m	0,04	0,13	-0,39	0,92	1,00
S-L ( $K_z$ Degrazia)	100 m	0,009	0,10	-0,04	0,92	1,00
S-L ( $K_z$ Ulke)	100 m	-0,06	0,16	-0,20	0,92	0,96
S-L ( $K_z$ Degrazia)	200 m	-0,12	0,18	-0,11	0,91	0,88
S-L ( $K_z$ Ulke)	200 m	-0,24	0,43	-0,33	0,91	0,88
S-L ( $K_z$ Degrazia)	400 m	-0,25	0,39	-0,18	0,89	0,80
S-L ( $K_z$ Ulke)	400 m	-0,40	0,93	-0,42	0,88	0,79
S-L ( $K_z$ Degrazia)	800 m	-0,35	0,99	-0,27	0,81	0,61
S-L ( $K_z$ Ulke)	800 m	-0,53	2,15	-0,53	0,80	0,59

O modelo Semi-Lagrangeano apresenta um comportamento semelhante para as duas formulações do coeficiente de difusão turbulento. Verifica-se a tendência do modelo de superestimar os valores de concentração a partir do arco de 200m, de modo que os erros

nas concentrações simuladas aumentam à medida que aumenta a distância da fonte de emissão, concordando com os resultados obtidos por Armani *et al.* [20].

## Análise de Tendências

Nesta subseção é realizada uma análise de tendências do modelo Semi-Lagrangeano com relação ao comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ).

As Figuras 6.40 e 6.41 apresentam os diagramas residuais que relacionam a taxa de concentração simulada pela concentração observada e os valores do comprimento de Monin-Obukhov para cada experimento, em condições de instabilidade e estabilidade atmosférica, respectivamente.

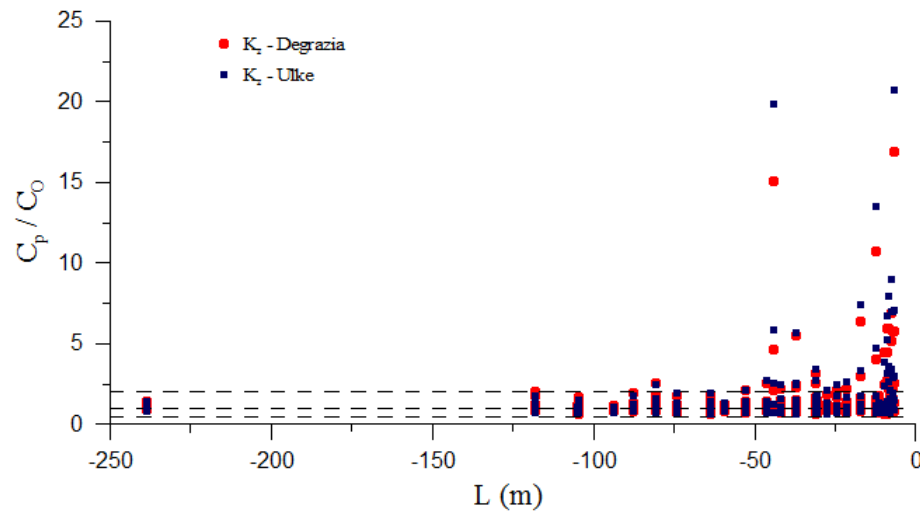


Figura 6.40: Diagrama residual para atmosfera instável e comprimento de Monin-Obukhov.

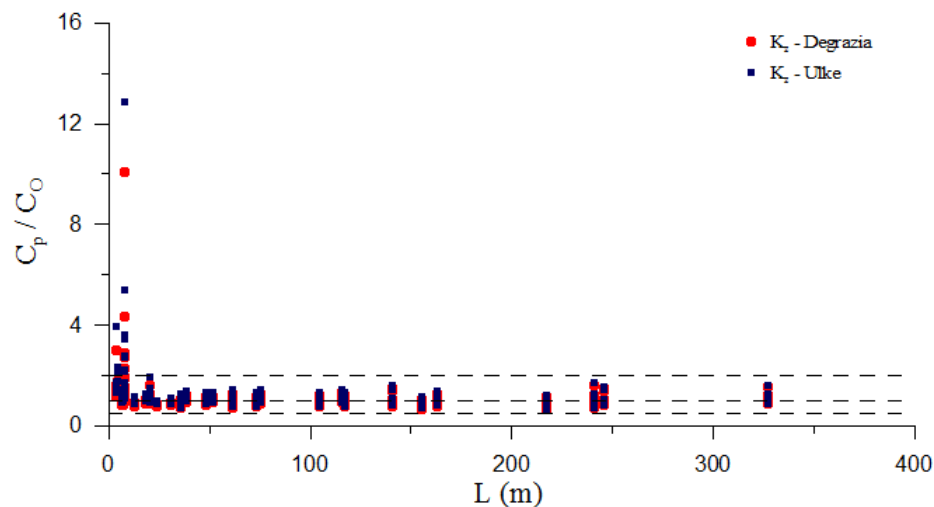


Figura 6.41: Diagrama residual para atmosfera estável e comprimento de Monin-Obukhov.



Analisando as Figuras 6.40 e 6.41, nota-se que o modelo Semi-Lagrangeano tende a superestimar os valores de concentração para pequenos comprimentos de Monin-Obukhov, ou seja, para condições atmosféricas muito instáveis e para muito estáveis.

Isto, provavelmente, se deve ao fato de que as formulações de  $K_z$  baseiam-se na Teoria de Monin-Obukhov, a qual não se aplica aos casos extremos de estabilidade ou instabilidade atmosférica.

## 6.2 Comparação com diferentes modelos de dispersão

Para verificar se o modelo proposto fornece resultados aceitáveis em relação a modelos baseados em outras formulações, foi realizada uma comparação com resultados presentes na literatura e, obtidos por outros autores para cada experimento.

A Tabela 6.15 apresenta a comparação dos índices estatísticos calculados para valores de concentração observados no experimento de Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e pelos modelos ILS (Lagrangeano)[27], Euleriano Semi-Analítico [15], Gaussiano [30] e GILTT [18].

Tabela 6.15: Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Copenhagen previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	0,03	0,05	-0,04	0,87	1,00
ILS (Lagrangeano)	0,01	0,03	0,03	0,93	1,00
Euleriano	0,06	0,07	0,23	0,90	1,00
Gaussiano	0,10	0,08	0,31	0,87	1,00
GILTT	-0,04	0,05	0,13	0,91	1,00

De acordo com a Tabela 6.15, verifica-se que para as simulações do experimento de Copenhagen, os resultados obtidos pelo modelo Semi-Lagrangeano são, de forma geral, comparáveis aos obtidos pelos demais modelos. A maioria dos índices estatísticos, calculados para os dados do Semi-Lagrangeano, está mais próxima dos valores ótimos, exceto o coeficiente de correlação, que embora seja alto e igual ao obtido pelo modelo Gaussiano, está abaixo dos demais.

Analisando a Tabela 6.16, que apresenta a comparação dos índices estatísticos calculados para valores de concentração observados no experimento de Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e pelo modelo Euleriano [53], nota-se que para este experimento, o modelo Semi-Lagrangeano superestima os dados de concentração, enquanto o

modelo Euleriano os subestima. O coeficiente de correlação é maior para os dados simulados pelo modelo proposto e, 13% dos dados simulados estão fora do limite aceitável. Além disso, observa-se que o resultado da medida do erro quadrático médio normalizado para a amostra do Euleriano é maior do que para a amostra de dados do Semi-Lagrangeano.

Tabela 6.16: Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Cabauw previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos apresentados na literatura.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	-0,16	0,23	-0,30	0,86	0,87
Euleriano	0,14	0,27	-0,08	0,77	0,87

A Tabela 6.17 apresenta a comparação dos índices estatísticos calculados para valores de concentração observados no experimento de Hanford e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e pelos modelos Euleriano [53] e GILTT [18].

Tabela 6.17: Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Hanford previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	0,08	0,33	0,30	0,85	0,90
Euleriano	-0,27	0,27	-0,01	0,87	0,69
GILTT	-0,20	0,24	-0,03	0,91	0,77

Os resultados apresentados na Tabela 6.17 mostram que, para as simulações dos experimentos de Hanford, a maioria das medidas de concentração foram subestimadas ( $F_b < 0$ ) pelo modelo Semi-Lagrangeano, enquanto que os demais modelos superestimaram estas medidas. Também nota-se, pelo resultado da medida do erro quadrático médio normalizado que, a amostra de dados do modelo Semi-Lagrangeano, apresenta mais erros nas medidas de concentração do que nos demais modelos. Além disso, observa-se que apenas 10% dos valores simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano estão fora dos limites aceitáveis, enquanto que nos modelos Euleriano e GILTT, temos 31% e 23%, respectivamente, dos valores simulados fora dos limites aceitáveis.

A Tabela 6.18 apresenta a comparação dos índices estatísticos calculados para valores de concentração observados nos experimentos instáveis de Prairie Grass e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e pelos modelos ILS [27], Euleriano Analítico [64], Modelar [20] e GILTT [18].

Tabela 6.18: Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos instáveis de Prairie Grass previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	0,03	0,14	0,31	0,96	0,77
ILS (Lagrangeano)	0,003	0,03	0,07	0,96	0,78
Euleriano	-0,21	0,09	0,14	0,98	0,61
Modelar	0,10	0,15	—	—	0,92
GILTT	-0,10	0,11	0,23	0,97	0,71

A Tabela 6.19 apresenta a comparação dos índices estatísticos calculados para valores de concentração observados nos experimentos estáveis de Prairie Grass e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e pelos modelos ILS [27], Euleriano [65] e Modelar [20].

Tabela 6.19: Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos estáveis de Prairie Grass previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L ( $K_z$ Degrazia)	-0,05	0,14	-0,11	0,91	0,95
ILS (Lagrangeano)	-0,05	0,39	-0,18	0,81	0,95
Euleriano	-0,22	0,49	-0,29	0,77	0,82
Modelar	0,03	0,30	—	—	0,80

Nota-se, analisando as Tabelas 6.18 e 6.19, que o comportamento do modelo Semi-Lagrangeano é bastante parecido com o comportamento dos modelos utilizados para comparação, para as duas condições de instabilidade atmosférica do experimento Prairie Grass.

As tabelas anteriores mostram uma boa concordância entre os resultados obtidos pelo modelo Semi-Lagrangeano e os resultados, presentes na literatura, obtidos por outros modelos.

### 6.3 Tempo computacional das simulações

O código do modelo Semi-Lagrangiano proposto foi desenvolvido em linguagem de programação FORTRAN em precisão dupla, e as simulações numéricas foram conduzidas utilizando-se um computador com processador Intel Core i5, com 2,67GHz, memória RAM de 4GB e sistema operacional de 64 bits.

A Tabela 6.20 apresenta o tempo de processamento do modelo Semi-Lagrangiano e o número de pontos de grade utilizados nas simulações para os experimentos 1 e 5 de Copenhagen, 4A e 9B de Cabauw, 2 de Hanford e 1 e 17 de Prairie Grass, com a grade 1 e a formulação do coeficiente de difusão turbulento proposta por Degrazia *et al.* [52].

Tabela 6.20: Tempo de processamento e número de pontos de grade utilizados.

Experimento	$nx \times nz$	Tempo de Processamento
Exp. 1 de Copenhagen	$123 \times 82$	82,2s
Exp. 5 de Copenhagen	$123 \times 37$	39,15s
Exp. 4A de Cabauw	$441 \times 24$	46,6s
Exp. 9B de Cabauw	$441 \times 67$	125,02s
Exp. 2 de Hanford	$129 \times 82$	92,3s
Exp. 1 de Prairie Grass	$81 \times 20$	37,23s
Exp. 17 de Prairie Grass	$81 \times 16$	33,58s

# Capítulo 7

## Resultados e Discussões - Problema Transiente

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos através das simulações numéricas realizadas com o modelo Semi-Lagrangiano e as comparações com os dados observados no experimento de Copenhagen Transiente.

### 7.1 Experimento Copenhagen Transiente

Para as simulações do experimento Copenhagen transiente com o modelo Semi-Lagrangiano, consideramos  $W = 0$ . O domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores (6100 m) e o domínio vertical foi fixado igual a altura da CLA,  $z_i$ . O passo no tempo foi mantido constante e obtido de modo que a condição estabelecida pela equação (2.17) fosse satisfeita. A grade escolhida foi a que forneceu os melhores resultados para as simulações do experimento Copenhagen na subseção 6.1.1, ou seja, a estrutura horizontal definida por  $\Delta x = 50\text{m}$  e a estrutura vertical definida por  $v = 5\text{m}$  e  $\iota = 30\text{m}$ .

Como para este experimento as medidas de concentração começaram uma hora após a liberação do traçador e o tempo médio das medidas foi de 1 h, foram realizadas simulações para um período de 7200s, com atualização dos parâmetros micrometeorológicos  $u_*$  e  $L$  de 10 em 10 min, conforme apresentam as Tabelas 5.2 e 5.3. Considerou-se que não houve variação na altura da CLA durante o período de simulação. As médias de concentrações foram calculadas para os intervalos de 20 min, a partir da primeira hora.

Foram conduzidas simulações utilizando-se as formulações para a difusividade turbulenta vertical propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53], descritas no Capítulo 3.

A Tabela 7.1 apresenta os resultados das simulações. Os índices estatísticos calculados

para comparar os dados observados e os previstos pelo modelo, para cada intervalo de tempo e cada parametrização, são apresentados na Tabela 7.2.

A Figura 7.1 ilustra os diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Copenhagen ( $C_o$ ) pelos resultados das concentrações simuladas ( $C_p$ ), comparando as diferenças entre as previsões para as diferentes formulações de  $K_z$ . O diagrama (a) refere-se ao período I (t=61 a 80 min), (b) refere-se ao período II (t=81 a 100 min) e (c) ao período III (t=101 a 120 min). A reta bissetriz (linha contínua) indica os valores de ( $C_o$ ) e ( $C_p$ ) iguais, ou seja, o Fator de 2.

Analisando os resultados, observa-se que o modelo Semi-Lagrangeano simula bem as concentrações observadas para todos os períodos. Todos valores dos índices estatísticos estão dentro dos limites aceitáveis estabelecidos por Chang e Hanna [63]. Embora os resultados sejam muito parecidos, nota-se a mesma tendência das simulações para os experimentos estacionários apresentados anteriormente, de erros maiores para a implementação da formulação de  $K_z$  proposta por Ulke.

Tabela 7.1: Valores de concentração integrada e normalizada pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke.

Exp.	Dist. (m)	Período I			Período II			Período III		
		Co/Q ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	Cp/Q ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )		Co/Q ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	Cp/Q ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )		Co/Q ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	Cp/Q ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	
1	1900	5,60	5,30	6,16	8,27	6,31	7,12	5,51	6,23	7,36
	3700	1,74	3,16	3,54	2,25	3,83	4,25	3,02	3,69	4,14
2	2100	4,36	3,37	3,51	5,14	4,02	4,04	6,73	4,75	4,77
	4200	2,72	2,36	2,34	1,96	2,81	2,76	4,20	3,26	3,22
3	1900	6,00	6,56	6,67	9,26	7,97	8,12	9,32	6,89	6,96
	3700	4,70	4,26	4,05	6,53	5,12	4,82	7,62	4,50	4,27
	5400	3,93	3,31	3,03	5,24	4,04	3,69	4,01	3,50	3,17
4	4000	6,26	8,63	8,03	9,97	8,87	8,08	17,37	8,98	8,19
5	2000	5,78	7,50	6,86	8,62	7,81	7,17	5,89	8,06	7,53
	4200	5,09	5,41	4,54	6,55	5,89	4,90	5,91	6,61	5,43
	5900	5,07	4,34	3,52	5,37	4,75	3,78	4,65	5,44	4,21
7	2000	2,72	3,75	4,23	12,74	4,27	4,58	5,25	4,91	5,12
	4100	2,31	2,19	2,44	1,34	2,58	2,75	2,42	3,12	3,21
	5300	2,45	1,89	1,96	0,64	1,92	2,20	1,49	2,57	2,59
8	1900	4,00	4,21	4,02	4,84	4,14	3,91	3,65	4,27	3,90
	3600	2,31	2,99	2,67	1,34	2,87	2,54	2,42	2,73	2,47
	5300	2,45	2,52	2,30	0,64	2,38	2,10	1,49	2,35	2,16
9	2100	3,98	4,03	4,05	3,93	4,21	4,25	5,90	4,16	4,25
	4200	3,46	2,82	2,79	2,44	2,90	2,90	3,40	2,70	2,76
	6000	3,96	2,20	2,14	2,04	2,24	2,19	1,76	2,28	2,06

Tabela 7.2: Índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos de Copenhagen para os períodos I, II e III.

Período	Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
Período I	S-L ( $K_z$ Degrazia)	-0,02	0,05	-0,24	1,00	0,80
	S-L ( $K_z$ Ulke)	0,001	0,06	-0,19	0,94	0,76
Período II	S-L ( $K_z$ Degrazia)	0,09	0,21	0,53	0,79	0,78
	S-L ( $K_z$ Ulke)	0,13	0,22	0,57	0,79	0,78
Período III	S-L ( $K_z$ Degrazia)	0,10	0,20	0,50	1,00	0,77
	S-L ( $K_z$ Ulke)	0,13	0,23	0,53	0,95	0,75

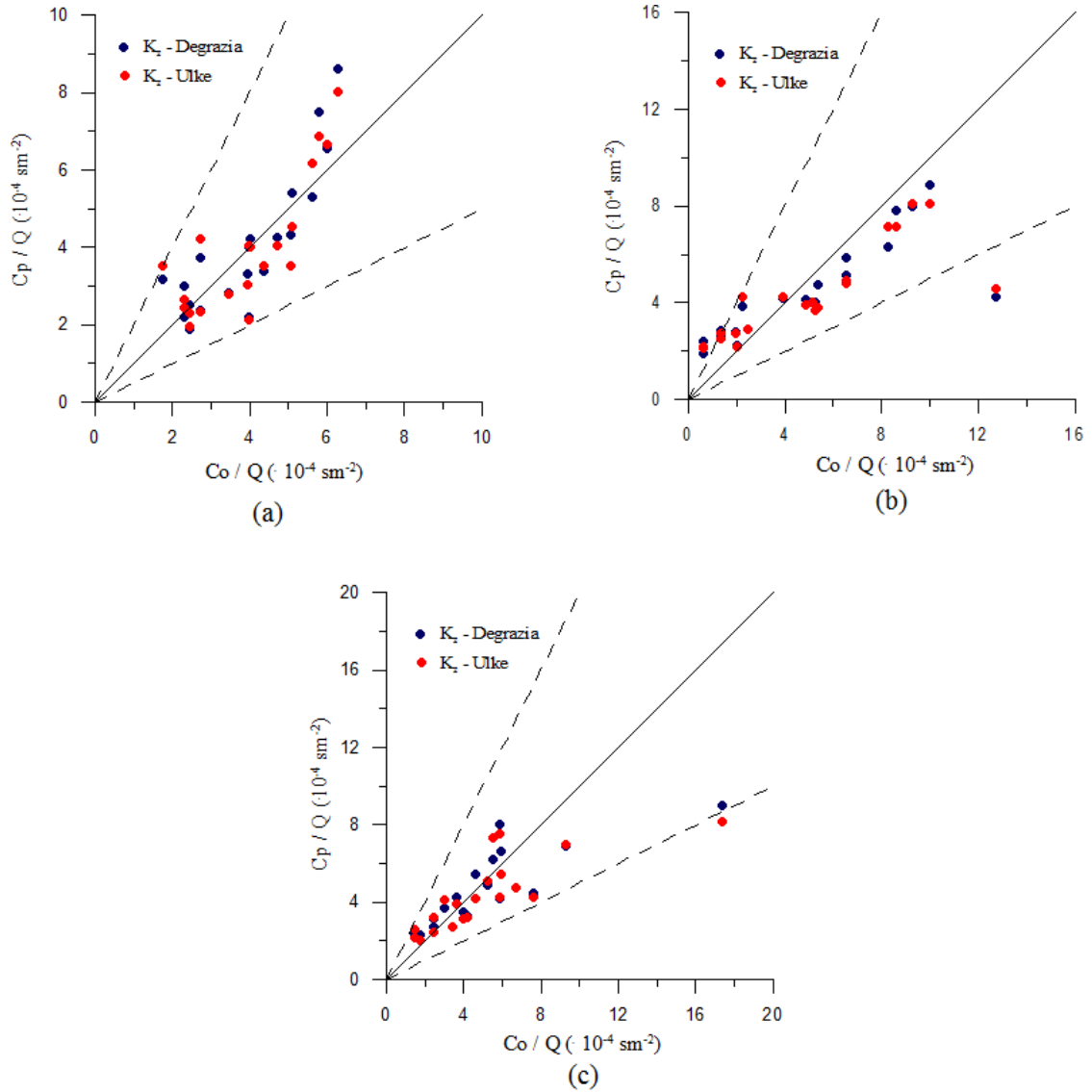


Figura 7.1: Diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Copenhagen ( $C_o$ ) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano ( $C_p$ ) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* [52] e Ulke [53]. As linhas tracejadas indicam o fator de 2. O gráfico (a) refere-se ao período I, o gráfico (b) ao período II e o (c) ao período III.



# Capítulo 8

## Resultados e Discussões - Análise de sensibilidade

Neste capítulo são apresentados os resultados da análise de sensibilidade com relação a variações dos parâmetros meteorológicos utilizados como dados de entrada no modelo.

### 8.1 Análise de sensibilidade do modelo às variações de parâmetros meteorológicos

Dados meteorológicos obtidos experimentalmente são utilizados como parâmetros de entrada no modelo e, como medidas obtidas em experimentos de campo são passíveis de erros e imprecisões, faz-se necessário um estudo no sentido de avaliar a influência destes erros nos valores de concentração previstos pelo modelo.

Para simular a ocorrência de erros nas medidas dos dados experimentais, o modelo foi processado variando-se, individualmente, em  $\pm 20\%$  e  $\pm 50\%$  em relação aos seus valores reais, os valores dos principais parâmetros micrometeorológicos utilizados como dados de entrada no modelo para as simulações de cada experimento, a saber: a velocidade de atrito ( $u_*$ ), a escala de velocidade convectiva vertical ( $w_*$ ), o comprimento de Obukhov ( $L$ ), a altura da camada limite atmosférica ( $z_i$ ) e o comprimento de rugosidade ( $z_0$ ).

Inicialmente, é realizada uma avaliação quantitativa das simulações através da análise estatística apresentada nas Figuras 8.1, 8.2, 8.3 e 8.4. Para facilitar a visualização dos parâmetros que causam mais impacto, foram elaborados gráficos para cada índice estatístico, indicando a variação no resultado de cada parâmetro micrometeorológico. As linhas e pontos pretos indicam os valores desejáveis (ótimos) de  $F_b$ ,  $F_s$ ,  $Nmse$ ,  $Cor$  e  $FA2$ . As linhas e pontos vermelhos indicam os resultados obtidos utilizando-se os dados experimentais sem a variação dos parâmetros. As linhas e pontos azul-claros, verde-claros,

azul-escuros e verde-escuros, indicam, respectivamente, as variações em  $\pm 20\%$  e  $\pm 50\%$  nos valores da velocidade de atrito ( $u_*$ ), da escala de velocidade convectiva vertical ( $w_*$ ), do comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ), da altura da CLA ( $z_i$ ) e do comprimento de rugosidade aerodinâmica ( $z_0$ ). Para mais detalhes a respeito dos resultados obtidos nas simulações ver Anexos A, B, C e D.

Analisando as Figuras 8.1, 8.2, 8.3 e 8.4 verifica-se que, de forma geral, para os experimentos de fonte elevada (Copenhagen e Cabauw), os parâmetros meteorológicos que mais influenciam os resultados de concentração são: a velocidade de atrito ( $u_*$ ), a escala de velocidade convectiva vertical ( $w_*$ ) e a altura da camada limite atmosférica ( $z_i$ ). Entretanto, para os experimentos de fonte baixa (Hanford e Prairie Grass) nota-se que os valores de concentração superficial são pouco influenciados pelas variações de  $z_i$ , predominando a influência de variações de  $u_*$ . Isto, provavelmente, se deve ao fato de que próximo a superfície a turbulência é dominada por forçantes mecânicas. Estes são parâmetros relevantes para descrever a estrutura da CLA. Assim, a ocorrência de erros em suas medidas experimentais ocasiona um erro, também, na representação da estrutura turbulenta da CLA.

Além disso, observa-se que para as variações de  $\pm 20\%$  a maioria dos índices estatísticos se mantém dentro do limite aceitável.

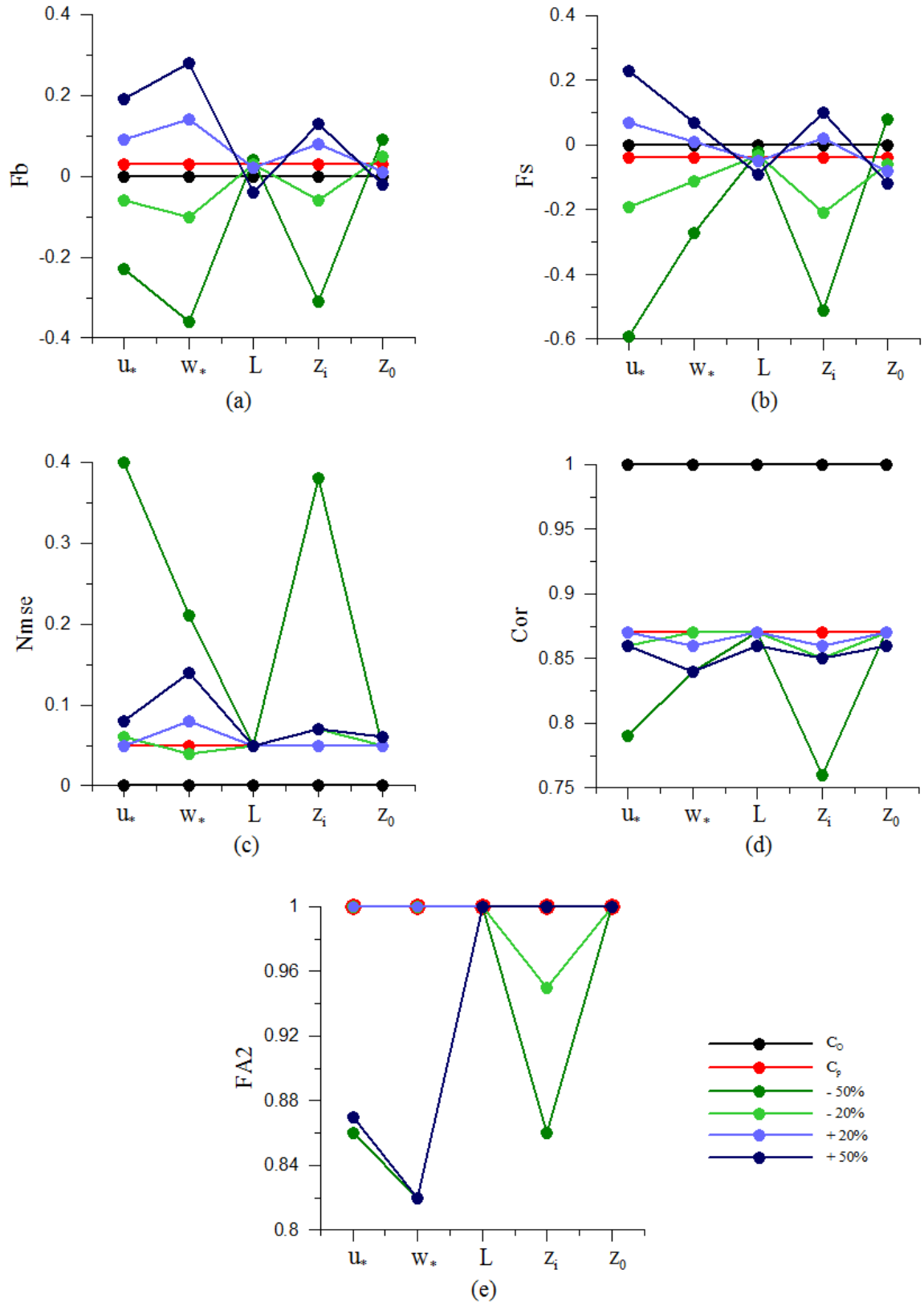


Figura 8.1: Índices estatísticos  $F_b$  (a),  $F_s$  (b),  $Nmse$  (c),  $Cor$  (d) e  $FA2$  (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Copenhagen.

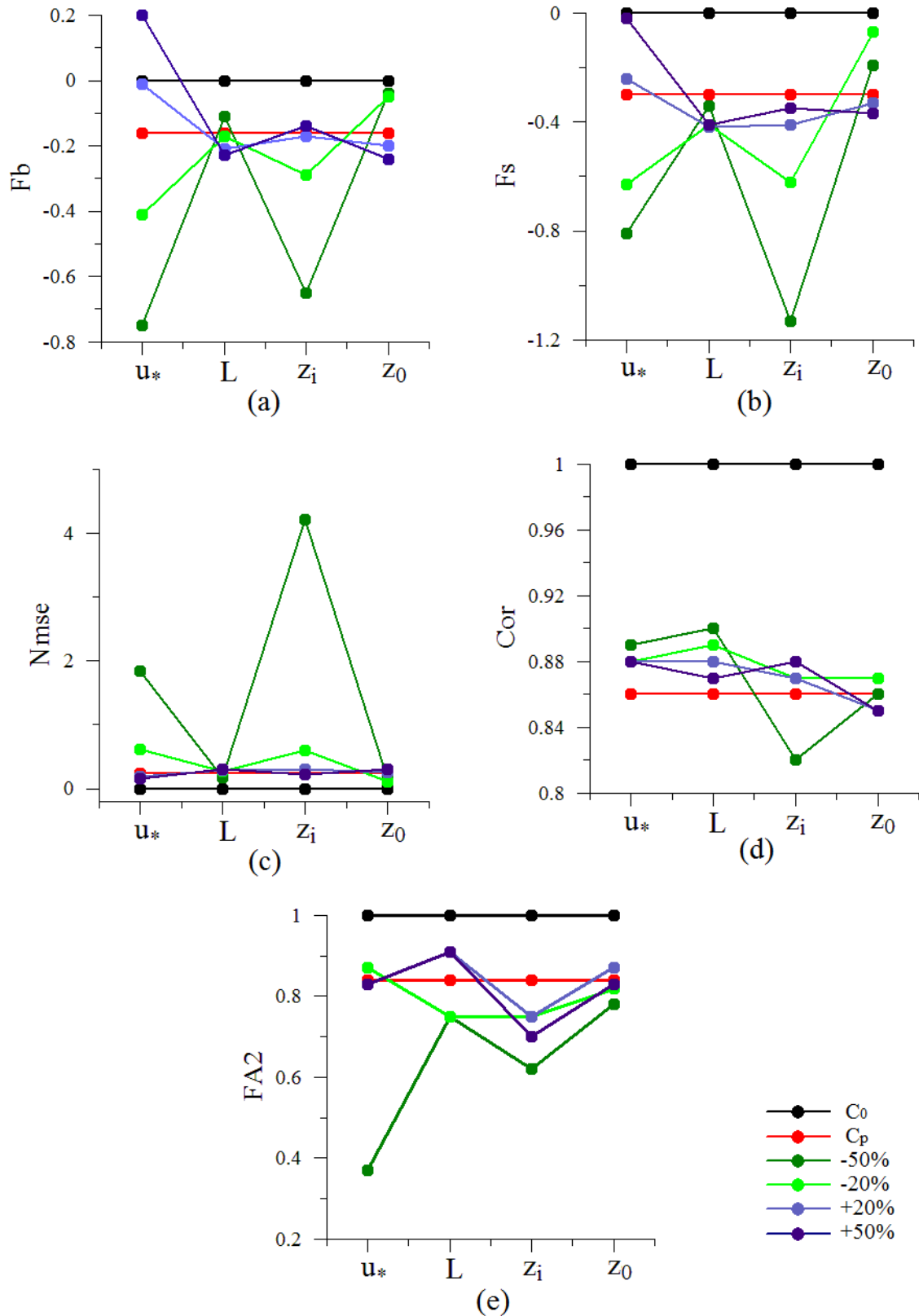


Figura 8.2: Índices estatísticos  $F_b$  (a),  $F_s$  (b),  $Nmse$  (c),  $Cor$  (d) e  $FA2$  (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Cabauw.

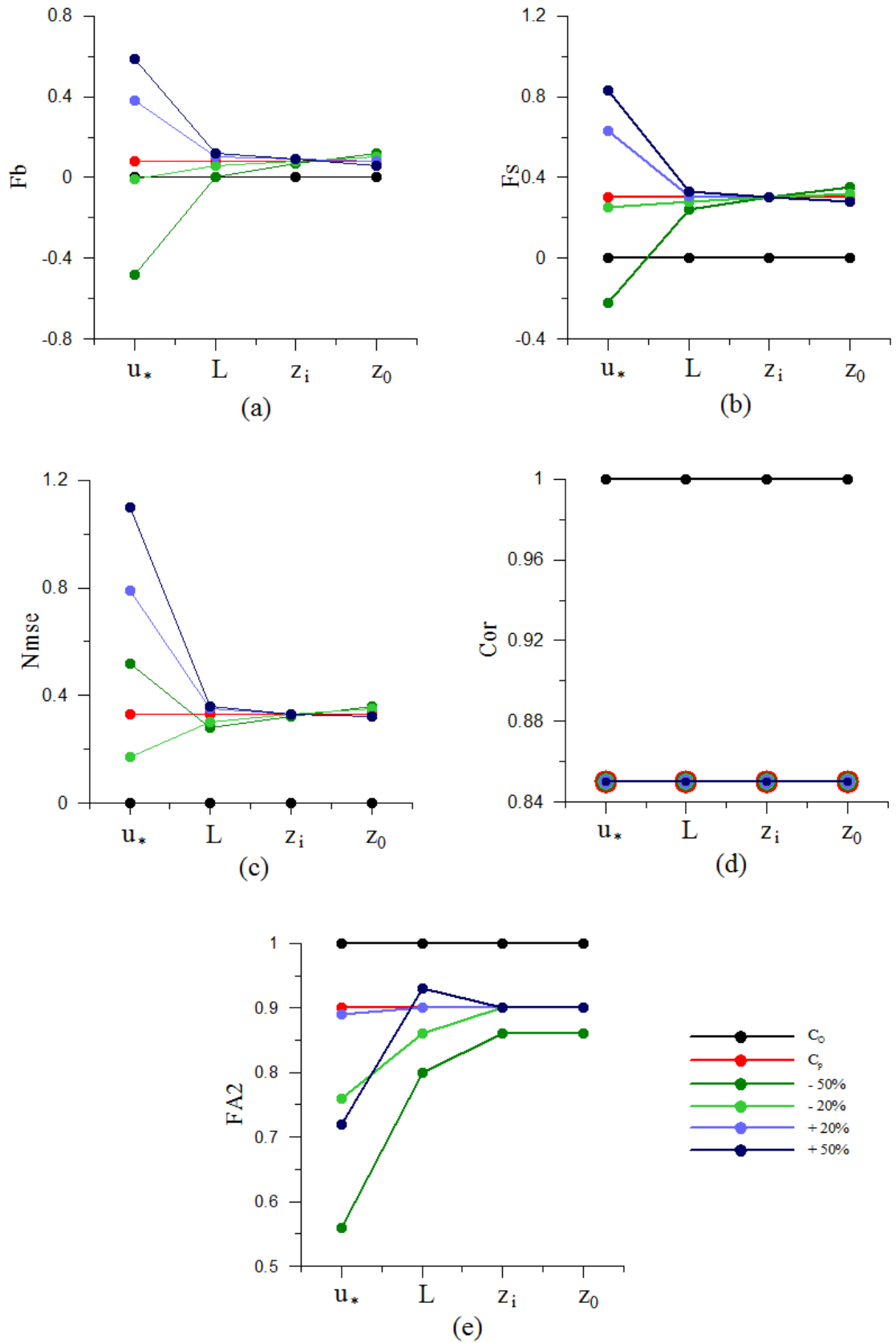


Figura 8.3: Índices estatísticos  $F_b$  (a),  $F_s$  (b),  $Nmse$  (c),  $Cor$  (d) e  $FA2$  (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Hanford.

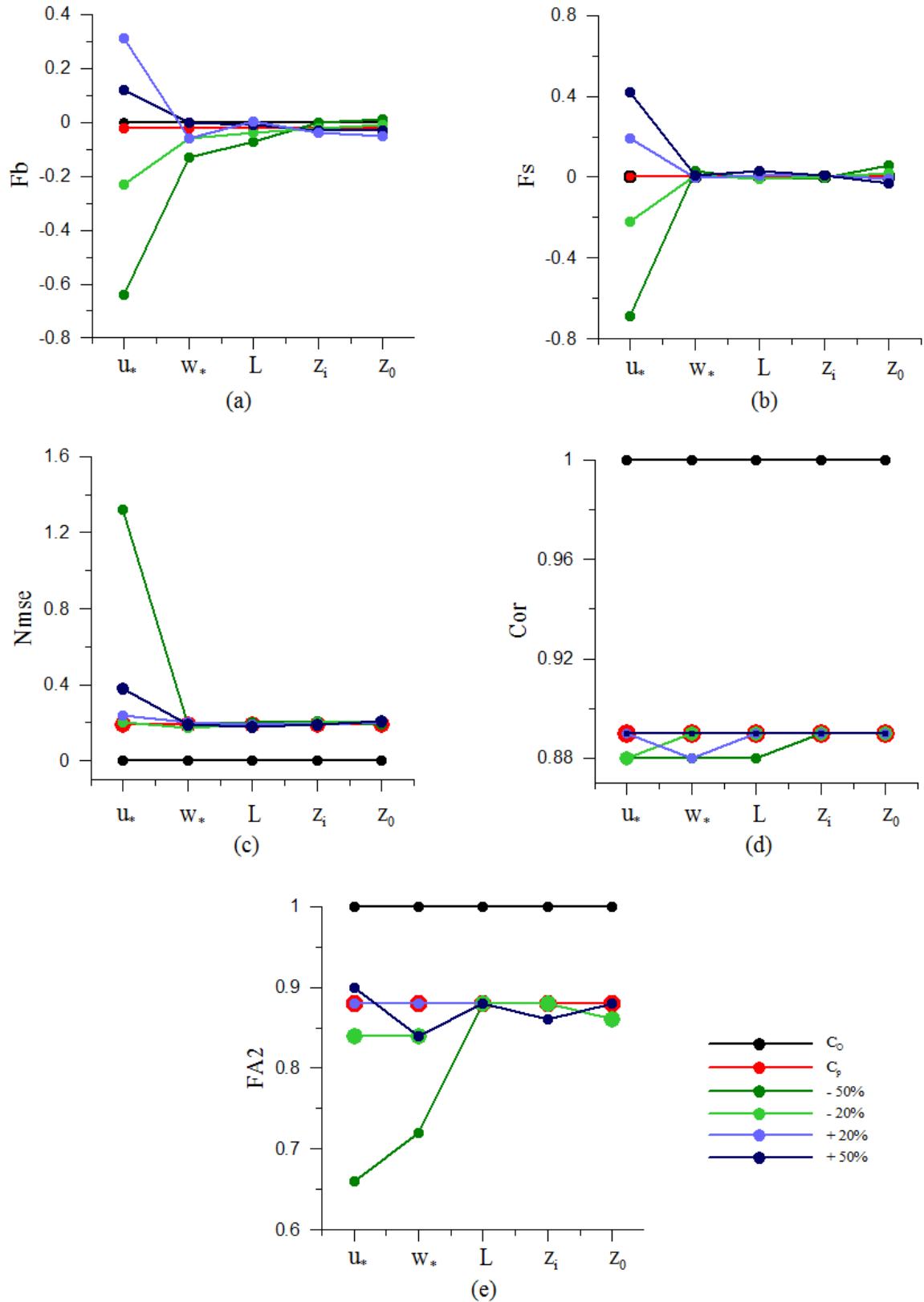


Figura 8.4: Índices estatísticos  $F_b$  (a),  $F_s$  (b),  $Nmsec$  (c),  $Cor$  (d) e  $FA2$  (e) calculados para as variações nos parâmetros de entrada para o experimento de Prairie Grass.

Em uma segunda etapa, os resultados são apresentados de forma qualitativa através das Figuras 8.5, 8.6, 8.7, 8.8, 8.9 e 8.10. Estas mostram uma comparação entre o perfil de concentração integrada e normalizada pela taxa de emissão, previstos pelo modelo, com e sem a variação dos parâmetros de entrada, para os experimentos 1 e 5 de Copenhagen, 9B de Cabauw, 2 de Hanford e, 56 e 61 de Prairie Grass, respectivamente.

De acordo com os resultados obtidos, para ambas as condições de estabilidade atmosférica, os valores dos picos de concentração são bastante superestimados quando as medidas do parâmetro meteorológico  $u_*$  são subestimadas (cerca de duas vezes maior para uma redução de 50% no valor de  $u_*$ ). Neste caso, a distância da fonte onde ocorre este pico não sofre uma variação significativa. Este resultado é muito importante no sentido de que a posição e o valor máximo de concentração ao nível da superfície são parâmetros fundamentais para o controle da qualidade do ar.

Para subestimativas nos valores do parâmetro  $z_i$ , os valores de concentração ao nível da superfície também são superestimados nos experimentos de fonte elevada. Isto já era esperado, pois com a diminuição da altura da CLA, ou seja, com uma redução na região de dispersão, as concentrações superficiais tendem a aumentar. No entanto, nos experimentos de fonte baixa, o perfil de concentração superficial, praticamente, não sofre alteração com a variação de  $z_i$ .

Observa-se também que variações nas medidas da escala de velocidade convectiva vertical ( $w_*$ ) não afetam a magnitude dos picos de concentração e sim a distância da fonte onde estes ocorrem. Mais especificamente, os picos de concentração ocorrem mais próximos da fonte de emissão quando as medidas de  $w_*$  são superestimadas.

É interessante notar, também, que apesar de ser um parâmetro crucial para a caracterização da estabilidade da CLA, o comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) tem pouco impacto na introdução de erros tanto nos valores da concentração próxima à superfície, quanto na posição de máxima concentração em quaisquer condições de estabilidade.

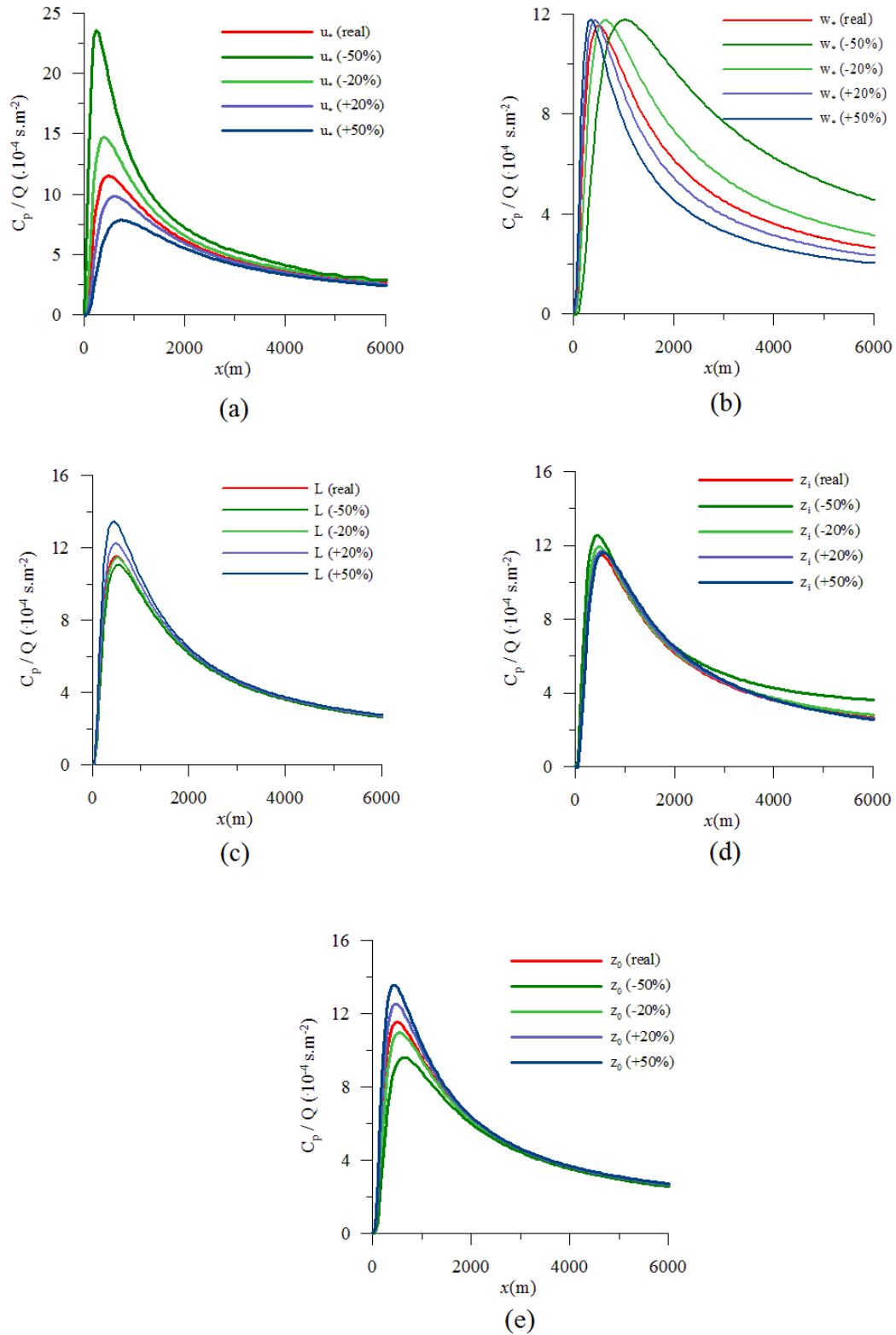


Figura 8.5: Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangeano, com e sem as variações da velocidade de atrito  $u_*$  (a), da escala de velocidade convectiva vertical  $w_*$  (b), do comprimento de Obukhov  $L$  (c), da altura da CLA  $z_i$  (d) e do comprimento de rugosidade  $z_0$  (e), para o experimento 1 de Copenhagen.



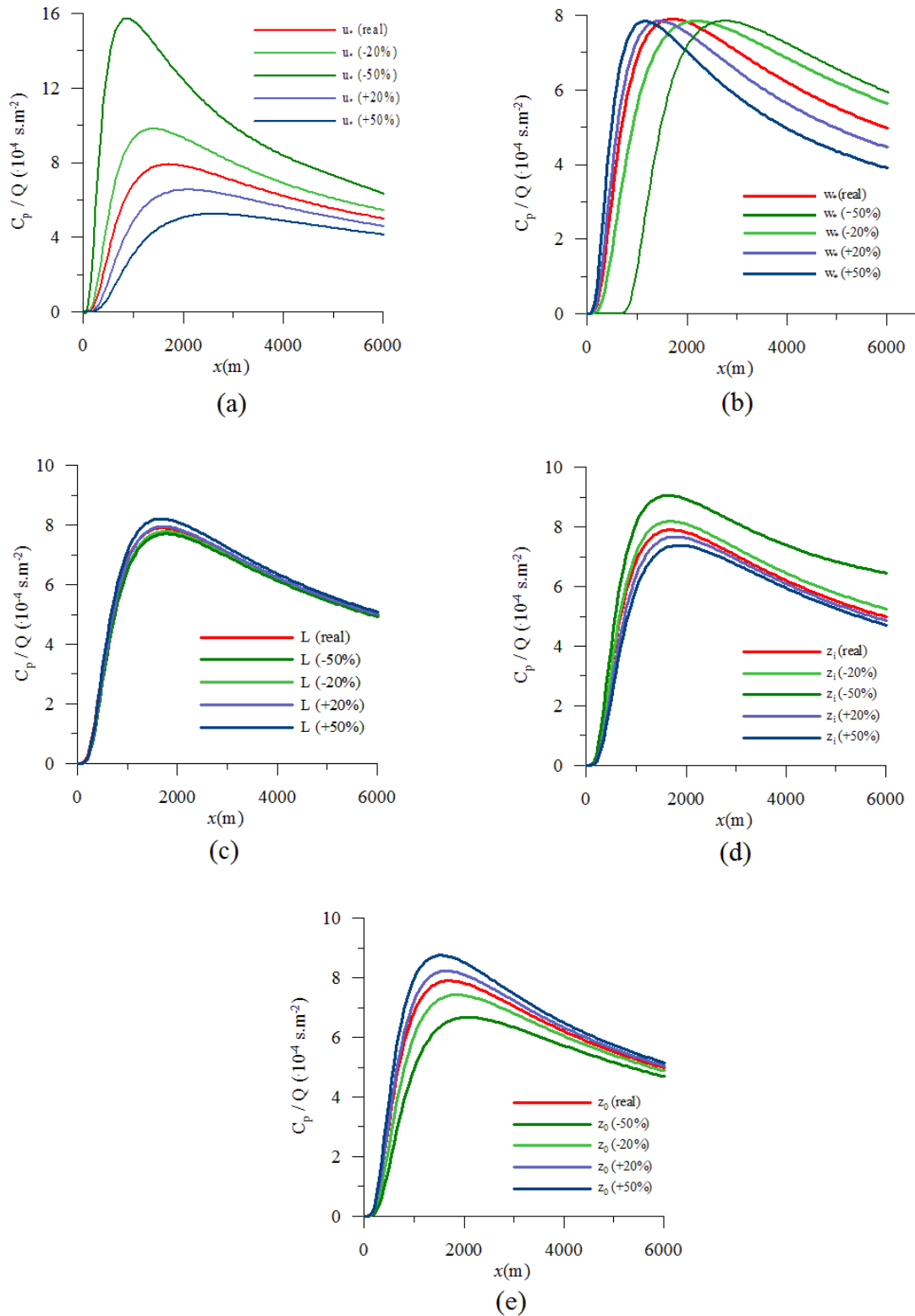


Figura 8.6: Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano, com e sem as variações da velocidade de atrito  $u_*$  (a), da escala de velocidade convectiva vertical  $w_*$  (b), do comprimento de Obukhov  $L$  (c), da altura da CLA  $z_i$  (d) e do comprimento de rugosidade  $z_0$  (e), para o experimento 5 de Copenhagen.

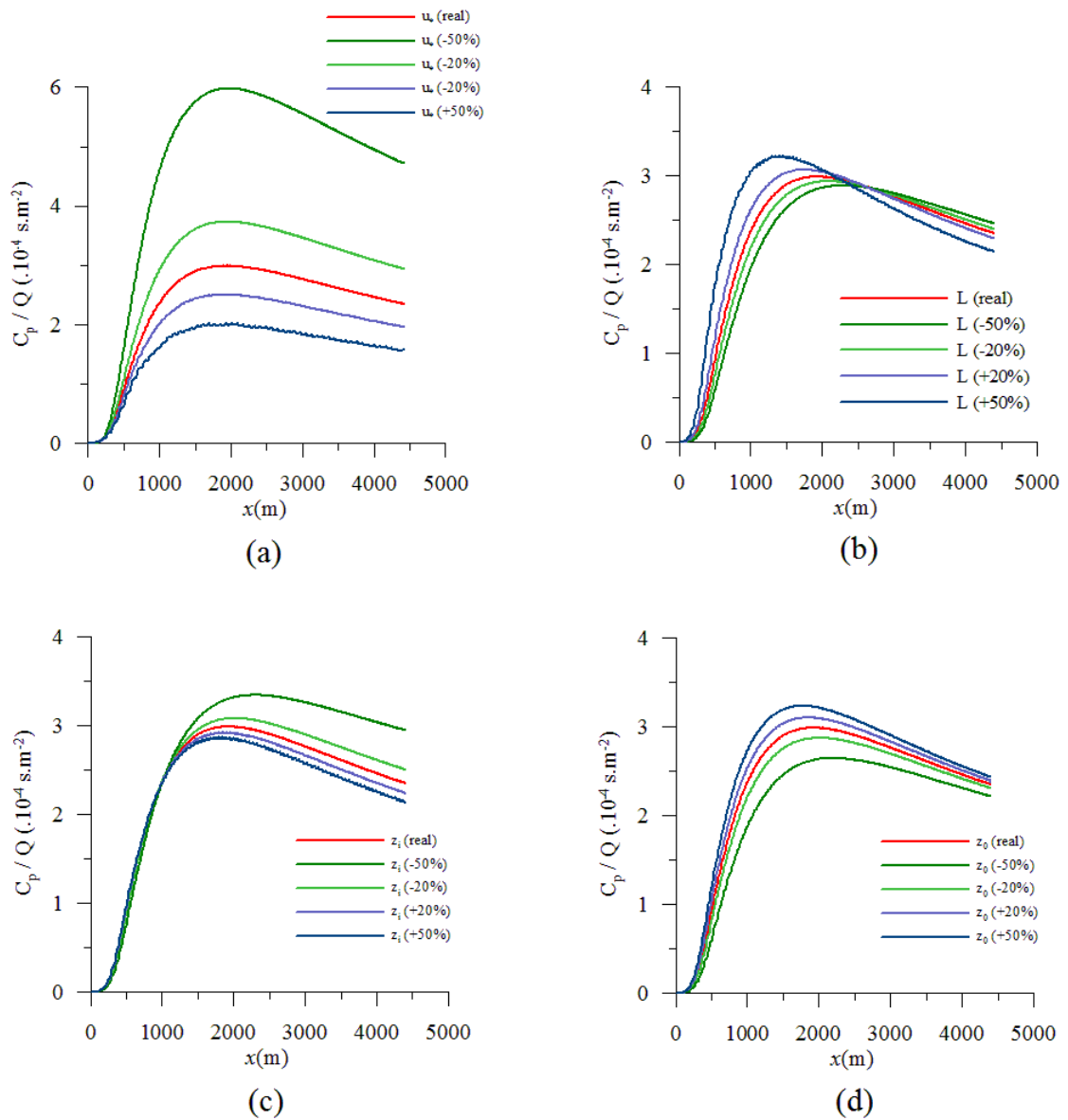


Figura 8.7: Perfil longitudinal de concentraç o integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao n vel da superf cie, previstas pelo modelo Semi-Lagrangearno, com e sem as variaç es da velocidade de atrito  $u_*$  (a), da escala de velocidade convectiva vertical  $w_*$  (b), do comprimento de Obukhov  $L$  (c), da altura da CLA  $z_i$  (d) e do comprimento de rugosidade  $z_0$  (e), para o experimento 9B de Cabauw.

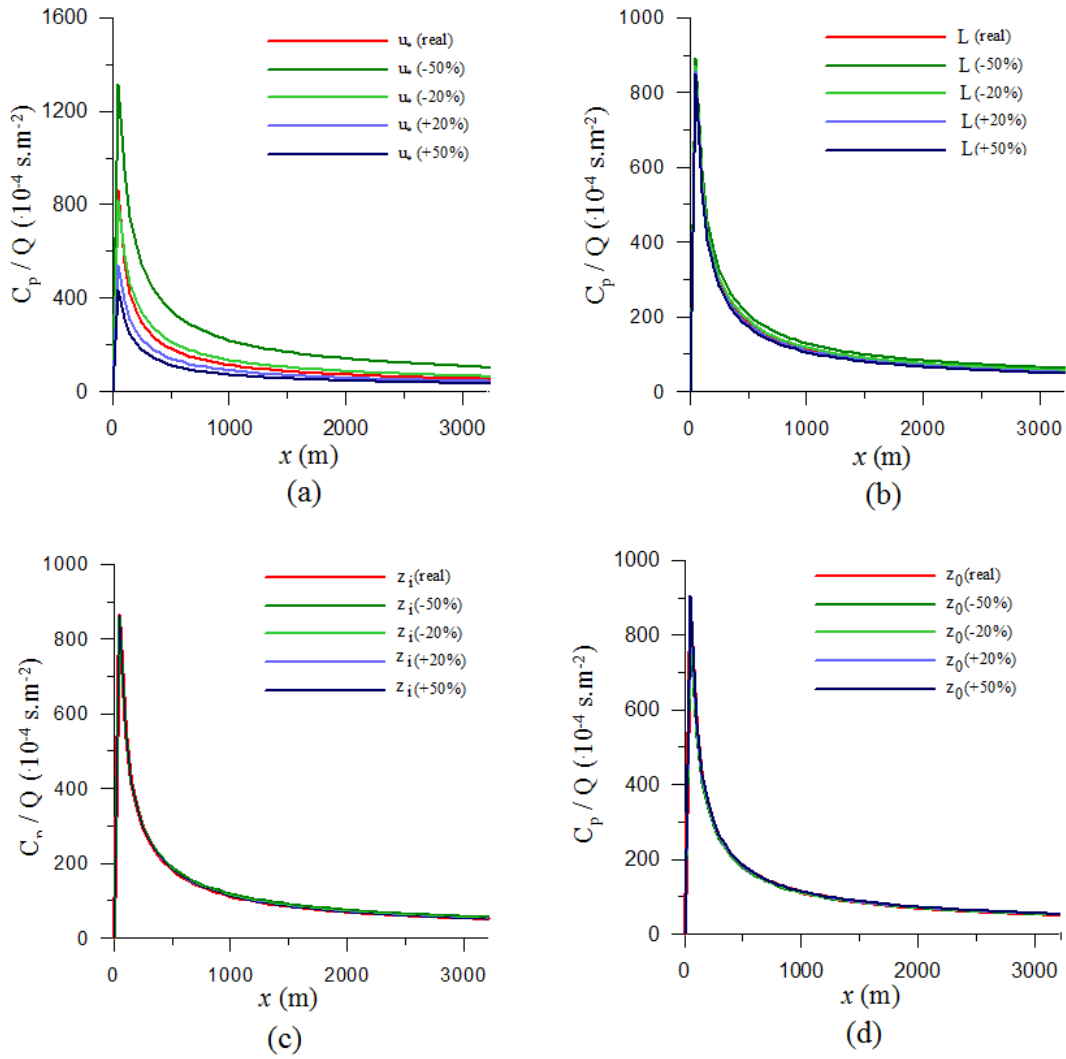


Figura 8.8: Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano, com e sem as variações da velocidade de atrito  $u_*$  (a), da escala de velocidade convectiva vertical  $w_*$  (b), do comprimento de Obukhov  $L$  (c), da altura da CLA  $z_i$  (d) e do comprimento de rugosidade  $z_0$  (e), para o experimento 2 de Hanford.

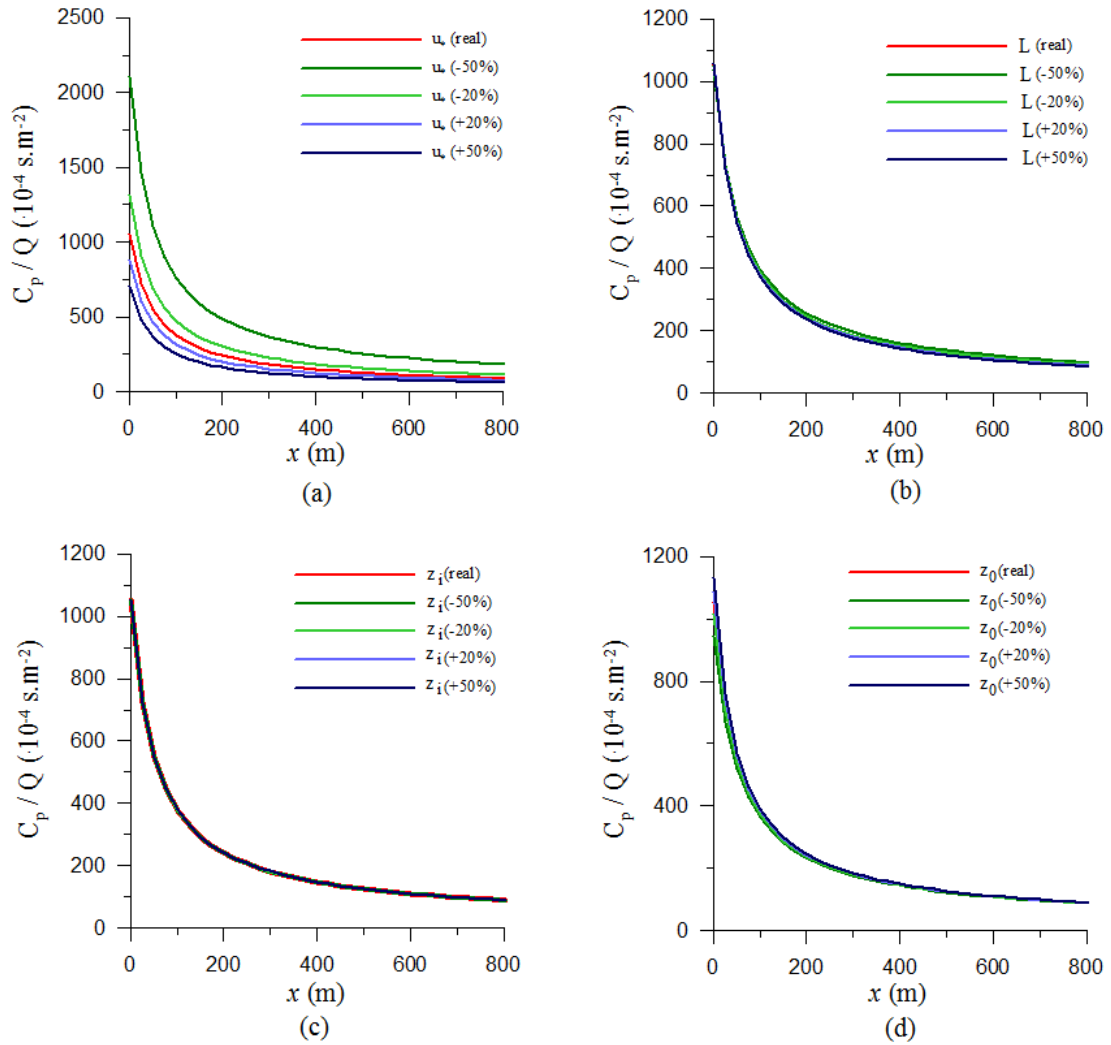


Figura 8.9: Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano, com e sem as variações da velocidade de atrito  $u_*$  (a), da escala de velocidade convectiva vertical  $w_*$  (b), do comprimento de Obukhov  $L$  (c), da altura da CLA  $z_i$  (d) e do comprimento de rugosidade  $z_0$  (e), para o experimento 56 de Prairie Grass.

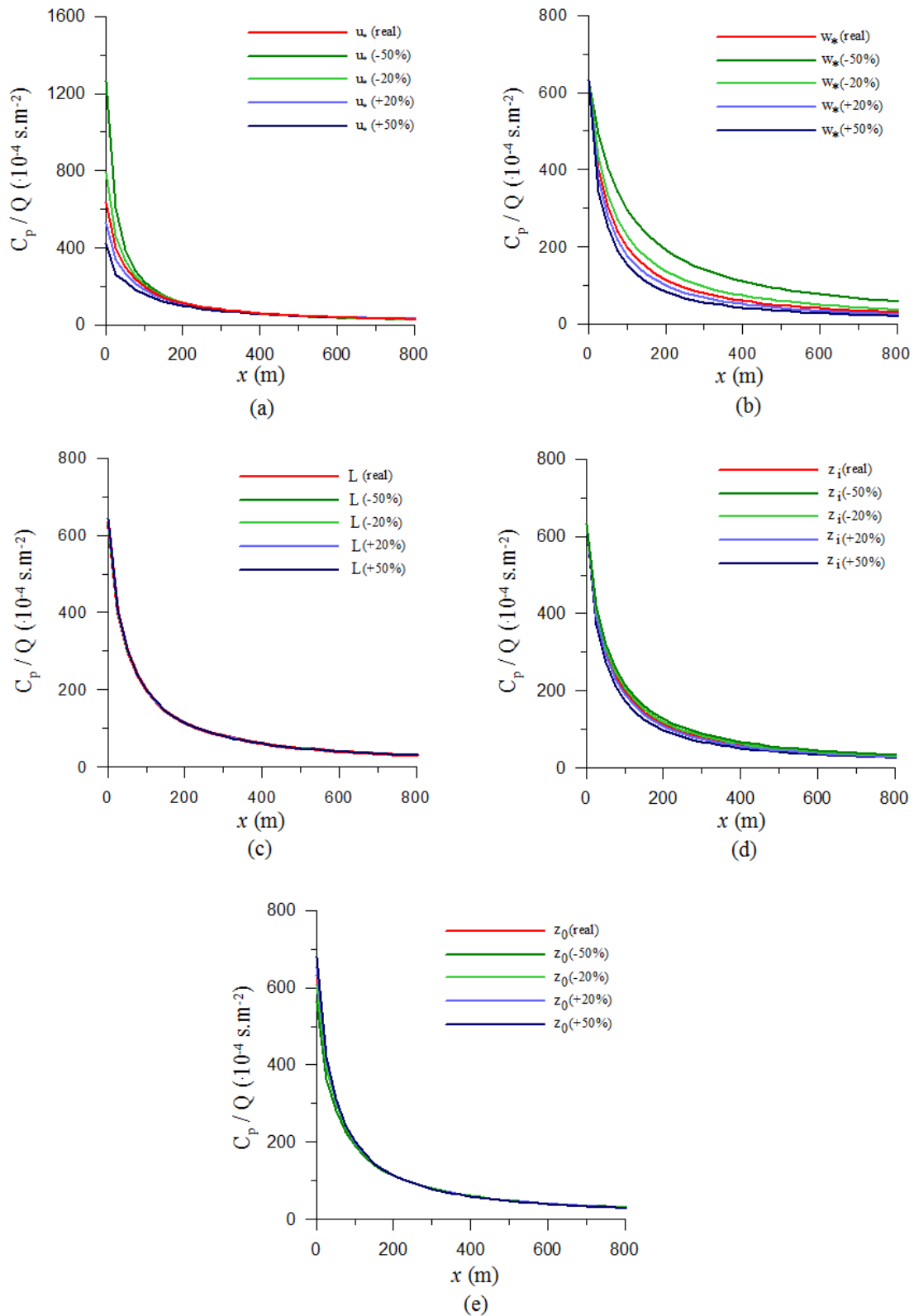


Figura 8.10: Perfil longitudinal de concentração integrada normalizada pela intensidade da fonte, ao nível da superfície, previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano, com e sem as variações da velocidade de atrito  $u_*$  (a), da escala de velocidade convectiva vertical  $w_*$  (b), do comprimento de Obukhov  $L$  (c), da altura da CLA  $z_i$  (d) e do comprimento de rugosidade  $z_0$  (e), para o experimento 61 de Prairie Grass.

# Capítulo 9

## Conclusão

Neste trabalho foi proposto e avaliado um modelo numérico, bidimensional, transiente para simular a dispersão de poluentes emitidos na CLA, sobre terreno plano, por uma fonte contínua.

Uma das principais preocupações no desenvolvimento de modelos de simulação computacional para monitoramento da qualidade do ar, está relacionada com o aumento da eficiência computacional sem o comprometimento dos resultados obtidos. Assim, no modelo proposto, a solução numérica da equação da advecção-difusão transiente foi obtida utilizando-se um esquema Semi-Lagrangeano de três níveis de tempo para a discretização do termo advectivo e um esquema implícito para discretização do termo difusivo. Desta forma, garantimos o aumento da eficiência computacional devido a elevada estabilidade numérica, característica dos modelos Lagrangeanos, e resolução regular do domínio, característica dos modelos Eulerianos.

O interesse no desenvolvimento desse modelo baseia-se na possibilidade de estudo dos aspectos transientes do problema de poluição atmosférica, avaliando a evolução da pluma, dos valores e posições dos picos de concentração e da mudança na sua estrutura sob diferentes condições de estabilidade.

Para avaliar o desempenho do modelo em cenários reais, foi considerado o perfil logarítmico para o campo de vento [10] e implementadas duas formulações para a difusividade turbulenta vertical para cada condição de estabilidade atmosférica. O usuário tem a possibilidade de escolher qual das parametrizações será utilizada, a formulação proposta por Degrazia *et al.* [52] ou a formulação proposta por Ulke [53].

Simulações foram conduzidas utilizando-se as duas parametrizações para a difusividade turbulenta vertical e duas configurações de resolução vertical. Os valores de concentração preditos pelo modelo foram comparados com os dados coletados durante os experimentos de Copenhagen, de Cabauw, de Hanford e de Prairie Grass. Os dois primeiros são expe-

rimentos de fonte elevada, enquanto que os dois últimos são experimentos de fonte baixa. Ambos são conhecidos e consagrados na literatura e amplamente utilizados para validação de modelos de dispersão atmosférica. Os resultados mostraram que não houve diferenças significativas entre as soluções obtidas com as diferentes parametrizações, embora as formulações propostas por Degrazia *et al.* [52] tenham apresentado resultados melhores para a maioria dos experimentos e condições de estabilidade. Como já era esperado, a implementação de grades mais refinadas apresenta melhor concordância entre os valores de concentração previstos e observados. Além disso, para as simulações dos experimentos de fonte elevada, os resultados obtidos para condições estáveis possuem uma qualidade bastante inferior em relação aos obtidos para condições de instabilidade atmosférica. Entretanto, para as simulações dos experimentos de fonte baixa, os resultados para ambas as condições de estabilidade atmosférica são comparáveis.

Conforme citado anteriormente, espera-se que a solução da equação da advecção-difusão, sujeita às condições de contorno descritas no Capítulo 3, evolua para o regime estacionário. Desta forma, embora o modelo desenvolvido seja transiente, o objetivo inicial foi verificar se as simulações numéricas realizadas com a aplicação do método Semi-Lagrangeano seriam capazes de replicar esta evolução para a estacionaridade, mantendo a estabilidade do processo iterativo. Pela análise dos resultados pode-se observar que o modelo simula satisfatoriamente a condição de estacionaridade e o processamento numérico se mantém estável durante todo o período de integração.

Para entender melhor as vantagens do modelo Semi-Lagrangeano, é necessário observar que a condição de estabilidade numérica impõe uma restrição ao método utilizado em relação à questão da escolha do passo de tempo. As simulações realizadas com o modelo proposto mostraram que, mesmo para passos de tempo maiores do que os permitidos em modelos Eulerianos explícitos, ou seja, para números de Courant maiores do que a unidade, o procedimento numérico Semi-Lagrangeano é estável. Como consequência, este método demanda menos esforço computacional mantendo a estabilidade do processo numérico. Este é um resultado importante, pois demonstra que o objetivo principal do trabalho foi atingido.

Vale ressaltar que a maioria dos modelos de solução analítica, produz resultados apenas para a concentração ao nível superficial, que são usualmente utilizados em aplicações regulatórias de qualidade do ar. Por outro lado, o modelo aqui apresentado permite a representação completa da distribuição da substância contaminante no domínio computacional, possibilitando uma análise mais completa do comportamento da pluma, que pode ser útil tanto para avaliações operacionais quanto para o aumento do conhecimento sobre problemas de dispersão atmosférica.

Os resultados obtidos para o problema transiente de Copenhagen também podem ser considerados como adequados. Para as amostras de dados simulados pelo modelo Semi-Lagrangeano, para todos os períodos de medidas, os índices estatísticos calculados estão dentro dos limites estabelecidos por Chang e Hanna [63]. Destacamos que não foram encontrados na literatura outros dados de experimentos que permitissem simulações transientes além do experimento de Copenhagen.

Com a finalidade de verificar se o modelo fornece resultados satisfatórios, foi feita uma comparação dos valores preditos pelo modelo Semi-Lagrangeano para as simulações do experimento de Copenhagen, de Cabauw, de Hanford e de Prairie Grass, com as soluções obtidas por outros autores para os mesmos experimentos. A análise estatística mostrou que os dados do modelo proposto concordam muito bem com os dados observados e com os resultados dos outros modelos. Todos os valores dos índices estatísticos estão dentro de intervalos característicos e estabelecidos por Chang e Hanna [63] como aceitáveis.

Também foi feito um estudo para avaliar a sensibilidade do modelo com relação a variações em seus parâmetros de entrada. Para tanto, simulações variando-se, individualmente, os valores da velocidade de atrito ( $u_*$ ), da velocidade convectiva vertical ( $w_*$ ), do comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ), da altura da CLA ( $z_i$ ) e do comprimento de rugosidade aerodinâmica ( $z_0$ ) foram conduzidas. Pelos resultados observamos que, para os experimentos de fonte elevada (Copenhagen e Cabauw), variações nos parâmetros ( $u_*$ ), ( $w_*$ ) e ( $z_i$ ) afetam significativamente os valores de concentração preditos pelo modelo, enquanto que, para os experimentos de fonte baixa (Hanford e Prairie Grass) nota-se que os valores de concentração superficial são pouco influenciados pelas variações de  $z_i$ , predominando a influência de variações de  $u_*$ , indicando uma sensibilidade maior do modelo em relação as variações nesse parâmetro.

Levando em conta as simulações numéricas e as comparações apresentadas, acreditamos que o método Semi-Lagrangeano é um método promissor para a solução da equação de advecção-difusão para a dispersão de poluentes na CLA. O modelo desenvolvido pode ser aplicado como modelo regulatório de qualidade do ar e, até mesmo, contribuir para avaliar o desempenho de diferentes parametrizações da turbulência.

Como sugestão de futuros trabalhos pretende-se implementar no modelo o levantamento de pluma e acoplar um modelo de crescimento da CLA. Além disso, pretende-se aplicar o modelo Semi-Lagrangeano para avaliar diferentes formulações para o coeficiente de difusão turbulenta vertical presentes na literatura.



# Bibliografia

- [1] Zannetti, P. Air Pollution Modelling. Computational Mechanics Publications, Southampton, 1990.
- [2] Moreira, D. M., Tirabassi, T., Moraes, M. R., 2008. Meteorologia e poluição atmosférica. Ambiente e Sociedade, v. 11, pp. 1 – 13, 2008.
- [3] Ewing, E., Wang, H. A summary of numerical methods for time-dependent advection dominated partial differential equations. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 128, pp. 423 – 445, 2001.
- [4] Casulli, V., Cheng, R. T. Stability analysis of Eulerian-Lagrangian methods for the one-dimensional shallow-water equations. Applied Mathematical Modelling, v. 14, pp. 122 – 131, 1990.
- [5] Stull, R. B., An Introduction to Boundary Layer Meteorology. Boston: Kluwer Academic Publishers, 666 p., 1988.
- [6] Garratt, J. R. The atmospheric boundary layer. Cambridge: Cambridge University Press, 316 p., 1992.
- [7] Holtslag, A. A. M., van Ulden, A. P. A simple scheme for daytime estimation of surface fluxes from routine weather data. J. Clim. Appl. Meteor., vol. 22, pp. 517 – 529, 1983.
- [8] Weil, J. C., Brower, R. P. An update gaussian plume model for tall stacks. JAPCA, vol. 34, pp. 818 – 827, 1984.
- [9] van Ulden, A. P., Holtslag, A. A. M. Estimation of atmospheric boundary layer parameters for diffusion applications. J. Clim. Appl. Meteor., vol. 24, pp. 1196 – 1207, 1985.
- [10] Arya, S. P. Air Pollution Meteorology and Dispersion. Oxford University Press, Inc., 310 p., 1999.

- [11] Blackadar, A. K. *Turbulence and Diffusion in the Atmosphere: Lectures in Environmental Sciences*. Springer, Berlin, 185pp, 1997.
- [12] Roberts, O. F. T. The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. *Proc. Roy. Soc. London*, A104, pp. 640 – 654, 1923.
- [13] Nieuwstadt, F. T. M. An analytic solution of the time-dependent one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment*, vol. 14, pp. 1361 – 1364, 1980.
- [14] Sharan, M., Yadav, A. K., Singh, M. P., Agarwal, P., Nigam, S. A Mathematical Model for the Dispersion of Air Pollutants in Wind Conditions. *Atmospheric Environment*, vol. 30, pp. 1209 – 1220, 1996.
- [15] Vilhena, M. T., Rizza, U., Degrazia, G. A., Mangia, C., Moreira, D. M., Tirabassi, T. An analytical air pollution model: development and evaluation. *Contr. Atmos. Phys.*, vol. 71, pp. 315 – 320, 1998.
- [16] Wortmann, S., Vilhena, M. T., Moreira, D. M., Buske, D. A New Analytical Approach to Simulate the Pollutant Dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment*, vol. 39, pp. 2171 – 2178, 2005.
- [17] Moreira, D. M., Vilhena, M. T. M. B., Buske, D., Tirabassi, T. The GILTT solution of advecção-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL. *Atmospheric Environment*, vol. 40, pp. 3186 – 3194, 2006.
- [18] Gonçalves, G. A., Quadros, R. S., Buske, D. An Analytical Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer. *Journal of Environmental Protection*, vol. 4, pp. 57 – 64, 2013.
- [19] Cotta, R. M. *Integral transforms in computational heat and fluid flow*. CRC Press, Inc., Florida, USA, 1993.
- [20] Armani, F. A. S., Almeida, R. C. de, Dias, N. L. da C. Statitical evaluation of a new air dispersion model against AERMOD using the Praire Grass data set. *Journal of the Air e Waste Management Association*, vol. 64, pp. 219 – 226, 2014.
- [21] Carvalho, J. C. Estudo dos processos de transporte e difusão na camada limite planetária utilizando os modelos RAMS e SPRAY: Aplicação ao caso do experimento TRACT. Tese de doutorado, IAG-USP, 1999.
- [22] Uhlenbeck, G., Ornstein, L. S., 1930. On the Theory of the Brownian Motion. *Physical Review*, vol. 36, 1930.

- [23] Wilson, J. D., Legg, B. J., Thomson, D. J. Calculation of particle trajectories in the presence to a gradient in turbulent-velocity variance. *Boundary Layer Meteorology*, vol. 27, pp. 163 – 169, 1983.
- [24] Legg, B., Raupach, M. Markov chain simulation of particle dispersion in inhomogeneous flows: The mean drift velocity induced by a gradient in eulerian velocity variance. *Boudary Layer Meteorology*, vol. 24, pp. 3 – 13, 1982.
- [25] Thomson, D. J. Randon walk modelling of diffusion in inhomogeneous turbulence. *Quart. J. R. Meteorology Soc.*, vol. 110, pp. 1107 – 1120, 1984.
- [26] van Dop, H., Nieuwstad, F. T. M., Hunt, J. C. R. Randon walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows. *Physics Fluids*, vol. 28, pp. 1639 – 1653, 1985.
- [27] Carvalho, J. C., Vilhena, M. T., Thompson, M. An iterative langevin solution for turbulent dispersion in the atmosphere. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 206, pp. 534 – 548, 2007.
- [28] Mello, K. B. Simulação da dispersão de poluentes na camada limite planetária através da solução da equação de Langevin pelo método de decomposição. Tese de doutorado. PROMEC-UFRGS, 2010.
- [29] Turner, D. B. *Workbbbok of Atmospheric Dispersion Estimates*. U.S. Environmental Protection Agency (Office of Air Programs), 1970.
- [30] Degrazia, G. A. Modelling dispersion from elevated sources in a planetary boundary layer dominated by moderate convection. *II Nuovo Cimento*, vol. 21C, pp. 345 – 353, 1998.
- [31] Hanna, S. R. *et al.* Evaluation of the ADMS, AERMOD and ISC3 dispersion models with the Optex, Duke, Forest, Kincaid, Indianapolis and Lovett Field data sets. *International Journal of Environment and Pollution*, v. 16, pp. 301 – 314, 2001.
- [32] Environmental Protection Agency (EPA). *AERMOD: Description of model formulation*. EPA-454/R-03-004, 2004.
- [33] Carruthers, D. J., Edmunds H. A., Ellis, K. L., McHugh, C. A., Davies, B. M., Thomson, D. J. The Atmospheric Dispersion Modeling System (ADMS): comparisons with data from the Kincaid experiment. *Journal Environment and Pollution*, vol. 5, pp. 111 – 120, 1995.

- [34] Olesen, H. R., Løfstrøm, P., Berkowics, R., Jensen, A. B. An Improved Dispersion Model for Regulatory Use - The OML Model. *Air Pollution Modeling and Its Application IX - NATO Challenges of Modern Society*, vol. 17, pp. 29 – 38, 1992.
- [35] Berkowics, R., Olesen, H. R., Torp, U. The Danish Gaussian Air Pollution Model (OML): Description, Test and Sensitivity Analysis in View of Regulatory Applications. *Air Pollution Modeling and Its Application IX - NATO Challenges of Modern Society*, vol. 10, pp. 453 – 481, 1986.
- [36] Hanna, S. R. Paine, R. J. Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) Development and Evaluation. *Journal Applied Meteorology and Climatology*, vol. 28, pp. 206–224, 1989.
- [37] Scire, J. S, Francoise, R. R., Mark, E. F., Yamartino, R. J. A. User's Guide for the CALMET Meteorological Model (Version 5), Earth Tech, Inc, 2000.
- [38] Staniforth, A., Côté, J. Semi-Lagrangian Integration Schemes for Atmospheric Models - A Review. *Monthly Weather Review*, vol. 119, pp. 2206 – 2223, 1991.
- [39] Sawyer, J. S. A Semi-Lagrangian method of solving the vorticity advection equation. *Tellus*, vol. 15, pp. 336 – 342, 1963.
- [40] Winn-Nielsen, A. On the application of trajectory methods in numerical forecasting. *Tellus*, vol. 11, pp. 180 – 196, 1959.
- [41] Robert, A. A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Atmosphere-Ocean*, vol. 19, pp. 35 – 46, 1981.
- [42] Pudykiewics, J., Benoit, R., Staniforth, A. Preliminary results from a partial LRTAP model based on an existing meteorological forecast model. *Atmos. Ocean*, vol. 23, pp. 267 – 303, 1985.
- [43] McDonald, A. Accuracy of multiply-upstream, semi-Lagrangian advective schemes. *Mon. Wea. Rev.*, vol. 112, pp. 1267 – 1275, 1984.
- [44] Pudykiewics, J., Staniforth, A. Some properties and comparative performance of the semi-Lagrangian method of Robert in the solution of the advection-diffusion equation. *Atmos. Ocean*, vol. 22, pp. 283 – 308, 1984.
- [45] Hildebrand, F. B., *Introduction to Numerical Analysis*. 2ed. Dover Publications, Inc., New York, 1987.
- [46] Bates, J. R., McDonald, A. Multiply-upstream, semi-Lagrangian advective schemes: Analysis and applications to a multilevel primitive equation model. *Mon. Wea. Rev.*, vol. 112, pp. 1831 – 1842, 1982.

- [47] Purser, R. J., Leslie, L. M. A semi-implicit semi-Lagrangian finite-difference scheme using high-order spatial differencing on a nonstaggered grid. *Mon. Wea. Rev.*, vol. 116, pp. 2069 – 2080, 1988.
- [48] Rizza, U., Gioia, G., Mangia, C., Marra, G. P. Development of a grid-dispersion model in a large-eddy-simulation-generated planetary boundary layer. *IL NUOVO CIMENTO*, vol. 26, pp. 297 – 309, 2003.
- [49] Willis, G. E., Deardorff, J. W. A Laboratory study of dispersion from an elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, vol. 12, pp. 1305 – 1311, 1978.
- [50] Willis, G. E., Deardorff, J. W. A Laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer. *Atmospheric Environment*, vol. 15, pp. 109 – 117, 1981.
- [51] Campos, C. R. J. *Micrometeorologia: Tópicos Gerais*. Editora e Gráfica Universitária da UFPel: Pelotas, 2004.
- [52] Degrazia, G. A., Rizza, U., Mangia, C., Tirabassi, T. Validation of a new turbulent parameterization for dispersion models in convective conditions. *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 85, pp. 243 – 254, 1997.
- [53] Ulke, A. G., New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment*, vol. 34, pp. 1029 – 1042, 2000.
- [54] Holtslag, A. A. M., Moeng, C. H., Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective atmospheric boundary layer. *Journal of Atmospheric Sciences*, vol. 48, pp. 1690 – 1698, 1991.
- [55] Fortuna, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. 2ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2012.
- [56] Gryning, S. E., Lyck, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, vol. 23, pp. 651 – 660, 1984.
- [57] Gryning, S. E., Holtslag, A., Irwing, J., Silversten, B. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. *Atmospheric Environment*, vol. 21, pp. 79 – 89, 1987.
- [58] Tirabassi, T., Rizza, U. Boundary layer parameterization for a non-Gaussian puff model. *Journal of Applied Meteorology*, vol. 36, pp. 1031 – 1037, 1997.

- [59] Agterberg, R., Nieuwstadt, F. T. M., Duuren, van H., Hasselton, A. J., Krijt, G. D. Dispersion Experiments With Sulphur Hexafluoride From The 213m High Meteorological Mast At Cabauw In The Netherlands. Royal Netherlands Meteorological Institute, De Bilt, The Netherlands. 130 p., 1983.
- [60] Van Duuren, H., Nieuwstadt, F. T. M. Dispersion experiments from the 213 m high meteorological mast at Cabauw in the Netherlands. Proceedings of the 14th International Colloquium, Paris, France May 5-8. Benarie (Ed.) Studies in Environmental Science, Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam, v. 8, pp. 77 – 90, 1980.
- [61] Doran, J. C., Horst, T. W. An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements. Atmospheric Environment, vol. 19, pp. 939 – 951, 1985.
- [62] Barad, M. L. E. Projeto Prairie-Grass: A field program in Diffusion. Geophysical Research Paper. Air Force Cambridge Research Centre, USA, n<sup>o</sup> 59, vol I e II, 1958.
- [63] Chang, J. C., Hanna, S. R. Air quality model performance evaluation. Meteorological and Atmospheric Physics. v. 87, pp. 167 – 196, 2004.
- [64] Moreira, D. M., Degrazia, G. A., Vilhena, M. T. M. B. Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model. II Nuovo Cimento, vol. 22C, pp. 685 – 691, 1999.
- [65] Moreira, D. M., Carvalho, J. C., Goulart, A. A comparison of two turbulent dispersion parameterisation in the stable boundary layer by using Lagrangian and Eulerian model. Revista Brasileira de Geofísica, vol. 20, pp. 103 – 112, 2002.

## Anexo A

Tabela A1: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $u_*$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	1900	6,48	7,55	6,86	6,19	5,70
	3700	2,31	4,08	4,03	3,71	3,52
2	2100	5,38	4,96	4,59	4,01	3,49
	4200	2,95	2,55	2,50	2,42	2,31
3	1900	8,20	9,70	8,89	8,04	7,30
	3700	6,22	7,88	5,18	4,80	4,54
	5400	4,30	5,09	4,73	3,54	3,20
4	4000	11,66	24,91	14,84	11,09	9,67
5	2100	6,72	12,10	9,18	6,54	5,11
	4200	5,84	8,12	6,71	5,48	4,78
	6100	4,97	2,60	5,42	4,57	4,12
6	2000	3,96	4,72	4,10	3,21	2,65
	4200	2,22	2,54	2,39	2,18	2,04
	5900	1,83	1,91	1,79	1,68	1,61
7	2000	6,70	4,46	4,35	3,98	3,79
	4100	3,25	2,27	2,21	2,14	2,14
	5300	2,23	1,82	1,74	1,67	1,69
8	1900	4,16	6,46	5,78	5,07	4,77
	3600	2,02	5,10	3,63	3,15	3,02
	5300	1,52	4,81	2,98	2,40	2,26
9	2100	4,58	4,58	4,28	3,82	3,31
	4200	3,11	2,33	2,29	2,27	2,15
	6000	2,59	1,65	1,62	1,62	1,57

Tabela A2: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela A1.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,03	0,05	-0,04	0,87	1,0
-50%	-0,23	0,40	-0,59	0,79	0,86
-20%	-0,06	0,06	-0,19	0,86	1,0
+20%	0,09	0,05	0,07	0,87	1,0
+50%	0,19	0,08	0,23	0,86	0,87



Tabela A3: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $w_*$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	1900	6,48	10,03	7,60	5,66	4,75
	3700	2,31	6,63	4,61	3,32	2,80
2	2100	5,38	5,59	4,90	3,77	3,14
	4200	2,95	4,33	3,00	2,07	1,67
3	1900	8,20	12,71	9,90	7,36	6,16
	3700	6,22	8,60	5,95	4,29	3,63
	5400	4,30	6,40	4,37	3,26	2,74
4	4000	11,66	16,19	13,51	11,97	11,57
5	2100	6,72	8,86	7,85	7,40	6,89
	4200	5,84	7,71	6,72	5,45	4,81
	6100	4,97	7,05	5,60	4,43	3,87
6	2000	3,96	3,73	3,88	3,31	2,89
	4200	2,22	3,58	2,70	1,97	1,63
	5900	1,83	2,97	2,09	1,48	1,22
7	2000	6,70	6,53	4,95	3,54	2,89
	4100	3,25	4,09	2,68	1,81	1,47
	5300	2,23	3,27	2,10	1,42	1,16
8	1900	4,16	8,34	6,26	4,62	3,88
	3600	2,02	5,58	3,89	2,90	2,53
	5300	1,52	4,17	2,95	2,36	2,19
9	2100	4,58	5,35	4,62	3,52	2,92
	4200	3,11	4,06	2,78	1,90	1,53
	6000	2,59	3,08	2,00	1,34	1,08

Tabela A4: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela A3.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,03	0,05	-0,04	0,87	1,0
-50%	-0,36	0,21	-0,27	0,84	0,82
-20%	-0,10	0,04	-0,11	0,87	1,0
+20%	0,14	0,08	0,01	0,86	1,0
+50%	0,28	0,14	0,07	0,84	0,82

Tabela A5: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $L_*$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	1900	6,48	6,35	6,43	6,55	6,72
	3700	2,31	3,80	3,81	3,90	3,97
2	2100	5,38	4,24	4,27	4,33	4,41
	4200	2,95	2,44	2,45	2,46	2,49
3	1900	8,20	8,34	8,40	8,53	8,69
	3700	6,22	4,91	4,94	4,99	5,07
	5400	4,30	3,64	3,66	3,72	3,80
4	4000	11,66	12,24	12,39	12,73	13,24
5	2100	6,72	7,62	7,65	7,80	8,10
	4200	5,84	5,96	6,01	6,12	6,23
	6100	4,97	4,90	4,98	5,07	5,1
6	2000	3,96	3,57	3,59	3,65	3,73
	4200	2,22	2,27	2,28	2,29	2,32
	5900	1,83	1,72	1,73	1,74	1,75
7	2000	6,70	4,09	4,12	4,18	4,24
	4100	3,25	2,10	2,16	2,17	2,19
	5300	2,23	1,68	1,69	1,70	1,71
8	1900	4,16	5,23	5,27	5,36	5,48
	3600	2,02	3,24	3,27	3,33	3,41
	5300	1,52	2,51	2,54	2,62	2,73
9	2100	4,58	3,98	4,00	4,06	4,13
	4200	3,11	2,25	2,26	2,27	2,29
	6000	2,59	1,60	1,60	1,61	1,62

Tabela A6: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela A5.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,03	0,05	-0,04	0,87	1,0
-50%	0,04	0,05	-0,02	0,87	1,0
-20%	0,03	0,05	-0,03	0,87	1,0
+20%	0,02	0,05	-0,05	0,87	1,0
+50%	-0,04	0,05	-0,09	0,86	1,0

Tabela A7: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $z_i$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	1900	6,48	6,76	6,45	6,61	6,78
	3700	2,31	4,47	3,92	3,83	3,93
2	2100	5,38	4,90	4,45	4,17	4,02
	4200	2,95	3,02	2,60	2,35	2,52
3	1900	8,20	10,66	9,11	7,92	7,55
	3700	6,22	7,53	5,38	4,51	4,17
	5400	4,30	6,97	4,16	3,26	2,93
4	4000	11,66	24,56	16,64	10,95	9,42
5	2100	6,72	8,90	8,07	7,60	7,35
	4200	5,84	7,28	6,35	5,97	5,86
	6100	4,97	6,44	5,30	4,87	4,72
6	2000	3,96	4,54	3,83	3,54	3,44
	4200	2,22	2,89	2,46	2,20	2,11
	5900	1,83	2,31	1,90	1,65	1,56
7	2000	6,70	4,99	4,29	3,97	3,83
	4100	3,25	2,82	2,31	2,02	1,90
	5300	2,23	2,35	1,84	1,56	1,45
8	1900	4,16	7,57	5,81	5,05	4,69
	3600	2,02	6,59	3,84	3,01	2,80
	5300	1,52	6,57	3,25	2,24	2,03
9	2100	4,58	4,67	4,15	3,92	3,76
	4200	3,11	2,83	2,38	2,18	2,07
	6000	2,59	2,14	1,72	1,52	1,43

Tabela A8: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela A7.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,03	0,05	-0,04	0,87	1,0
-50%	-0,31	0,38	-0,51	0,76	0,86
-20%	-0,06	0,07	-0,21	0,85	0,95
+20%	0,08	0,05	0,02	0,86	1,0
+50%	0,13	0,07	0,10	0,85	1,0

Tabela A9: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $z_0$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	1900	6,48	6,21	6,40	6,54	6,62
	3700	2,31	3,73	3,81	3,85	3,91
2	2100	5,38	4,07	4,22	4,36	4,44
	4200	2,95	2,42	2,44	2,47	2,49
3	1900	8,20	7,82	8,30	8,59	8,78
	3700	6,22	4,64	4,88	5,04	5,16
	5400	4,30	3,40	3,61	3,72	4,46
4	4000	11,66	10,98	11,95	13,09	13,91
5	2100	6,72	6,64	7,31	8,08	8,45
	4200	5,84	5,61	5,87	6,15	6,30
	6100	4,97	4,65	4,90	5,01	5,11
6	2000	3,96	3,32	3,52	3,73	3,87
	4200	2,22	2,23	2,26	2,32	2,37
	5900	1,83	1,70	1,72	1,76	1,79
7	2000	6,70	3,94	4,03	4,19	4,24
	4100	3,25	2,10	2,11	2,18	2,20
	5300	2,23	1,64	1,65	1,71	1,73
8	1900	4,16	5,05	5,22	5,40	5,53
	3600	2,02	3,11	3,22	3,36	3,47
	5300	1,52	2,36	2,49	2,66	2,79
9	2100	4,58	3,88	3,96	4,08	4,15
	4200	3,11	2,28	2,26	2,28	2,29
	6000	2,59	1,62	1,60	1,61	1,63

Tabela A10: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela A9.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,03	0,05	-0,04	0,87	1,0
-50%	0,09	0,05	0,08	0,87	1,0
-20%	0,05	0,05	-0,06	0,87	1,0
+20%	0,01	0,05	-0,08	0,87	1,0
+50%	-0,02	0,06	-0,12	0,86	1,0

## Anexo B

Tabela B1: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $u_*$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Obs. ( $10^{-4}sm^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1A	3150	4,97	5,30	3,32	2,21	1,77
1B	3160	2,27	5,12	3,19	2,14	1,70
2A	3400	2,17	4,56	2,86	1,92	1,54
2B	3310	1,45	3,63	2,28	1,53	1,24
3A	3160	5,23	8,23	5,16	3,45	2,76
4A	3150	0,24	0,14	0,13	0,11	0,10
4B	3160	0,49	0,28	0,34	0,32	0,3
5A	3880	8,16	19,08	11,92	7,95	6,36
5B	3400	7,88	20,13	12,36	8,13	6,46
6A	3280	6,79	16,19	10,11	6,75	5,43
6B	3310	6,49	19,02	11,81	7,57	6,11
7A	3160	2,17	4,94	3,08	2,05	1,64
8A	4100	2,36	6,83	4,28	2,86	2,29
8B	4300	1,52	6,97	4,36	2,91	2,33
9A	4250	2,69	4,58	2,85	1,89	1,51
9B	4300	2,44	4,80	2,99	1,98	1,58
10A	3250	1,39	2,39	1,51	1,02	0,83
10B	3480	2,54	2,34	1,48	1,00	0,81
13A	3160	11,27	20,38	26,55	17,86	14,33
13B	3160	11,34	24,89	15,47	10,27	8,20
14A	4200	10,66	16,64	10,39	6,91	5,52
14B	3950	10,94	22,88	14,29	9,51	7,60
15A	3110	7,90	21,51	13,46	8,96	7,13
15B	3200	3,46	15,91	9,89	6,57	5,26

Tabela B2: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela B1.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
Semi-Lagrangeano (Degrazia)	-0,16	0,23	-0,30	0,86	0,84
+50%	0,20	0,15	-0,02	0,88	0,83
+20%	-0,01	0,19	-0,24	0,88	0,83
-20%	-0,41	0,62	-0,63	0,88	0,87
-50%	-0,75	1,84	-0,81	0,89	0,37

Tabela B3: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $L$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. ( $m$ )	Obs. ( $10^{-4}sm^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1A	3150	4,97	2,50	2,59	2,72	2,82
1B	3160	2,27	2,45	2,53	2,59	2,63
2A	3400	2,17	1,53	2,21	2,39	2,56
2B	3310	1,45	1,60	1,73	1,95	2,18
3A	3160	5,23	3,73	3,95	4,34	4,73
4A	3150	0,24	0,002	0,04	0,24	0,46
4B	3160	0,49	0,015	0,16	0,53	0,82
5A	3880	8,16	9,42	9,50	9,56	9,49
5B	3400	7,88	9,98	9,88	9,75	9,70
6A	3280	6,79	8,20	8,14	7,89	7,54
6B	3310	6,49	8,86	9,35	9,25	9,43
7A	3160	2,17	2,43	2,45	2,46	2,42
8A	4100	2,36	3,15	3,31	3,56	3,78
8B	4300	1,52	3,24	3,38	3,61	3,81
9A	4250	2,69	2,37	2,32	2,23	2,09
9B	4300	2,44	2,48	2,42	2,31	2,16
10A	3250	1,39	0,93	1,09	1,39	1,75
10B	3480	2,54	0,92	1,07	1,35	1,68
13A	3160	11,27	17,80	20,65	21,73	22,03
13B	3160	11,34	12,22	12,32	12,36	12,37
14A	4200	10,66	8,66	8,46	8,13	7,86
14B	3950	10,94	22,88	14,29	9,51	7,60
15A	3110	7,90	21,51	13,46	8,96	7,13
15B	3200	3,46	15,91	9,89	6,57	5,26

Tabela B4: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela B3.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
Semi-Lagrangeano (Degrazia)	-0,16	0,23	-0,30	0,86	0,84
+50%	-0,23	0,30	-0,41	0,87	0,91
+20%	-0,21	0,29	-0,42	0,88	0,91
-20%	-0,17	0,27	-0,41	0,89	0,75
-50%	-0,11	0,17	-0,34	0,90	0,75

Tabela B5: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $z_i$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Obs. ( $10^{-4}sm^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1A	3150	4,97	3,13	2,74	2,56	2,48
1B	3160	2,27	2,80	2,63	2,57	2,52
2A	3400	2,17	2,86	2,37	2,23	2,15
2B	3310	1,45	2,00	1,85	1,77	1,77
3A	3160	5,23	6,33	4,42	3,98	3,86
4A	3150	0,24	0,77	0,14	0,055	0,05
4B	3160	0,49	1,63	0,50	0,24	0,18
5A	3880	8,16	13,80	9,89	8,82	8,54
5B	3400	7,88	17,83	9,97	9,40	9,52
6A	3280	6,79	9,06	8,37	7,93	7,77
6B	3310	6,49	9,95	9,50	9,24	9,22
7A	3160	2,17	2,81	2,56	2,39	2,32
8A	4100	2,36	4,64	3,57	3,32	3,23
8B	4300	1,52	4,87	3,66	3,38	3,27
9A	4250	2,69	2,80	2,41	2,18	2,08
9B	4300	2,44	2,96	2,52	2,26	2,17
10A	3250	1,39	0,91	1,22	1,26	1,28
10B	3480	2,54	0,91	1,20	1,23	1,25
13A	3160	11,27	52,42	27,24	21,61	19,70
13B	3160	11,34	32,35	16,78	12,15	11,57
14A	4200	10,66	16,85	9,84	7,46	6,75
14B	3950	10,94	14,76	12,32	11,03	10,31
15A	3110	7,90	12,57	11,19	10,33	10,13
15B	3200	3,46	10,04	8,52	7,36	7,29

Tabela B6: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela B5.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
Semi-Lagrangeano (Degrazia)	-0,16	0,23	-0,30	0,86	0,84
+50%	-0,14	0,22	-0,35	0,88	0,70
+20%	-0,17	0,30	-0,41	0,87	0,75
-20%	-0,29	0,60	-0,62	0,87	0,75
-50%	-0,65	4,22	-1,13	0,82	0,62



Tabela B7: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $z_0$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Obs. ( $10^{-4}sm^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1A	3150	4,97	2,26	2,52	2,77	2,92
1B	3160	2,27	2,23	2,44	2,64	2,76
2A	3400	2,17	1,88	2,15	2,42	2,58
2B	3310	1,45	1,44	1,70	1,96	2,12
3A	3160	5,23	3,34	3,86	4,37	4,69
4A	3150	0,24	0,076	0,10	0,14	0,17
4B	3160	0,49	0,19	0,28	0,38	0,46
5A	3880	8,16	8,32	9,13	9,90	10,36
5B	3400	7,88	8,80	9,47	10,10	10,48
6A	3280	6,79	7,31	7,84	8,35	8,68
6B	3310	6,49	8,46	9,08	9,52	10,06
7A	3160	2,17	2,22	2,38	2,52	2,61
8A	4100	2,36	2,82	3,22	3,61	3,85
8B	4300	1,52	2,89	3,29	3,67	3,91
9A	4250	2,69	2,14	2,24	2,33	2,36
9B	4300	2,44	2,23	2,33	2,43	2,46
10A	3250	1,39	0,85	1,08	1,34	1,51
10B	3480	2,54	0,84	1,06	1,31	1,47
13A	3160	11,27	18,36	10,33	22,24	23,39
13B	3160	11,34	10,81	11,81	12,81	13,43
14A	4200	10,66	7,64	8,07	8,50	8,77
14B	3950	10,94	10,33	11,05	11,73	12,13
15A	3110	7,90	9,63	10,28	10,95	11,28
15B	3200	3,46	7,48	7,82	8,14	8,24

Tabela B8: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela B7.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
Semi-Lagrangeano (Degrazia)	-0,16	0,23	-0,30	0,86	0,84
+50%	-0,24	0,31	-0,37	0,85	0,83
+20%	-0,20	0,25	-0,33	0,85	0,87
-20%	-0,05	0,10	-0,07	0,87	0,82
-50%	-0,04	0,17	-0,19	0,86	0,78

## Anexo C

Tabela C1: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $u_*$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	100	195,0	565,60	350,90	233,40	186,89
	200	117,0	363,02	225,00	147,87	120,22
	800	37,3	135,21	82,96	54,90	43,90
	1600	21,4	80,95	49,37	32,55	25,98
	3200	13,0	49,12	29,79	19,58	15,60
2	100	519,0	946,40	586,63	389,35	311,01
	200	367,0	628,25	388,92	258,21	206,42
	800	129,0	254,26	156,72	103,76	82,85
	1600	90,80	161,89	99,62	65,89	52,58
	3200	72,20	102,14	64,14	42,39	33,82
3	100	271,0	876,71	542,65	359,96	287,53
	200	181,0	572,69	353,80	234,71	187,64
	800	59,10	223,20	136,84	90,34	72,06
	1600	33,10	138,21	84,44	55,63	44,33
	3200	17,90	84,52	52,98	34,84	27,74
4	100	918,0	1262,81	781,82	518,45	413,89
	200	486,0	847,52	523,75	347,19	277,26
	800	201,0	353,29	217,55	143,89	114,79
	1600	131,0	228,55	140,54	92,87	74,07
	3200	91,5	147,52	91,37	60,34	48,11
5	100	839,0	926,63	573,81	380,68	304,05
	200	424,0	609,63	376,89	250,07	199,89
	800	105,0	241,54	148,42	98,10	78,28
	1600	86,10	151,47	92,84	61,27	48,86
	3200	66,40	93,62	58,98	38,88	30,98
6	100	884,0	790,96	490,17	325,41	260,05
	200	611,0	517,46	320,26	212,74	170,20
	800	134,0	202,11	124,25	82,19	65,62
	1600	61,5	125,30	76,81	50,71	40,46
	3200	31,1	78,93	48,30	31,84	25,39

Tabela C2: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $L$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	100	195,0	342,27	333,78	328,59	326,41
	200	117,0	211,73	204,33	199,72	197,76
	800	37,3	76,49	71,70	68,57	67,21
	1600	21,4	45,66	42,11	39,74	38,68
	3200	13,0	27,70	25,20	23,46	22,67
2	100	519,0	592,99	562,90	542,43	533,17
	200	367,0	380,05	355,63	338,82	331,11
	800	129,0	150,17	137,35	127,97	123,46
	1600	90,80	95,18	86,42	79,64	76,26
	3200	72,20	61,69	55,50	50,46	47,88
3	100	271,0	537,54	516,26	502,49	496,48
	200	181,0	338,90	321,29	309,66	304,51
	800	59,10	129,16	118,98	111,92	108,67
	1600	33,10	79,71	72,61	67,48	65,06
	3200	17,90	50,32	45,36	41,60	39,76
4	100	918,0	796,63	752,64	721,99	707,92
	200	486,0	514,31	478,71	453,94	442,46
	800	201,0	206,76	188,98	175,73	169,23
	1600	131,0	132,56	120,44	110,81	105,91
	3200	91,5	86,72	78,04	70,80	67,02
5	100	839,0	573,58	547,77	530,68	523,10
	200	424,0	364,37	343,26	329,03	322,63
	800	105,0	141,44	129,82	121,53	117,64
	1600	86,10	88,65	80,60	74,56	71,63
	3200	66,40	56,87	51,16	46,66	44,42
6	100	884,0	487,64	467,54	454,43	448,66
	200	611,0	308,29	291,66	280,59	275,66
	800	134,0	117,96	108,41	101,73	98,64
	1600	61,5	72,90	66,28	61,46	59,17
	3200	31,1	46,07	41,50	37,99	36,26

Tabela C3: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $z_i$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	100	195,0	330,54	330,67	330,74	330,77
	200	117,0	201,41	201,56	201,65	201,68
	800	37,3	70,10	69,83	69,91	69,96
	1600	21,4	41,42	40,82	40,72	40,74
	3200	13,0	24,86	24,37	24,09	24,01
2	100	519,0	550,55	550,72	551,23	551,43
	200	367,0	347,63	345,68	346,12	346,34
	800	129,0	137,80	133,00	131,02	130,96
	1600	90,80	86,74	83,64	80,99	80,35
	3200	72,20	55,17	53,30	51,24	50,38
3	100	271,0	507,59	508,02	508,32	508,43
	200	181,0	314,59	314,32	314,65	314,78
	800	59,10	118,47	115,40	114,91	114,92
	1600	33,10	72,96	70,53	69,50	69,09
	3200	17,90	45,08	43,92	43,04	42,38
4	100	918,0	740,31	734,39	735,33	735,71
	200	486,0	477,27	464,37	464,76	465,17
	800	201,0	196,04	183,94	180,10	179,61
	1600	131,0	124,15	117,17	113,40	112,38
	3200	91,5	83,17	75,14	72,83	71,94
5	100	839,0	537,78	537,57	537,97	538,12
	200	424,0	337,29	334,76	335,18	335,35
	800	105,0	131,39	125,55	124,54	124,54
	1600	86,10	81,89	77,78	76,12	75,70
	3200	66,40	51,26	48,98	47,64	47,03
6	100	884,0	459,32	459,72	459,98	460,08
	200	611,0	285,28	285,04	285,34	285,46
	800	134,0	107,87	105,01	104,49	104,58
	1600	61,5	66,68	64,33	63,12	62,99
	3200	31,1	41,34	40,19	39,00	38,70

Tabela C4: Valores de concentração normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, variando o parâmetro meteorológico  $z_0$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	100	195,0	317,30	326,41	334,20	338,37
	200	117,0	196,35	199,95	202,94	204,50
	800	37,3	68,85	69,55	70,12	70,42
	1600	21,4	40,16	40,55	40,88	41,06
	3200	13,0	23,79	24,06	24,31	24,45
2	100	519,0	526,70	543,15	557,44	565,20
	200	367,0	335,21	342,48	348,69	352,01
	800	129,0	128,88	130,98	132,83	133,86
	1600	90,80	80,47	81,89	83,18	83,91
	3200	72,20	51,18	52,18	53,09	53,61
3	100	271,0	486,85	501,32	513,77	520,47
	200	181,0	305,47	311,63	316,82	319,58
	800	59,10	112,69	114,19	115,47	116,16
	1600	33,10	68,25	69,21	70,06	70,53
	3200	17,90	42,20	42,88	43,51	43,86
4	100	918,0	701,92	724,24	743,66	754,23
	200	486,0	449,69	459,70	468,26	472,87
	800	201,0	176,80	179,93	182,71	184,27
	1600	131,0	111,85	113,98	115,91	117,01
	3200	91,5	71,82	73,28	74,61	75,38
5	100	839,0	514,71	530,35	543,87	551,17
	200	424,0	325,02	331,81	337,57	340,64
	800	105,0	122,35	124,19	125,78	126,66
	1600	86,10	75,34	76,57	77,67	78,30
	3200	66,40	47,33	48,19	48,98	49,44
6	100	884,0	440,33	453,57	464,99	471,16
	200	611,0	276,91	282,57	287,35	289,89
	800	134,0	102,52	103,91	105,09	105,73
	1600	61,5	62,22	63,10	63,88	64,32
	3200	31,1	38,56	39,20	39,77	40,10

Tabela C5: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela C1.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,08	0,33	0,30	0,85	0,90
-50%	-0,48	0,52	-0,22	0,85	0,56
-20%	-0,01	0,17	0,25	0,85	0,76
+20%	0,38	0,79	0,63	0,85	0,89
+50%	0,59	1,10	0,83	0,85	0,72

Tabela C6: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela C2.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,08	0,33	0,30	0,85	0,90
-50%	0,003	0,28	0,24	0,85	0,80
-20%	0,06	0,30	0,28	0,85	0,86
+20%	0,10	0,35	0,31	0,85	0,90
+50%	0,12	0,36	0,33	0,85	0,93

Tabela C7: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela C3.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,08	0,33	0,30	0,85	0,90
-50%	0,07	0,32	0,30	0,85	0,86
-20%	0,08	0,33	0,30	0,85	0,90
+20%	0,09	0,33	0,30	0,85	0,90
+50%	0,09	0,33	0,30	0,85	0,90

Tabela C8: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela C4.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	0,08	0,33	0,30	0,85	0,90
-50%	0,12	0,36	0,35	0,85	0,86
-20%	0,10	0,35	0,32	0,85	0,90
+20%	0,08	0,32	0,29	0,85	0,90
+50%	0,06	0,32	0,28	0,85	0,90

## Anexo D



Tabela D1: Valores de concentração normalizados observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo S-L, variando o parâmetro meteorológico  $u_*$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	50	886,38	1312,97	826,41	561,06	524,58
	100	276,59	789,82	499,55	340,64	329,47
	200	69,38	437,66	276,40	188,14	185,70
	400	21,35	223,93	141,30	96,02	96,33
	800	8,01	107,60	67,86	46,06	47,80
11	50	387,14	477,64	370,68	303,04	254,48
	100	223,52	286,78	245,40	214,02	186,54
	200	124,78	156,58	147,18	134,31	122,14
	400	53,96	80,48	80,12	75,88	71,64
	800	19,86	40,94	41,34	39,83	38,52
17	50	1101,10	1649,92	1024,16	680,22	543,52
	100	678,02	1147,65	711,56	473,04	378,52
	200	364,38	746,14	461,32	306,26	245,00
	400	191,88	465,82	286,93	190,06	151,91
	800	110,03	285,65	175,19	115,74	92,40
32	50	1643,75	3773,34	2350,26	1563,74	1249,95
	100	1803,98	2998,89	1864,21	1239,03	990,01
	200	1238,45	2143,92	1330,39	883,43	705,66
	400	774,66	1428,42	885,51	587,70	469,36
	800	553,77	933,00	573,99	380,80	304,07
34	50	323,50	381,44	315,85	236,54	207,62
	100	187,97	228,27	207,27	168,18	153,69
	200	102,76	122,27	120,38	106,50	99,42
	400	44,88	60,57	62,98	60,03	56,89
	800	18,89	28,19	30,43	30,63	29,66
39	50	1189,50	3464,46	2156,43	1434,18	1146,18
	100	713,92	2683,34	1666,80	1107,39	884,71
	200	410,78	1881,13	1166,58	774,42	618,55
	400	211,50	1243,34	770,24	511,03	408,09
	800	39,26	803,59	497,19	329,70	263,23
45	50	565,11	600,40	495,02	400,09	345,85
	100	336,27	357,28	321,23	280,19	254,17
	200	186,43	192,33	185,36	173,13	164,93
	400	82,93	94,72	96,57	95,52	94,90
	800	39,91	43,86	46,45	48,00	49,28
56	50	714,33	1106,35	687,97	457,94	367,21
	100	431,93	760,50	473,19	315,96	254,49
	200	236,41	487,79	302,76	202,00	162,98
	400	127,56	299,48	185,18	123,27	99,46
	800	72,96	180,12	110,85	73,57	59,31
61	50	387,62	390,09	331,22	266,08	224,87
	100	219,33	224,33	206,78	181,56	159,05
	200	126,76	117,60	115,37	110,06	100,42
	400	58,57	57,38	58,81	59,76	56,70
	800	20,69	27,13	28,24	29,85	29,13
68	50	1352,59	2342,81	1454,90	966,25	771,76
	100	1060,68	1684,55	1044,28	693,36	554,02
	200	659,04	1125,44	696,34	461,92	369,03
	400	418,08	722,53	446,09	295,55	236,00
	800	283,18	456,03	280,91	185,86	148,33

Tabela D2: Valores de concentração normalizados observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo S-L, variando o parâmetro meteorológico  $w_*$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	50	886,38	900,90	688,36	524,93	446,66
	100	276,59	588,22	415,59	298,40	246,36
	200	69,38	345,36	229,14	157,24	127,15
	400	21,35	185,02	117,28	78,49	63,04
	800	8,01	93,21	58,13	39,17	31,88
11	50	387,14	445,56	375,90	315,05	284,44
	100	223,52	338,17	264,31	207,64	180,89
	200	124,78	227,66	164,92	122,09	103,18
	400	53,96	136,72	92,87	65,67	54,36
	800	19,86	74,87	48,66	33,62	27,67
17	50	1101,10	817,45	817,45	817,45	817,45
	100	678,02	568,09	568,09	568,09	568,09
	200	364,38	367,98	367,98	367,98	367,98
	400	191,88	228,57	228,57	228,57	228,57
	800	110,03	139,34	139,34	139,34	139,34
32	50	1643,75	1878,00	1878,00	1878,00	1878,00
	100	1803,98	1488,65	1488,65	1488,65	1488,65
	200	1238,45	1061,78	1061,78	1061,78	1061,78
	400	774,66	706,49	706,49	706,49	706,49
	800	553,77	457,84	457,84	457,84	457,84
34	50	323,50	355,03	299,13	250,42	226,19
	100	187,97	273,25	213,92	167,61	145,26
	200	102,76	186,49	135,30	99,79	83,86
	400	44,88	112,52	76,07	53,12	43,41
	800	18,89	60,89	38,79	25,94	20,78
39	50	1189,50	1722,70	1722,70	1722,70	1722,70
	100	713,92	1330,69	1330,69	1330,69	1330,69
	200	410,78	930,87	930,87	930,87	930,87
	400	211,50	614,40	614,40	614,40	614,40
	800	39,26	396,47	396,47	396,47	396,47
45	50	565,11	576,83	487,51	405,72	361,92
	100	336,27	440,26	343,12	265,91	228,14
	200	186,43	297,21	213,24	154,49	127,95
	400	82,93	177,62	118,33	80,90	65,06
	800	39,91	95,39	59,76	39,05	30,74
56	50	714,33	549,67	549,67	549,67	549,67
	100	431,93	378,59	378,59	378,59	378,59
	200	236,41	242,09	242,09	242,09	242,09
	400	127,56	147,87	147,87	147,87	147,87
	800	72,96	88,37	88,37	88,37	88,37
61	50	387,62	403,28	334,22	277,88	251,30
	100	219,33	296,02	227,12	176,59	153,49
	200	126,76	192,06	136,58	99,93	84,03
	400	58,57	110,98	73,86	51,39	42,16
	800	20,69	58,23	36,83	24,79	20,09
68	50	1352,59	1161,30	1161,30	1161,30	1161,30
	100	1060,68	833,31	833,31	833,31	833,31
	200	659,04	555,33	555,33	555,33	555,33
	400	418,08	355,49	355,49	355,49	355,49
	800	283,18	223,68	223,68	223,68	223,68

Tabela D3: Valores de concentração normalizados observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo S-L, variando o parâmetro meteorológico  $L$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	50	886,38	590,77	593,19	598,20	605,01
	100	276,59	345,60	346,57	348,48	350,92
	200	69,38	185,94	186,31	186,99	187,76
	400	21,35	93,77	93,92	94,16	94,40
	800	8,01	46,50	46,59	46,74	46,91
11	50	387,14	341,24	341,59	342,44	343,85
	100	223,52	231,69	231,83	232,17	232,70
	200	124,78	139,90	139,94	140,04	140,18
	400	53,96	76,74	76,76	76,79	76,82
	800	19,86	39,61	39,63	39,65	39,66
17	50	1101,10	846,75	825,66	811,58	805,36
	100	678,02	601,03	577,15	561,67	554,88
	200	364,38	396,92	376,01	362,24	356,14
	400	191,88	251,82	235,12	223,84	218,75
	800	110,03	157,03	144,40	135,65	131,63
32	50	1643,75	1758,20	1861,93	1878,98	1869,21
	100	1803,98	1519,44	1515,38	1460,59	1422,62
	200	1238,45	1186,47	1106,11	1026,34	985,28
	400	774,66	829,30	743,19	678,74	647,40
	800	553,77	544,33	483,34	438,51	416,57
34	50	323,50	271,12	271,52	272,48	274,09
	100	187,97	187,18	187,40	187,93	188,82
	200	102,76	114,50	114,61	114,85	115,24
	400	44,88	62,44	62,49	62,60	62,76
	800	18,89	31,06	31,09	31,14	31,20
39	50	1189,50	1674,97	1724,01	1713,84	1696,73
	100	713,92	1402,70	1363,24	1301,79	1266,05
	200	410,78	1054,41	970,41	900,41	865,85
	400	211,50	718,89	645,16	591,22	565,10
	800	39,26	469,26	417,92	380,22	361,79
45	50	565,11	441,55	442,03	443,19	445,10
	100	336,27	298,89	299,17	299,82	300,87
	200	186,43	178,92	179,08	179,43	179,97
	400	82,93	96,10	96,18	96,37	96,64
	800	39,91	47,28	47,33	47,43	47,55
56	50	714,33	564,11	553,56	546,96	544,14
	100	431,93	394,39	382,83	375,63	372,56
	200	236,41	256,37	245,96	239,36	236,51
	400	127,56	159,78	151,15	145,54	143,08
	800	72,96	97,75	90,99	86,49	84,48
61	50	387,62	301,34	301,81	302,91	304,66
	100	219,33	197,73	197,89	198,25	198,81
	200	126,76	115,08	115,11	115,15	115,20
	400	58,57	60,52	60,52	60,49	60,42
	800	20,69	29,60	29,59	29,57	29,50
68	50	1352,59	1211,39	1177,83	1148,38	1133,68
	100	1060,68	905,19	854,42	817,67	800,54
	200	659,04	619,52	573,76	541,77	526,88
	400	418,08	404,41	369,67	344,97	333,24
	800	283,18	258,92	234,02	215,90	207,17

Tabela D4: Valores de concentração normalizados observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo S-L, variando o parâmetro meteorológico  $z_i$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	50	886,38	647,73	618,24	568,88	519,46
	100	276,59	384,01	363,17	329,71	298,72
	200	69,38	207,70	195,53	177,03	162,13
	400	21,35	103,83	98,03	90,15	85,80
	800	8,01	49,83	47,83	45,93	47,05
11	50	387,14	361,01	350,35	332,07	313,26
	100	223,52	249,53	239,62	223,22	207,32
	200	124,78	152,82	145,49	133,89	123,80
	400	53,96	84,31	79,93	73,49	69,90
	800	19,86	43,05	40,98	38,44	37,75
17	50	1101,10	817,61	817,53	817,33	816,95
	100	678,02	568,29	568,19	567,94	567,48
	200	364,38	368,21	368,10	367,81	367,31
	400	191,88	228,84	228,71	228,38	228,26
	800	110,03	139,60	139,46	139,30	140,18
32	50	1643,75	1878,54	1878,27	1877,59	1876,35
	100	1803,98	1489,34	1489,00	1488,13	1486,54
	200	1238,45	1062,49	1062,14	1061,25	1059,61
	400	774,66	707,16	706,83	705,99	704,45
	800	553,77	458,47	458,16	457,36	455,96
34	50	323,50	289,23	279,57	262,83	244,98
	100	187,97	204,06	194,82	179,21	162,98
	200	102,76	127,23	120,14	108,50	96,92
	400	44,88	70,45	65,93	58,72	51,88
	800	18,89	35,34	32,90	29,14	25,82
39	50	1189,50	1723,22	1722,96	1722,30	1721,11
	100	713,92	1331,33	1331,01	1330,21	1328,76
	200	410,78	931,51	931,19	930,39	928,91
	400	211,50	615,01	614,71	613,94	612,52
	800	39,26	397,06	396,77	396,02	394,82
45	50	565,11	471,84	455,55	426,88	395,36
	100	336,27	327,35	311,68	285,12	257,31
	200	186,43	200,38	188,40	168,72	149,04
	400	82,93	109,48	101,94	89,88	78,33
	800	39,91	54,41	50,36	44,08	38,40
56	50	714,33	549,75	549,71	549,61	549,43
	100	431,93	378,69	378,64	378,52	378,28
	200	236,41	242,21	242,15	242,00	241,76
	400	127,56	148,01	147,94	147,77	147,85
	800	72,96	88,48	88,41	88,40	89,06
61	50	387,62	321,61	310,77	292,30	273,19
	100	219,33	215,25	205,54	189,39	173,20
	200	126,76	127,38	120,41	109,16	98,42
	400	58,57	67,72	63,58	57,14	51,46
	800	20,69	33,12	31,06	28,04	25,84
68	50	1352,59	1161,63	1161,47	1161,06	1160,32
	100	1060,68	833,68	833,49	833,02	832,16
	200	659,04	555,73	555,53	555,03	554,10
	400	418,08	355,92	355,71	355,17	354,40
	800	283,18	224,13	223,91	223,38	223,86

Tabela D5: Valores de concentração normalizados observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo S-L, variando o parâmetro meteorológico  $z_0$  nos percentuais indicados.

Exp.	Dist. (m)	Cy/Q (Observado) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	-50%	-20%	+20%	+50%
1	50	886,38	574,03	588,44	600,98	607,85
	100	276,59	342,13	345,79	348,63	350,02
	200	69,38	186,47	186,63	186,55	186,40
	400	21,35	94,72	94,28	93,81	93,51
	800	8,01	46,92	46,74	46,59	46,51
11	50	387,14	320,57	335,85	347,05	353,45
	100	223,52	223,34	229,92	233,61	235,55
	200	124,78	138,21	139,90	139,99	139,91
	400	53,96	77,24	77,20	76,39	75,87
	800	19,86	40,28	39,98	39,34	38,95
17	50	1101,10	830,86	801,56	769,89	847,80
	100	678,02	574,61	560,27	544,39	582,73
	200	364,38	371,04	364,29	356,71	374,84
	400	191,88	230,04	226,80	223,14	231,84
	800	110,03	140,09	138,44	136,58	141,00
32	50	1643,75	1757,68	1837,63	1912,21	1955,64
	100	1803,98	1414,22	1463,98	1509,30	1535,19
	200	1238,45	1024,05	1049,43	1072,02	1084,70
	400	774,66	687,85	700,42	711,50	717,68
	800	553,77	448,14	454,69	460,43	463,60
34	50	323,50	249,16	263,99	278,83	287,90
	100	187,97	175,48	183,49	191,15	195,64
	200	102,76	109,96	113,16	115,99	117,56
	400	44,88	61,28	62,15	62,84	63,19
	800	18,89	30,97	31,08	31,12	31,13
39	50	1189,50	1612,60	1685,76	1753,99	1793,70
	100	713,92	1265,81	1309,22	1348,66	1371,15
	200	410,78	898,32	920,20	939,71	950,67
	400	211,50	597,97	609,04	618,83	624,29
	800	39,26	387,85	393,67	398,77	401,60
45	50	565,11	416,60	433,87	449,77	458,92
	100	336,27	288,39	295,85	302,37	305,96
	200	186,43	176,31	178,34	179,91	180,69
	400	82,93	96,39	96,35	96,16	95,99
	800	39,91	48,06	47,61	47,16	46,87
56	50	714,33	518,17	539,16	558,54	569,75
	100	431,93	363,18	373,52	382,82	388,08
	200	236,41	235,06	239,79	243,99	246,33
	400	127,56	144,67	146,83	148,72	149,77
	800	72,96	86,81	87,86	88,78	89,30
61	50	387,62	281,01	297,16	306,54	311,42
	100	219,33	189,22	196,54	199,22	200,17
	200	126,76	113,01	115,26	114,96	114,40
	400	58,57	60,63	60,98	60,10	59,39
	800	20,69	30,02	29,93	29,29	28,83
68	50	1352,59	1090,72	1137,68	1181,27	1206,55
	100	1060,68	796,24	821,06	843,53	856,32
	200	659,04	536,85	549,26	560,38	566,64
	400	418,08	346,06	352,41	358,04	361,20
	800	283,18	218,71	222,06	225,02	226,67

Tabela D6: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela D1.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	-0,03	0,19	0,0009	0,88	0,89
-50%	-0,64	1,32	-0,69	0,88	0,66
-20%	-0,23	0,20	-0,22	0,88	0,84
+20%	0,12	0,24	0,19	0,89	0,88
+50%	0,31	0,38	0,42	0,89	0,90

Tabela D7: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela D2.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	-0,03	0,19	0,0009	0,88	0,89
-50%	-0,13	0,19	0,03	0,88	0,72
-20%	-0,06	0,17	0,01	0,89	0,84
+20%	-0,002	0,20	-0,004	0,88	0,88
+50%	-0,06	0,19	0,01	0,89	0,84

Tabela D8: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela D3.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	-0,03	0,19	0,0009	0,88	0,89
-50%	-0,07	0,20	-0,01	0,88	0,88
-20%	-0,04	0,19	-0,008	0,89	0,88
+20%	-0,01	0,19	0,01	0,89	0,88
+50%	0,003	0,18	0,03	0,89	0,88

Tabela D9: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela D4.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	-0,03	0,19	0,0009	0,88	0,89
-50%	-0,001	0,21	-0,002	0,89	0,88
-20%	-0,02	0,20	0,002	0,89	0,88
+20%	-0,03	0,19	0,007	0,89	0,86
+50%	-0,04	0,19	0,01	0,89	0,86

Tabela D10: Índices estatísticos calculados para os dados da Tabela D5.

Modelo	$F_b$	$Nmse$	$F_s$	$Cor$	$FA2$
S-L (normal)	-0,03	0,19	0,0009	0,88	0,89
-50%	0,01	0,19	0,06	0,89	0,86
-20%	-0,01	0,20	0,02	0,89	0,86
+20%	-0,03	0,20	-0,008	0,89	0,88
+50%	-0,05	0,21	-0,03	0,89	0,88

## Anexo E

Tabela E1: Valores de concentração integrada e normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Copenhagen e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Exp.	Dist. (m)	Observado $C_o/Q$ ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	Grade 1		Grade 2	
			$C_p/Q$ (Degrazia) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Ulke) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Degrazia) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Ulke) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
1	1900	6,48	6,51	6,93	6,09	6,88
	3700	2,31	3,84	4,04	3,71	3,99
2	2100	5,38	4,30	3,74	3,80	3,81
	4200	2,95	2,45	2,53	2,57	2,52
3	1900	8,20	8,46	7,15	7,20	7,16
	3700	6,22	4,96	4,47	4,79	4,45
	5400	4,30	3,69	3,38	3,78	3,16
4	4000	11,66	12,53	9,38	9,23	8,68
5	2100	6,72	7,70	6,56	7,55	6,71
	4200	5,84	6,10	4,60	5,82	4,62
	6100	4,97	4,92	3,60	4,78	3,65
6	2000	3,96	3,62	2,45	2,84	2,71
	4200	2,22	2,28	1,68	2,04	1,83
	5900	1,83	1,73	1,31	1,66	1,42
7	2000	6,70	4,15	4,12	4,05	4,13
	4100	3,25	2,16	2,51	2,44	2,48
	5300	2,23	1,69	2,02	2,02	1,99
8	1900	4,16	5,31	3,84	4,35	3,91
	3600	2,02	3,29	2,61	3,07	2,65
	5300	1,52	2,57	2,23	2,55	2,29
9	2100	4,58	4,03	3,63	3,67	3,70
	4200	3,11	2,27	2,45	2,47	2,44
	6000	2,59	1,61	1,85	1,91	1,85



Tabela E2: Valores de concentração integrada e normalizada pela intensidade da fonte observados durante o experimento Cabauw e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Exp.	Dist. (m)	Observado $C_o/Q$ ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	Grade 1		Grade 2	
			$C_p/Q$ (Degrazia) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Ulke) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Degrazia) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Ulke) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
1A	3150	4,97	2,65	2,39	2,79	2,48
1B	3160	2,27	2,56	2,47	2,63	2,53
2A	3400	2,17	2,29	2,17	2,51	2,30
2B	3310	1,45	1,83	2,00	2,10	2,15
3A	3160	5,23	4,48	4,84	5,21	5,75
3B	3160	4,07	4,13	4,18	4,39	4,40
4A	3150	0,24	0,12	0,01	0,04	0,02
4B	3160	0,49	0,33	0,09	0,67	0,21
5A	3880	8,16	9,54	7,77	10,08	8,31
5B	3400	7,88	9,81	10,44	10,24	11,14
6A	3280	6,79	8,05	7,19	8,32	7,24
6B	3310	6,49	9,29	9,39	9,89	10,06
7A	3160	2,17	2,46	2,34	2,49	2,38
8A	4100	2,36	3,43	3,29	3,74	3,51
8B	4300	1,52	3,49	3,31	3,79	3,53
9A	4250	2,69	2,27	2,22	2,27	2,22
9B	4300	2,44	2,37	2,33	2,36	2,32
10A	3250	1,39	1,22	2,32	1,53	2,46
10B	3480	2,54	1,19	2,23	1,48	2,35
13A	3160	11,27	21,36	21,77	23,05	24,29
13B	3160	11,34	12,35	13,15	13,06	14,14
14A	4200	10,66	8,30	6,98	8,68	7,68
14B	3950	10,94	11,42	8,48	11,51	8,41
15A	3110	7,90	10,76	9,24	10,91	9,17
15B	3200	3,46	7,90	6,92	7,91	6,89

Tabela E3: Valores de concentração integrada normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Hanford e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano, para as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke para diferentes espaçamentos de grade.

Exp.	Dist. (m)	Observado $C_o/Q$ ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	Grade 1		Grade 2	
			$C_p/Q$ (Degrazia) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Ulke) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Degrazia) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	$C_p/Q$ (Ulke) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
1	100	195,0	330,71	341,61	281,90	289,81
	200	117,0	201,61	210,93	181,87	188,31
	800	37,3	69,87	76,10	66,66	71,88
	1600	21,4	40,73	45,61	39,40	43,82
	3200	13,0	24,20	27,93	23,34	27,18
2	100	519,0	551,03	602,79	468,37	512,21
	200	367,0	345,92	387,44	311,40	348,68
	800	129,0	132,00	156,07	123,36	147,30
	1600	90,80	82,59	100,43	76,07	96,06
	3200	72,20	52,68	66,18	47,19	63,83
3	100	271,0	508,20	539,85	433,43	460,32
	200	181,0	314,51	340,58	283,51	306,10
	800	59,10	114,90	131,10	108,83	123,92
	1600	33,10	69,67	81,90	66,02	78,54
	3200	17,90	43,22	52,51	40,23	50,83
4	100	918,0	734,94	814,94	623,49	690,26
	200	486,0	464,43	527,88	417,91	476,11
	800	201,0	181,46	217,24	168,14	206,65
	1600	131,0	115,03	141,64	105,09	137,12
	3200	91,5	74,01	94,38	66,59	92,36
5	100	839,0	537,81	578,90	458,16	493,17
	200	424,0	335,00	368,40	301,84	331,37
	800	105,0	125,06	145,11	117,64	136,85
	1600	86,10	77,17	92,18	71,96	87,90
	3200	66,40	48,62	60,06	44,31	57,62
6	100	884,0	459,87	490,86	391,84	418,07
	200	611,0	285,22	310,67	257,03	278,79
	800	134,0	104,56	120,25	99,03	113,52
	1600	61,5	63,53	75,28	60,20	72,09
	3200	31,1	39,51	48,34	36,75	46,73

Tabela E4: Valores de concentração integrada normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Prairie Grass (atmosfera instável) e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano (S-L). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas pelo modelo S-L utilizando as formulações de  $K_z$  propostas por Degrazia *et al.* e Ulke, nas segunda e terceira linhas, respectivamente.

Exp.	C/Q (50m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (100m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (200m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (400m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (800m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
1	886,15	276,59	69,38	21,55	8,01
	607,38	356,23	190,79	95,93	47,54
	657,69	396,29	219,48	112,27	53,94
2	900,10	326,96	85,12	16,43	10,05
	787,68	452,22	236,29	113,82	52,27
	879,08	525,17	289,62	147,40	70,27
5	468,09	229,93	115,77	41,51	12,98
	368,95	235,87	135,85	70,14	33,44
	365,44	232,71	134,38	71,54	35,59
6	464,36	264,77	126,12	49,64	21,83
	377,50	262,00	162,26	89,74	44,73
	345,07	227,53	136,28	75,58	39,31
7	545,00	217,51	79,54	15,71	2,65
	416,30	246,68	130,73	63,18	28,56
	416,31	255,76	143,13	73,91	35,71
8	595,19	309,06	139,42	48,13	17,28
	465,98	290,91	161,05	80,54	37,28
	449,41	283,14	162,31	85,81	42,39
9	431,11	239,71	117,53	47,59	15,94
	325,44	213,58	127,67	68,39	33,67
	324,00	209,91	123,19	66,69	33,76
10	515,86	210,52	84,03	23,49	5,07
	428,90	261,61	142,29	70,37	32,51
	421,48	262,23	148,45	77,50	37,83
11	387,14	223,52	124,78	53,69	19,86
	317,45	216,92	132,89	74,19	38,80
	304,61	201,19	120,30	66,37	34,37
12	357,27	206,39	117,42	51,38	22,66
	281,01	185,37	108,46	57,55	28,64
	281,70	185,30	110,15	60,16	30,66
15	786,62	369,12	148,59	41,15	12,41
	537,57	325,62	183,30	100,02	55,99
	552,67	335,35	187,08	96,81	48,25
16	565,48	197,11	55,08	11,83	1,93
	468,24	268,19	139,93	68,26	32,56
	508,67	303,74	166,40	84,23	40,03

Exp.	C/Q (50m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (100m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (200m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (400m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (800m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
19	479,42	235,96	92,48	28,81	6,30
	363,16	234,83	137,08	71,66	34,59
	358,99	229,91	133,48	71,46	35,75
20	370,4	191,75	94,64	38,25	14,20
	259,54	173,84	103,34	54,91	26,74
	240,51	159,63	96,30	53,11	27,24
25	825,95	278,34	78,11	29,58	6,42
	562,75	324,42	170,59	82,66	38,19
	630,42	379,43	209,84	107,12	51,22
26	417,69	238,04	114,41	43,43	14,03
	355,17	227,38	129,19	66,31	31,47
	341,22	219,46	127,89	68,72	34,52
27	462,68	250,60	127,72	50,13	19,41
	354,50	222,75	124,34	62,76	29,29
	348,47	221,87	128,02	68,09	33,84
30	450,09	247,87	119,10	43,38	11,59
	331,42	214,06	122,23	62,77	29,62
	312,72	201,89	117,99	63,58	32,03
31	399,25	236,06	133,11	63,34	44,49
	341,69	232,21	138,80	73,89	35,76
	300,03	198,80	119,24	65,94	34,10
33	346,48	209,83	100,20	39,68	13,34
	329,69	221,52	131,58	70,24	34,45
	298,24	196,95	117,68	64,78	33,33
34	323,50	187,97	102,76	44,88	18,89
	271,90	187,62	114,71	62,54	31,11
	239,30	160,78	98,40	55,16	28,80
43	555,87	273,95	126,20	43,60	13,57
	376,23	231,12	127,25	64,04	30,32
	385,28	241,97	137,99	72,55	35,66
44	489,77	250,31	124,09	49,72	15,53
	349,26	218,24	121,20	60,90	28,32
	345,99	219,63	126,35	66,99	33,19
45	565,11	336,27	186,43	82,93	39,91
	442,50	299,44	179,23	96,27	47,37
	385,81	253,43	151,36	83,70	43,39
47	620,50	246,50	83,92	28,87	5,72
	444,99	256,17	135,41	67,19	32,87
	501,94	300,25	164,69	83,50	39,78
48	307,42	174,57	87,10	38,88	15,68
	324,05	216,73	128,44	68,67	34,03
	296,52	195,46	116,54	63,99	32,84
49	439,53	243,59	120,90	47,01	16,22
	327,93	208,80	118,34	60,91	29,26
	319,44	204,86	118,95	63,66	31,84
50	445,97	236,73	91,53	41,20	11,90
	316,74	199,36	111,65	56,74	26,84
	313,14	199,70	115,29	61,33	30,49

Exp.	C/Q (50m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (100m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (200m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (400m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (800m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
51	481,04	252,32	106,52	40,24	9,39
	335,42	216,19	123,12	62,99	29,59
	316,48	204,05	119,11	64,10	32,25
52	554,82	201,34	55,17	12,34	1,75
	379,43	223,63	118,66	57,65	26,36
	409,96	251,13	140,15	72,18	34,79
57	456,49	225,18	149,77	71,14	30,02
	415,54	296,71	186,50	104,07	52,49
	331,03	221,23	134,53	75,98	40,41
61	387,62	219,33	126,76	58,57	20,69
	302,26	198,04	115,13	60,51	29,58
	286,58	187,29	110,60	60,03	30,41

Tabela E5: Valores de concentração integrada normalizados pela intensidade da fonte observados durante o experimento Prairie Grass (atmosfera estável) e previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano (S-L). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas pelo modelo S-L utilizando as formulações de  $K_z$  propostas por Degrazia *et al.* e Ulke, nas segunda e terceira linhas, respectivamente.

Exp.	C/Q (50m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (100m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (200m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (400m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (800m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
17	1101,10	678,02	364,38	191,88	110,03
	817,45	568,09	367,98	228,57	139,34
	851,64	601,49	396,65	251,97	157,84
18	1101,10	752,74	467,37	286,40	190,75
	922,95	655,19	432,84	274,73	171,40
	986,14	718,04	485,35	315,79	202,57
21	625,33	367,60	198,93	103,35	56,03
	420,69	287,75	181,77	109,09	63,73
	426,38	293,49	187,06	113,77	67,74
22	476,82	276,80	149,25	73,77	32,74
	350,19	240,43	152,00	91,07	53,02
	354,46	244,80	156,10	94,75	56,21
23	497,92	307,81	173,47	78,48	41,77
	414,99	283,56	178,84	107,08	62,36
	419,80	288,42	183,35	111,10	65,83
24	495,73	287,53	160,84	87,47	40,97
	425,65	290,09	182,41	108,77	62,97
	428,91	293,40	185,51	111,56	65,44

Exp.	C/Q (50m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (100m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (200m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (400m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (800m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
28	1367,92	931,55	529,50	302,59	146,47
	1217,86	879,62	588,95	378,56	239,13
	1317,73	982,98	675,31	444,71	288,28
29	1028,14	662,96	388,76	227,81	122,38
	716,03	505,71	332,36	209,76	130,09
	761,62	550,56	370,06	239,54	152,91
32	1643,75	1803,98	1238,45	774,66	553,77
	1878,00	1488,65	1061,78	706,49	457,84
	2048,47	1718,54	1298,21	893,89	591,28
35S	916,59	585,25	325,93	186,62	97,99
	682,76	472,94	304,95	188,32	114,04
	708,29	497,88	326,59	206,19	128,31
35	1809,38	2071,79	1497,65	939,62	283,36
	2894,11	2459,37	1880,36	1295,24	847,50
	3089,93	2767,13	2274,93	1619,86	1126,39
36	2012,17	1766,43	1048,84	610,80	413,94
	2148,17	1671,71	1175,68	777,84	502,68
	2348,79	1929,36	1426,00	971,18	640,78
37	614,33	390,01	213,49	115,18	67,72
	568,16	390,56	249,27	151,89	90,50
	582,34	404,53	261,71	162,47	99,21
38	792,49	474,67	258,45	140,41	79,22
	614,21	421,93	269,29	164,13	97,83
	629,06	436,57	282,32	175,21	106,95
39	1189,50	713,92	410,78	211,50	39,26
	1722,70	1330,69	930,87	614,40	396,47
	1887,41	1538,03	1128,17	765,72	504,75
40	1202,60	749,15	446,92	155,85	160,86
	1861,80	1449,04	1019,14	674,24	435,69
	2037,27	1674,55	1238,45	843,70	556,72
41	817,59	557,72	325,80	195,72	115,53
	766,41	539,88	354,11	223,04	138,04
	812,70	585,34	392,38	253,39	161,39
42	535,64	315,35	176,13	91,29	51,10
	426,74	292,76	185,68	112,08	65,97
	434,68	300,70	192,92	118,37	71,27
46	683,46	425,63	243,69	133,93	68,17
	463,15	317,63	201,62	121,88	71,89
	472,07	326,51	209,68	128,86	77,74
53	1556,28	1356,23	866,76	533,30	323,16
	2021,20	1692,70	1272,44	867,58	566,35
	2170,44	1920,71	1551,90	1121,86	750,92
54	824,18	523,59	309,06	179,18	105,17
	699,81	489,73	319,12	199,53	122,52
	736,23	525,29	349,35	223,86	141,48

Exp.	C/Q (50m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (100m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (200m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (400m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )	C/Q (800m) ( $\cdot 10^{-4} \text{sm}^{-2}$ )
55	558,76	329,32	183,19	84,82	46,06
	436,67	300,06	190,77	115,53	68,30
	446,09	309,43	199,25	122,85	74,41
56	714,33	431,93	236,41	127,56	72,96
	549,67	378,59	242,09	147,87	88,37
	564,98	393,65	255,44	159,16	97,60
58	1686,40	1683,18	1130,36	730,16	508,36
	1800,59	1413,41	1000,41	663,57	429,38
	1968,07	1633,64	1220,18	835,21	551,75
59	1441,40	1329,21	854,93	523,29	310,76
	1356,83	1009,00	688,51	448,69	286,89
	1485,98	1154,31	814,55	543,95	356,11
60	644,80	404,49	243,84	127,37	75,54
	573,05	397,09	255,77	157,68	95,28
	594,52	418,06	274,04	172,81	107,41
65	660,97	444,30	262,43	156,68	91,42
	602,40	421,16	273,91	170,83	104,60
	632,80	450,78	299,23	191,31	120,63
66	1133,73	849,40	551,36	346,22	199,06
	1020,84	741,78	498,60	321,44	203,59
	1110,18	835,55	577,30	381,47	247,94
67	668,14	469,13	288,34	169,18	98,44
	592,65	407,97	260,92	159,44	95,33
	608,89	423,93	275,05	171,38	105,10
68	1352,59	1060,68	659,04	418,08	283,18
	1161,30	833,31	555,33	355,49	223,68
	1250,90	924,56	631,40	414,12	267,55