

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL**

Filipe Fernandes de Carvalho Souza

**COMPARAÇÃO DOS MODELOS AERMOD E SYMOS'97 PARA
O CÁLCULO DE DISPERSÃO DE ODORES: UM ESTUDO DE
CASO EM UTTENWEILLER**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Ambiental.
Orientador: Prof. Dr. Henrique de Melo Lisboa

Florianópolis
2014

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Souza, Filipe Fernandes de Carvalho

Comparação dos modelos Aermol e Symos97 para o cálculo de dispersão de odores : um estudo de caso em Uttenweiler / Filipe Fernandes de Carvalho Souza ; orientador, Henrique de Melo Lisboa - Florianópolis, SC, 2014. 131 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental.

Inclui referências

1. Engenharia Ambiental. 2. Modelagem da dispersão de odores na atmosfera. 3. AERMOD. 4. SYMOS97. 5. Building downwash. I. Lisboa, Henrique de Melo. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental. III. Título.

Filipe Fernandes de Carvalho Souza

COMPARAÇÃO DOS MODELOS AERMOD E SYMOS'97 PARA O CÁLCULO DE DISPERSÃO DE ODORES: UM ESTUDO DE CASO EM UTTENWEILER

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de “Mestre em Engenharia Ambiental”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina.

Florianópolis, 16 de janeiro de 2014.

Banca Examinadora:

Prof., Dr. Henrique de Melo Lisboa,
Orientador
Programa Pós-Graduação em Engenharia Ambiental
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Paulo Belli Filho,
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof., Dr. Pedro Luiz Borges Chaffe,
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof., Dr. Milton dos Santos Braitt,
Departamento de Matemática
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof., Dr. William Gerson Matias
Coordenador do Curso de Pós-Graduação em Engenharia
Ambiental
Universidade Federal de Santa Catarina

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por ter feito milagres que permitiram a conclusão desse trabalho. Agradeço a Ele por me conceder força quando eu já não conseguia mais, nem acreditava mais. Agradeço a minha falecida avó Aleide por ter motivado o meu pai e indiretamente a mim a alcançar mais essa vitória. Agradeço aos meus pais prof. Dr. Joel e Lucineide, juntamente com o meu irmão Lucas, por me animarem a não desistir. Agradeço em especial ao meu pai que me instruiu e auxiliou na compreensão da fundamentação matemática da modelagem gaussiana e atuou como revisor deste trabalho. Agradeço ao professor Henrique de Melo Lisboa por aceitar me orientar neste trabalho. Agradeço aos amigos e colegas do LCQAr – Laboratório de Controle da Qualidade do Ar pela oportunidade de trabalharmos em conjunto, em especial ao amigo Leonardo Hoinaski. Agradeço ao professor Milton dos Santos Braitt por ter me iniciado nos estudos de modelagem de dispersão de poluentes atmosféricos e por ter me orientado em meu o trabalho de iniciação científica. Agradeço ao professor Luiz Cláudio Gomes Pimentel e aos colegas do NCQAr – Núcleo Computacional de Estudos da Qualidade do Ar – UFRJ, pela grande amizade e por terem me ensinado, enormemente, vários conceitos de modelagem da qualidade do ar. Agradeço aos membros da banca: Prof. Pedro Chaffe, Prof. Paulo Belli e Prof. Milton Braitt, e ao meu orientador Prof. Henrique de Melo Lisboa por aceitarem participar de minha defesa de mestrado em um prazo tão exíguo.

RESUMO

Neste trabalho, faz-se uma análise comparativa do desempenho dos modelos de dispersão AERMOD e SYMOS'97 na simulação de compostos odorantes na atmosfera. Apesar de haver uma vasta quantidade de modelos de dispersão atmosférica descritos na literatura, há uma pequena quantidade de bases de dados que possibilitem a avaliação de resultados obtidos por modelos de dispersão simulando compostos odorantes. Assim, o objetivo deste trabalho é a realização de um estudo comparativo do desempenho dos modelos de dispersão AERMOD e SYMOS'97, para isto, serão utilizados os experimentos de dispersão de Uttenweiler. Ao longo deste trabalho, buscou-se utilizar as melhores configurações do AERMOD para este caso específico. As medições de um anemômetro sônico foram utilizadas e o efeito *downwash* de obstáculos nas vizinhanças da chaminé de um celeiro de suínos foi considerado. Utilizou-se um fator pico-média a fim de ajustar o modelo à predição de concentrações máximas. A comparação das concentrações modeladas e observadas permitiu a determinação de uma razão pico média que ajustasse os dados modelados aos observados. Para este experimento, o modelo AERMOD tendeu a subestimar as concentrações para a razão pico-média 2,2 apresentando fator de 2 de 23,1%, enquanto que o modelo SYMOS'97 alcançou fator de 2 de 57,7% para a razão pico-média 2,2. Assim, testou-se a utilização de uma razão pico-média maior, igual a 6,6, que permitiu ao modelo alcançar um fator de 2 igual a 53,8%. Após alguns ajustes, o modelo AERMOD superou o desempenho de modelos lagrangeanos para o experimento de Uttenweiler. A detecção do padrão de subestimação do AERMOD para a razão pico-média 2,2 propiciou o melhoramento dos resultados obtidos nas simulações. Através do estudo comparativo realizado neste trabalho, pretende-se contribuir para a ampliação da compreensão da dispersão de compostos odorantes na atmosfera.

Palavras-chave: Modelagem da dispersão de odores na atmosfera. AERMOD. SYMOS'97. Odores. *Building downwash*. Suinocultura.

ABSTRACT

In this work we make a comparative analysis of the performance of the AERMOD and SYMOS'97 dispersion models for simulating the dispersion of odorous compounds in the atmosphere. Although there are a large amount of air dispersion models in literature, there are few data bases that allow the assessment of results obtained by the dispersion simulation of odorous compounds. The goal of this work is to make a comparative study of the dispersion models AERMOD and SYMOS'97, for this, the Uttenweiler dispersion experiments will be used. Along this comparison we have tried to use AERMOD's best configurations for this particular case. The measurements of an ultrasonic anemometer were used and the building downwash effect of the obstacles located in the stack vicinity of the pig farm were considered. We also used a peak-to-mean concentration approach to adjust the model to predict peak concentrations. The comparison of observed and modeled concentrations demonstrated allowed the detection of error patterns. The AERMOD model tends to under predict the concentrations for this experiment presenting a factor of two of 23.1% for peak-to-mean ratio of 2,2, while SYMOS'97 reaches 57.7% for the same index and ratio. Thus, the use of a greater peak-to-mean ratio equal to 6.6 was tested, allowing the model to reach a factor of two of 53.8%. After some adjustments, the AERMOD model was able to outperform Lagrangian models while simulating the Uttenweiler dispersion experiments. The detection of the AERMOD's under predicting pattern for the peak-to-mean ratio of 2,2 allowed the improvement of its results. Through this work we intend to contribute to the better understanding of the dispersion modeling of odorous compounds in the atmosphere.

Keywords: Modeling of atmospheric dispersion of odors. Odors. AERMOD. SYMOS'97. Building downwash. Swine.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Classificação dos modelos de dispersão atmosférica.....	31
Figura 2 – Fluxograma da estrutura do modelo de dispersão AERMOD.	33
Figura 3 – Efeito <i>Building Downwash</i>	37
Figura 4 – Efeito <i>Building Downwash</i>	38
Figura 5 – Em sentido horário apresenta-se o mapa da Alemanha, o estado de Baden-Württemberg, o distrito de Biberach e a localização do experimento (coordenadas em Gauss-Krüger, em metros).	50
Figura 6 – Imagem do local do experimento no dia 29 de setembro de 2001 (Coordenadas UTM em metros). As marcações em vermelho são referentes às posições dos jurados para o experimento B.	51
Figura 7 – Localização dos aeroportos de Laupheim e de Schnarrenberg em relação à chaminé (SCHACHTMI).	53
Figura 8 – Exemplo de um gráfico do índice fator de 2.....	57
Figura 9 – Gráfico do índice fator de dois utilizando razão pico média igual 2,2 (usando o AERMOD).	62
Figura 10 – Gráfico do índice Fator de dois, usando o SYMOS'97.	63
Figura 11 – Concentração longitudinal à barlavento das edificações para a direção do vento de 220°.	63
Figura 12 – Comparação do fator de dois das concentrações medidas e simuladas com o modelo AERMOD.	65
Figura 13 – Comparação das curvas de intensidade – concentração.....	71
Figura 14 – Comparação das curvas de intensidade – concentração.....	72

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Variáveis meteorológicas do experimento de Uttenweiler utilizadas no modelo AERMOD.	54
Tabela 2 – Cálculo da taxa de emissão. Experimento de dispersão odorante de suinocultura de Uttenweiler.	56
Tabela 3 – Comparação dos modelos AERMOD e SYMOS'97 para o experimento com traçador SF6 de Uttenweiler e suas respectivas razões pico-média.	66
Tabela 4 – Comparação do desempenho entre diversos modelos para o experimento do traçador de Uttenweiler. Fonte: Adaptado de Pongratz, Öttl e Uhrner (2012).	68
Tabela 5 – Comparação da utilização da razão pico-média 2,2 para transformar as concentrações modeladas em concentrações médias modeladas de 10 segundos com a utilização da razão pico-média 6,6 para transformar as concentrações modeladas de 10 minutos em concentrações de pico modeladas de 10 segundos, para o experimento de Uttenweiler.	70
Tabela 6 – Comparação do desempenho entre as curvas de Keder e Souza, para as simulações realizadas com o modelo AERMOD para o experimento de Uttenweiler.	74

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Descrição das variáveis da equação gaussiana utilizada pelo AERMOD.....	37
Quadro 2 – Classes de estabilidade e comprimentos de Monin-Obukov. Adaptado do material didático apresentado pelo professor Neyval R. Costa Jr.	41
Quadro 3 – Limites máximos e mínimos das variáveis testadas	43
Quadro 4 – Escala de intensidades odorantes de 0-6.	44
Quadro 5 – Descrição das principais diferenças de ambas simulações.....	52
Quadro 6 –Taxa de emissão. Experimento do traçador SF6.	55
Quadro 7 – Razão pico-média por tipo de fonte emissora.	58

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO.....	19
1.1.	JUSTIFICATIVA	22
1.2.	OBJETIVO GERAL.....	23
1.3.	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	23
1.4.	ESTRUTURA DO TRABALHO	23
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	25
2.1.	ODOR.....	25
2.2.	TÉCNICAS DE AVALIAÇÃO DO INCÔMODO OLFATIVO.....	25
2.3.	TIPOS DE MODELOS DE DISPERSÃO DE ODORES NA ATMOSFERA	28
2.4.	DESCRIÇÃO DO MODELO SYMOS'97.....	31
2.5.	DESCRIÇÃO DO MODELO AERMOD.....	33
2.5.1.	<i>AERMAP</i>	34
2.5.2.	<i>AERMET</i>	35
2.5.3.	<i>AERMOD</i>	36
2.6.	ALGORITMO PRIME E BUILDING DOWNWASH.....	37
2.7.	CLASSES DE ESTABILIDADE – TEORIA DA SIMILARIDADE	39
2.8.	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE.....	41
2.9.	DESCRIÇÃO DO EXPERIMENTO DE ÜTTENWEILER	43
2.10.	SIMULAÇÕES DO EXPERIMENTO DE ÜTTENWEILER	44
3.	MATERIAIS E MÉTODO.....	49
3.1.	CARACTERIZAÇÃO DO LOCAL.....	49
3.2.	DESCRIÇÃO DA SIMULAÇÃO COM O MODELO AERMOD	51
3.3.	ANÁLISE E COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS.....	56
3.4.	ANÁLISE DOS DADOS DO TRAÇADOR	58
3.5.	TRANSFORMAÇÃO DAS CONCENTRAÇÕES PREDITAS EM INTENSIDADES	59
4.	RESULTADOS	61
4.1.	EXPERIMENTO DO TRAÇADOR.....	61
4.2.	EXPERIMENTO ODORANTE	70
5.	CONCLUSÃO.....	77
6.	REFERÊNCIAS.....	81

1. INTRODUÇÃO

A avaliação do incômodo olfativo é uma tarefa onerosa e de elevada complexidade. Dentre as várias opções de realização dessa tarefa, a modelagem da dispersão odorante torna-se cada vez mais interessante e, em alguns casos, imprescindível, como na avaliação de impacto de atividades ainda não estabelecidas e na proposição de políticas de uso e ocupação do solo.

A modelagem da dispersão de compostos odorantes apresenta algumas particularidades e desafios. A percepção odorante ocorre em apenas alguns segundos, enquanto que a maior parte dos modelos simula apenas concentrações médias para maiores intervalos de tempo (DE MELO LISBOA *et al*, 2006). Uma alternativa para essa questão é a utilização de razões pico-média, que permitam a conversão de concentrações médias de maior duração de tempo para concentrações médias de menor duração. Ademais, a dispersão de compostos odorantes pode sofrer efeitos sinérgicos e de mascaramento olfativo (CAPELLI *et al*, 2008), que são de complexa descrição por meio de modelagem.

Os efeitos sinérgicos e de mascaramento olfativo, juntamente com outras incertezas, fazem com que seja imprescindível a realização de estudos de validação das simulações de dispersão dos compostos odorantes. A validação pode permitir a simples verificação dos resultados preditos pelo modelo ou, até mesmo, permitir a realização de análises comparativas, do desempenho de modelos que indiquem quais são mais adequados às simulações de determinadas situações ou compostos. A validação pode ainda permitir a detecção das melhores técnicas de modelagem para determinada situação.

No presente trabalho, utilizou-se o experimento de dispersão odorante de Uttenweiler, Alemanha (BÄCHLIN; RÜHLING; LOHMEYER, 2002), a fim de comparar o desempenho de modelos de simulação de compostos odorantes. O desempenho dos modelos AERMOD e SYMOS '97 foi comparado em relação aos dados observados de um traçador inerte SF₆ e de gás odorante de suinocultura, do experimento de Uttenweiler. As comparações entre os modelos AERMOD e SYMOS '97 foram realizadas com base na metodologia e nos resultados da adaptação/validação do modelo SYMOS '97 para odores, obtidos por Keder, Bubnik e Macoun (2003); Keder (2008a) e Keder (2008b). O experimento de Uttenweiler foi escolhido por ter sido anteriormente testado (AUBRUN; LEITL, 2004; KEDER; BUBNIK; MACOUN, 2003; KEDER, 2008a, 2008b; PONGRATZ; ÖTTL; UHRNER, 2012; STENZEL *et al*, 2011; VIEIRA DE MELO *et al*, 2012) o que permite a intercomparação de resultados, além de apresentar dados de elevada qualidade e em alta quantidade (RØRDAM *et al*, 2005). O experimento ainda apresenta a influência de obstáculos na dispersão do poluente odorante, devido à chaminé ser pouco elevada, o que torna o experimento representativo de condições reais da dispersão de compostos odorantes.

O presente trabalho está integrado às pesquisas do controle da poluição atmosférica, mais especificamente, sobre o impacto ambiental de odores, que vem sendo desenvolvidas ao longo dos últimos 20 anos no Laboratório de

Controle da Qualidade do Ar – LCQAr e no Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina. Em seguida, descreve-se uma pequena sinopse desses trabalhos, elencados abaixo:

Belli Filho, em 1995, em sua tese de doutorado em ciências químicas, na École Nationale de Chimie, na Université de Rennes, na França, estudou sobre a estocagem e os odores de dejetos animais no caso de estrume de suínos (BELLI F^o, 1995).

Em 1995, De Melo Lisboa e Nogueira apresentaram um estudo a respeito do problema do odor no Brasil, no terceiro congresso de odores e COV – Compostos Orgânicos Voláteis (DE MELO LISBOA; NOGUEIRA, 1995).

Já em 1996, De Melo Lisboa, em sua tese de doutorado na Université de Pau et de Pays de L'Adour e École Nationale Supérieure de Mines D'Ales, na França, estudou a respeito da contribuição para a implementação e validação de modelos de dispersão atmosférica aplicáveis a compostos odorantes (DE MELO LISBOA, 1996).

Em 1998, Belli Filho e De Melo Lisboa fizeram um estudo a respeito de emissões odorantes (BELLI F^o; DE MELO LISBOA, 1998).

Carvalho, em 2001, em sua dissertação de mestrado no Programa de Pós-graduação da Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina, estudou sobre o odor e a biodesodorização em reatores anaeróbicos (CARVALHO, 2001). Já em 2003, Carvalho, Silva, De Melo Lisboa e Belli Filho fizeram um estudo sobre a olfatométrie como ferramenta de avaliação da qualidade do ar: um estudo de caso (CARVALHO *et al*, 2003).

Queiroz e De Melo Lisboa, em 2002, apresentaram um estudo sobre a análise físico-química de COV (QUEIROZ; DE MELO LISBOA, 2002).

Em 2002, Silva, em sua dissertação de mestrado no Programa de Pós-graduação da Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina, apresentou um estudo sobre os incômodos olfativos emitidos pela suinicultura – Estudos na bacia hidrográfica do Rio dos Fragosos e na região urbana do Município de Concórdia (SILVA, 2002).

Em 2002, Cabral e Belli Filho apresentaram um trabalho sobre o tratamento de odores em digestores anaeróbios utilizando o processo de biofiltração (CABRAL; BELLI F^o, 2002). Já em 2003, Cabral, em sua dissertação de mestrado no Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina, apresentou um estudo sobre a técnica da biofiltração para desodorização de reatores anaeróbios (CABRAL, 2003).

Carmo Jr., Nóbrega, De Melo Lisboa e Belli Filho, em 2003, estudaram a respeito da utilização da olfatométrie para o conforto ambiental em um estudo de caso (CARMO JR. *et al*, 2003). Ainda em 2003, Moreira, De Melo Lisboa, Evangelho, Carmo Jr., Belli Filho e Mello apresentaram um estudo sobre o gerenciamento de odores em uma refinaria de petróleo (MOREIRA *et al*, 2003).

Em 2003, Shirmer, De Melo Lisboa, Belli Filho, Queiroz e Carmo Jr. apresentaram uma amostragem e uma análise físico-química de compostos orgânicos voláteis e odorantes (SHIRMER *et al*, 2003).

Em 2004, Schirmer, em sua dissertação de mestrado no Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina, desenvolveu um estudo sobre a amostragem, a análise e uma proposta de tratamento de compostos orgânicos voláteis – COV e odorantes em estação de despejos industriais de refinaria de petróleo (SHIRMER, 2004).

Em 2005, Carmo Jr., em sua tese de doutorado junto ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina, fez um estudo a respeito da otimização e da aplicação de metodologias para análises olfatométricas integradas ao saneamento ambiental, no qual ela apresenta quatro estudos de casos: em uma estação de tratamento efluentes líquidos da Refinaria de Petróleo Presidente Bernardes – RPPB; em uma estação e tratamentos de esgotos Insular, em Florianópolis – SC; em uma indústria de processamento de papel reciclado, em Curitiba; e em um autoposto de combustível (CARMO JR., 2005).

Em 2010, Mandu, em seu trabalho de conclusão de curso em Engenharia Sanitária e Ambiental pela Universidade Federal de Santa Catarina, desenvolveu um estudo sobre a aplicação do modelo de dispersão AERMOD às emissões odorantes oriundas de um frigorífico, localizado no interior do estado do Paraná (MANDU, 2010).

Em 2011, De Carvalho Souza, em seu trabalho de conclusão de curso em Engenharia Sanitária e Ambiental pela Universidade Federal de Santa Catarina realizou um estudo sobre a utilização conjunta do modelo de prognóstico MM5 e do modelo de dispersão AERMOD para a região metropolitana do Rio de Janeiro, em que foi simulada a dispersão de dióxido de enxofre (DE CARVALHO SOUZA, 2011).

Em 2013, Vieira, em sua dissertação de mestrado em Engenharia Ambiental pela Universidade Federal de Santa Catarina realizou uma abordagem de procedimentos legais para o controle de incômodos olfativos (VIEIRA, 2013).

Percebe-se, através dos trabalhos listados acima, que muitos estudos foram feitos sobre odores em refinarias de petróleo, porém muito poucos estudos têm sido feitos relacionados à dispersão de odores oriundos da suinocultura. Assim, recomenda-se, aqui, que seja realizado futuramente um estudo de dispersão de odores aplicado à suinocultura em Santa Catarina, uma vez que o Estado Santa Catarina possui uma população de cerca de 8 milhões de suínos (IBGE, 2010).

Assim, neste trabalho, busca-se dar continuidade às pesquisas realizadas na área de poluição atmosférica no Laboratório de Controle de Qualidade do Ar (LCQAr), localizado na Universidade Federal de Santa Catarina e dirigido pelo professor Henrique de Melo Lisboa. Tem-se como objetivo do mesmo realizar um estudo comparativo da dispersão de odores entre os modelos gaussianos AERMOD e SYMOS'97. Para elaborá-lo, empregou-se, em conjunto com o modelo AERMOD, o mesmo método utilizado na adaptação do modelo SYMOS'97 para odores. Deste modo, buscou-se averiguar comparativamente o

potencial preditivo do modelo AERMOD, nas proximidades de uma chaminé de baixa altitude, sob a influência de obstáculos, em Uttenweiler, Alemanha.

1.1. Justificativa

A avaliação do impacto ambiental, proveniente da emissão de um poluente atmosférico, pode ser realizada por meio da simulação da dispersão deste na atmosfera, através de modelos computacionais. Esses modelos podem ser classificados em famílias, segundo a sua concepção físico-matemática. De modo geral, os modelos computacionais compõem-se de estruturas modulares que visam descrever o fenômeno simulado da maneira mais realística possível. Essas estruturas modulares fazem uso de um elevado número de variáveis que interagem entre si e exercem, em maior e menor grau, influência no cálculo das concentrações previstas pelo modelo. A compreensão da formulação do modelo é, portanto, de fundamental importância no entendimento dos resultados gerados pelo mesmo. Entretanto, a complexidade dos modelos utilizados na simulação da dispersão de poluentes na atmosfera é tamanha que faz-se necessário a realização de análises de sensibilidade, estudos de validação e a comparação dos resultados, a fim de melhor compreender o funcionamento e a aplicabilidade dos mesmos.

A verificação da aplicabilidade de um modelo para efetuar uma simulação deve levar em consideração: a complexidade do fenômeno modelado; a disponibilidade de dados de entrada confiáveis; a capacidade computacional disponível; o nível de expertise do usuário; e a precisão demandada nos resultados. Quanto mais realísticas forem as representações do fenômeno, mais complexa será a compreensão das equações que descrevem o fenômeno modelado, maior expertise do usuário será demandada, maior quantidade de dados de entrada será necessária, maior nível de capacidade computacional será requerido e um maior número de dados de entrada será utilizado. Assim, a escolha do modelo a ser utilizado dá-se em termos da análise do custo-benefício que cada um poderá oferecer na representação de um determinado fenômeno.

Existem, basicamente, três famílias de modelos de dispersão de poluentes na atmosfera: modelos gaussianos, lagrangeanos e eulerianos. De modo geral, os modelos gaussianos são mais simples que os lagrangeanos e eulerianos. Os últimos tendem a reproduzir resultados mais realísticos, mas requerem dados de entrada e uma capacidade computacional que nem sempre estão disponíveis; enquanto que os gaussianos podem prover respostas razoáveis, uma vez respeitadas as suas limitações intrínsecas à sua concepção. Por isso, neste trabalho, são intercomparados o desempenho de dois modelos gaussianos regulatórios em relação a um experimento de dispersão atmosférica controlada. A realização deste trabalho permitiu uma maior compreensão da fundamentação do modelo AERMOD, além de possibilitar a verificação da aplicabilidade do mesmo para simular a dispersão de compostos odorantes. A verificação da aplicabilidade do modelo AERMOD para simular a dispersão de odores deu-se em função do desempenho obtido pelo modelo AERMOD em relação ao desempenho obtido pelo modelo SYMOS'97, que já teve a sua aplicabilidade comprovada, através da simulação do experimento de campo de Uttenweiler.

1.2. Objetivo geral

Esta dissertação tem como objetivo geral a realização de um estudo comparativo do desempenho dos modelos gaussianos AERMOD e SYMOS'97 na dispersão de odores, com dados do experimento de Uttenweiler.

1.3. Objetivos específicos

Os objetivos específicos deste trabalho são os seguintes:

- I. Simular os experimentos de dispersão do traçador SF₆ e experimento de dispersão odorante da suinocultura em Uttenweiler, com o modelo de dispersão AERMOD;
- II. Avaliar o desempenho obtido pelo modelo AERMOD e comparar com o desempenho obtido pelo modelo SYMOS'97, para o mesmo experimento.

1.4. Estrutura do trabalho

Este trabalho está estruturado da seguinte maneira: no primeiro capítulo, apresenta-se uma breve introdução com uma pequena descrição de seus objetivos. No segundo capítulo, é feita uma breve revisão de conceitos ligados a odores, seus incômodos e sua aferição. São descritos, ainda, os fundamentos da modelagem de odores na atmosfera, os princípios dos modelos empregados nas simulações realizadas e um breve histórico de estudos de simulação para o experimento de Uttenweiler. No terceiro capítulo, são descritos a área de estudo e o método empregado nas simulações deste trabalho. No quarto capítulo, são apresentados os resultados das simulações com o traçador e das simulações de dispersão odorante. No quinto capítulo, é apresentada a conclusão deste estudo. No sexto capítulo, apresentam-se as referências utilizadas neste trabalho. Finalmente, nos anexos, são apresentados alguns resultados adicionais, comparando-se as intensidades de pico modeladas e observadas, e a descrição detalhada da fundamentação da modelagem gaussiana.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Odor

Odor é a sensação resultante da recepção de um estímulo pelo sistema de membranas das mucosas olfativas (MICHEL, 1997 apud VIEIRA, 2007).

Dar-se-ão em seguida outras definições a respeito de odores. Muitas dessas definições podem ser encontradas com mais detalhes na tese de doutorado de Carmo Junior (2005). No entanto, para maior clareza e consistência deste trabalho, repete-se aqui algumas delas.

Odor é o efeito de uma mistura complexa de gases, segundo a Comissão Internacional de Engenharia Rural (1994 apud CARMO JÚNIOR, 2005). Ou ainda, odor é a sensação resultante da recepção de um estímulo pelo sistema sensorial olfativo humano. Os tipos de sensação a esses estímulos dependem das características sensoriais do que se está avaliando, quais sejam: a intensidade do odor, a concentração de detecção, o caráter e a hedonicidade, isto é, o tipo de sensação que proporciona: agradável ou desagradável. A combinação dos efeitos dessas características determina o incômodo olfativo que o odor pode causar (ZURITA *et al.*, 1999 apud CARMO JUNIOR, 2005)

O que faz com que moléculas químicas tornem-se odorantes? As moléculas tornam-se odorantes quando reagem com a mucosa nasal criando uma sensação olfativa, que depende da natureza da substância odorante e de sua concentração (CARMO JUNIOR, 2005)

A percepção olfativa ocorre através de dois processos: percepção fisiológica e interpretação psicológica (FRECHEN, 1994 apud GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001). Devido à complexidade da percepção olfativa não existe uma teoria consolidada que explique completamente o seu funcionamento. A percepção olfativa varia de acordo com a idade, condição de saúde ou se a pessoa é ou não fumante. A percepção olfativa pode ainda sofrer aumento ou diminuição em função da reexposição de um indivíduo a um odor (GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001).

Diferentemente de outros poluentes, a avaliação do incômodo olfativo em ar ambiente não é realizada através de uma simples comparação com padrões da legislação. Normalmente, os compostos odorantes ocorrem em baixas concentrações, o que dificulta a sua quantificação (GOAA, 2003).

2.2. Técnicas de avaliação do incômodo olfativo

A caracterização do incômodo olfativo pode ser descrita em função de sua frequência de ocorrência, intensidade, duração, hedonicidade, e localização, dada pela sigla FIDOL (NICELL, 2009; VIEIRA DE MELO *et al*, 2012). Outra maneira de descrever o incômodo olfativo é em função da sua concentração odorante, intensidade, caráter e hedonicidade. Essas variáveis são quantificadas por meio de técnicas que avaliam o incômodo olfativo. Dentre as características

odorantes aquela que é mais quantificada é a concentração (GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001).

O incômodo olfativo pode ser medido através de técnicas analíticas (análises físico-químicas), sensoriais (olfatometria), senso-instrumentais (nariz eletrônico) (CAPELLI *et al*, 2008; GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001). O incômodo olfativo pode ainda ser predito com o auxílio de modelos matemáticos ((RANZATO *et al*, 2012). As técnicas analíticas constituem-se, em geral, de um acoplamento de técnicas, em que, na primeira delas, ocorre uma separação de compostos e, numa segunda etapa, ocorre à identificação e quantificação desses compostos. Um exemplo de aplicação seria a utilização da técnica de cromatografia gasosa em conjunto com a técnica de espectroscopia de massas (CAPELLI; SIRONI *et al*, 2008). As técnicas analíticas permitem a quantificação da concentração odorante (UO/m^3) de forma indireta (a concentração odorante (UO/m^3) pode ser estimada por meio da quantificação dos limites de detecção de cada uma das substâncias da amostra por meio de métodos sensoriais), o que possibilita a utilização de técnicas analíticas em conjunto com modelos de dispersão. Outros aspectos do incômodo olfativo, como intensidade, caráter e hedonicidade devem ser avaliados por técnicas sensoriais ou senso-instrumentais (GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001).

As técnicas sensoriais utilizam o nariz humano. Elas podem ser divididas em técnicas objetivas e subjetivas. As técnicas subjetivas fazem uso do nariz humano, sem o auxílio de outros equipamentos; enquanto que as técnicas objetivas reduzem a subjetividade por meio de sistemas de diluição (GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001). Um exemplo de aplicação de técnica subjetiva é a inspeção de campo, em que jurados previamente treinados avaliam a intensidade de odor em relação a diluições de n-butanol (RANZATO *et al*, 2012). As técnicas objetivas podem ser subdivididas em dois grupos: olfatometria de limiar (quantifica a concentração odorante) e olfatometria de supra-limiar (quantifica a intensidade odorante em função de outro composto de referência). As olfatometrias de limiar dividem-se em olfatometrias de diluição estática e dinâmica. A olfatometria de diluição estática utiliza volumes constantes de diluição, enquanto que a olfatometria de diluição dinâmica utiliza fluxos constantes de diluição. A olfatometria dinâmica é superior à estática, uma vez que seus resultados são mais reprodutíveis, devido a emissão odorante ser contínua no aparelho. Para efetuar-se o cálculo da concentração odorante, realiza-se a diluição da amostra de ar em sucessivas diluições até que esta atinja o limiar desejado (trata-se do Limite de Percepção Odorante – LPO). Uma vez alcançado esse limiar, efetua-se o cálculo através da expressão $C = (Q_0 + Q_t)/Q_0$, em que C é a concentração odorante, Q_0 é o volume ou o fluxo da amostra e Q_t é o volume ou o fluxo necessário para diluir a amostra. No cálculo da concentração, podem ser utilizados dois tipos de limiares: o limiar de percepção e o limiar de identificação. Normalmente, as análises sensoriais são realizadas em função do limiar de percepção. Entretanto, há correntes que questionam esse fato, uma vez

que não se pode dizer que um odor é bom ou ruim se não for possível identificá-lo (GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001).

As técnicas senso-instrumentais fazem uso de instrumentos eletro-eletrônicos que simulam o nariz humano, chamados de narizes eletrônicos. Os narizes eletrônicos necessitam de uma calibração prévia, anterior ao seu uso, e podem ser submetidos a situações em que o odor analisado é tóxico, isto é, situações onde não poderiam ser empregados jurados humanos. Os narizes eletrônicos são atualmente a única tecnologia capaz de analisar, detectar, identificar, qualificar e quantificar continuamente os odores em ar ambiente. Entretanto, a ausência de uma legislação que permita a padronização dessa técnica representa atualmente a maior barreira em sua utilização para fins ambientais (CAPELLI; SIRONI; ROSSO, 2014).

As técnicas de modelagem fazem uso de dados de emissão, dados meteorológicos, dados topográficos e dados de uso do solo, para quantificar a concentração odorante a sotavento da fonte. Entretanto, faz-se necessário validar esses resultados (RANZATO *et al*, 2012). A validação da modelagem de odores não é tão simples quanto para outros poluentes. Técnicas que avaliam o incômodo olfativo a sotavento das fontes, como a inspeção de campo, avaliam o impacto odorante em relação a sua intensidade, enquanto que os modelos avaliam o impacto em função de concentrações. Assim, faz-se necessário utilizar expressões que correlacionem variáveis de concentração e intensidade. A lei de Weber-Fechner e a lei de Steven correlacionam essas variáveis (WRIGHT, 1982 apud GOSTELOW; PARSONS; STUETZ, 2001). Em ambas as leis, a concentração e a intensidade odorante são representadas por C e I , respectivamente, e são constantes de ajuste diferentes para cada odorante (MCGINLEY; MCGINLEY; JEFF, 2000). Outra opção é realizar a comparação em termos de frequência de odor a partir do conceito de hora de odor (RANZATO *et al*, 2012). Considera-se hora de odor aquela que possui incidência de odor por período superior a 10% da sua duração (GOAA, 2003). Outra dificuldade apresentada pelos modelos é o fato de os mesmos realizarem o cálculo das concentrações em bases horárias, enquanto que a percepção odorante ocorre em frações de segundos. Ao longo de uma hora, o limite de percepção odorante observada pode ter sido ultrapassado várias vezes em tempos curtos, quando comparado com a concentração média horária de odor, simulada por um modelo. Entretanto, estas flutuações de pico que podem ter ocorrido (isto é, o limite de percepção pode ter sido ultrapassado diversas vezes em curtos períodos de tempo) fazem com que o odor possa, de fato, ter sido percebido contrariando uma resposta média do modelo (DE MELO LISBOA *et al*, 2006). Assim, uma das soluções práticas para aproximar os resultados dos modelos da percepção odorante real, passa pela transformação das concentrações horárias em concentrações de pico a partir da multiplicação da concentração horária por um determinado fator (CAPELLI *et al*, 2011).

Para medir as taxas de emissão, recomendam-se as técnicas de olfatométrica dinâmica ou de cromatografia gasosa acoplada com espectrometria de massas. Porém, essas técnicas não são adequadas para medições em ar

ambiente (RANZATO *et al*, 2012), uma vez que os compostos sofrem significativa diluição, o que dificulta a aplicação dessas técnicas. Entretanto, Schauburger, Piringer, Knauder, Petz (2011) utilizaram a técnica de cromatografia gasosa para quantificar a taxa de emissão odorante, por meio de modelagem reversa, com o modelo ONorm 9440. As concentrações de cada um dos compostos identificados foram somadas para quantificar a taxa de emissão. Todavia, a utilização de técnicas analíticas na quantificação das taxas de emissão odorante pode gerar resultados inconsistentes, uma vez que podem ocorrer efeitos sinérgicos e de mascaramento de odor. Outro problema que pode ocorrer é a presença de compostos que possuem limites de percepção em concentrações que às vezes não são detectadas por instrumentos analíticos, mas são captadas pelo olfato humano. Em geral, a utilização de técnicas analíticas gera bons resultados quando se dispõe de poucos compostos que se encontrem bem definidos (CAPELLI *et al*, 2008). Em ar ambiente, podem-se utilizar técnicas sensoriais, como a inspeção de campo e o olfatômetro de campo, ou técnicas senso-instrumentais, como o nariz eletrônico, ou ainda, pode-se estimar as concentrações odorantes por meio de modelos matemáticos (RANZATO *et al*, 2012).

2.3. Tipos de modelos de dispersão de odores na atmosfera

A avaliação da dispersão de odores na atmosfera pode ser realizada por meio de modelos físicos e matemáticos. São descritos a seguir, de forma simplificada, os fundamentos da modelagem matemática da poluição atmosférica. Uma descrição pormenorizada dos fundamentos da modelagem gaussiana é apresentada no Anexo. Nessa última seção, são apresentadas, detalhadamente, a origem das equações que fundamentam a formulação dos modelos gaussianos, bem como as simplificações assumidas no processo de obtenção das mesmas. Recomenda-se a leitura do referido anexo, a fim de melhor compreender as aplicações e limitações desses modelos.

Algumas possíveis classificações dos modelos matemáticos de odores provêm das condições simplificadoras admitidas na sua concepção, bem como do sistema de referência escolhido. Os modelos matemáticos de poluição atmosférica baseiam-se na equação de Navier-Stokes (1). Uma vez que não há uma solução analítica fechada para esse conjunto de equações, deve-se optar pela utilização de condições simplificadoras que garantam a solução analítica da mesma. Outra alternativa é a solução numérica dessa equação através de aproximações (BOEKER *et al*, 2000). A equação vetorial de Navier-Stokes é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \text{grad})u + \text{grad } p = \frac{1}{\text{Re}} \Delta u + g, \quad (1)$$

em que:

u é o campo de vento;

p é a pressão;

g são as forças externas;

Re é o número de Reynolds.

Modelos gaussianos pressupõem condições meteorológicas estacionárias, para que se possibilite a resolução analítica da equação de Navier-Stokes (BOEKER et al., 2000). Além do fato de desconsiderarem a variação das condições meteorológicas ao longo de cada hora simulada, esses modelos também não consideram as concentrações dos períodos passados, no cálculo das concentrações dos períodos futuros. Em geral, esses modelos não requerem muitos dados de entrada, são de utilização mais fácil e demandam menor capacidade computacional (MFE - MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT, 2004). Como exemplos, podem ser citados os seguintes modelos: ADMS, AERMOD, AODM, ISC3, AUSPLUME, Stink, CAM, Tropos e SYMOS'97.

Outra equação que aparece na modelagem da dispersão de poluentes atmosféricos é a equação de advecção e difusão. Dois fenômenos básicos regem a equação de advecção e difusão: a difusão proveniente de microturbulência e a advecção (BOEKER et al., 2000). A equação de advecção e difusão é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \lambda \Delta C - \vec{u} \cdot \text{grad} C + Q, \quad (2)$$

em que:

C é a concentração;

λ é o coeficiente de difusão;

\vec{u} é o campo de vento;

Q é o termo fonte;

$\lambda \Delta C$ é a difusão turbulenta;

$\vec{u} \cdot \text{grad} C$ é o termo advectivo.

A equação de advecção e difusão pode ser obtida quando se utilizam hipóteses mais simples que as utilizadas na dedução da equação de Navier-Stokes, e sua formulação com as respectivas condições iniciais e de fronteira, assim como a dedução de sua solução podem ser vistas no anexo ou em (STOCKIE, 2011). Essa equação é resolvida fazendo-se uso da transformada de Laplace, fornecendo-se com isto a solução do tipo gaussiana. A solução gaussiana básica (3), proveniente da equação de advecção e difusão (2), possibilita o cálculo das concentrações médias em condições idealizadas, isto é, sem edificações e dispersão não perturbada. A solução (3) apresenta um termo de reflexão da concentração para situações em que a pluma esteja abaixo do nível do solo (BOEKER et al., 2000). A expressão da solução gaussiana básica é apresentada abaixo:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u_h \sigma_y \sigma_z} \cdot e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} \cdot \left(e^{-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}} \right), \quad (3)$$

em que:

$C(x, y, z)$ é a concentração na localização (x, y, z) em $UO \cdot m^{-3}$;

Q é o termo fonte ($UO \cdot h^{-1}$);

u_h é a direção média do vento em m/s na direção do eixo x ;

σ_y, σ_z são os parâmetros de dispersão horizontal e lateral, em metros;

h é a altura efetiva da chaminé, em metros.

É importante notar que a equação (3) mantém uma variável advectiva e duas difusivas. As variáveis difusivas são representadas pelos sigmas, enquanto que a variável advectiva é representado pela velocidade média do vento. O fato da variável responsável pela advecção se encontrar no denominador da equação implica em uma alta sensibilidade do modelo a baixas velocidades. Quando a velocidade tende para zero a concentração tende para infinito, ou seja, baixas velocidades do vento provocam concentrações elevadas, superiores às que podem ocorrer na prática. Esse fato constitui uma das limitações da formulação gaussiana, sobretudo na simulação da dispersão odorante, que apresenta seus piores episódios sob condições de ventos de baixa intensidade.

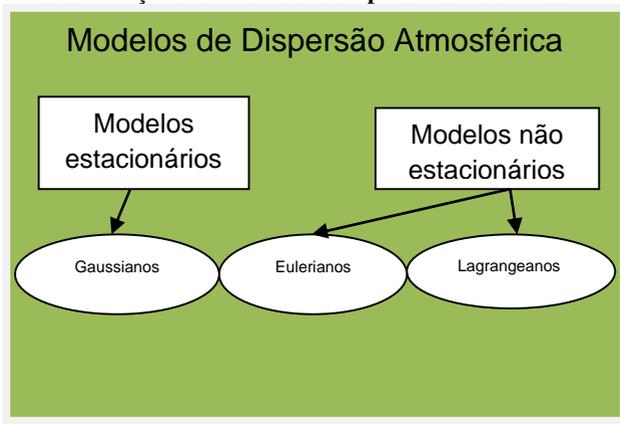
Modelos não estacionários, diferentemente dos estacionários, consideram o acúmulo das concentrações nos períodos simulados e consideram também a trajetória percorrida pelo poluente, da fonte ao receptor, no cálculo de concentrações. Modelos não estacionários podem ser do tipo lagrangeano ou euleriano. Os modelos lagrangeanos possuem seu sistema de referência na partícula, enquanto que modelos eulerianos adotam um sistema fixo de coordenadas. Modelos lagrangeanos seguem a trajetória da partícula ou do seu centroide (no caso do tipo puff), enquanto que os eulerianos optam pela utilização de um sistema de referência de grade fixa. Em geral, os modelos não estacionários solicitam um maior número de dados de entrada, um usuário bem mais qualificado e a utilização de computadores com melhor desempenho que aqueles requeridos na utilização dos modelos gaussianos. Além disso, tendem a gerar melhores resultados que os obtidos por meio dos modelos gaussianos, uma vez supridos adequadamente os seus inputs. Como exemplos de modelos não estacionários, podem ser citados os seguintes: o modelo lagrangeano de partícula AUSTAL e os modelos do tipo puff: CALPUFF, INPUFF e HYSPLIT.

Modelos numéricos obtém uma solução aproximada para equação de Navier-Stokes através da discretização da equação em uma malha de pontos escolhidos. Uma grande variedade de soluções surge então oriundas de diferentes modelos numéricos, incluindo modelos de volumes finitos, diferenças finitas e elementos finitos. Esses modelos possuem o mais alto nível de complexidade de implementação, demandam do usuário uma elevada compreensão da física modelada, e requerem a utilização de computadores de altíssima capacidade de

processamento. Uma vez que esses modelos são não estacionários, podem ser classificados como lagrangeanos ou eulerianos. Como exemplos de modelos numéricos, podem ser citados os seguintes modelos: os modelos CFX, Fluent, Miskam e NaSt3D.

A Figura 1 apresenta os três principais grupos de modelos descritos neste tópico.

Figura 1 – Classificação dos modelos de dispersão atmosférica.



Fonte: Elaborado pelo autor.

São descritos, na sequência, dois modelos gaussianos de dispersão atmosférica que serão utilizados neste trabalho.

2.4. Descrição do modelo SYMOS'97

O modelo gaussiano SYMOS'97 é utilizado como modelo de referência na República Tcheca. O modelo é capaz de simular a dispersão contínua de fontes únicas ou múltiplas as quais podem ser pontuais, superficiais (área), volumétricas e linha. O modelo inclui um algoritmo para simular terrenos complexos e pode incluir os decaimentos provenientes da deposição atmosférica ou da presença de espécies reativas. Um esquema de cinco classes de estabilidade desenvolvido por Bubnik e Koldovsky, para a República Tcheca, foi incluído no modelo. O esquema foi desenvolvido com base em observações de estações meteorológicas e sinóticas. Das cinco classes de estabilidade incluídas no modelo, três delas são estáveis, uma é neutra e outra é convectiva. O modelo é adequado ao cálculo de concentrações anuais médias, concentrações horárias máximas e precipitação anual de particulado. O modelo não é adequado para simular condições de calmaria ou vento fraco (KEDER; BUBNIK; MACOUN, 2003; KEDER, 2008a), podendo inclusive simular inversões térmicas. Porém, não é indicado para simular condições de cânions urbanos. A distância máxima indicada para as

simulações é de 100 km em relação à fonte emissora (BUBNÍK; KEDER; MACOUN, 1998).

A expressão utilizada para fontes pontuais gasosas é descrita a seguir:

$$C = \frac{10^6 \cdot M}{2\pi\sigma_y\sigma_z u_{h1} + V_s} \cdot \exp\left(\frac{-y_L^2}{2\sigma_y^2}\right) \cdot \exp\left(-k_u \cdot \frac{x_L}{u_{h1}}\right) \cdot K_h \cdot \left[\exp\left(-\frac{(z' - h_1)^2}{2\sigma_z^2}\right) + (1-v) \cdot \exp\left(-\frac{(z'' - h_1)^2}{2\sigma_z^2}\right) + v \cdot \exp\left(-\frac{(z''' - h_1)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (4)$$

em que:

M é a taxa de emissão em g/s;

σ_y é o parâmetro de dispersão horizontal transversal;

σ_z é o parâmetro de dispersão vertical transversal;

u_{h1} é a velocidade do vento na altura h_1 ;

V_s é o volume de gás que sai da chaminé corrigido para condições normais de temperatura e pressão (0°C, 1013,25 Pa);

y_L é a distância de referência do ponto de origem em relação a perpendicular à direção média do vento;

x_L é a distância de referência a partir do ponto de origem da direção média do vento;

k_u é o coeficiente de deposição, incluindo deposições seca e úmida e transformação química;

K_h é o fator de amortecimento nos pontos de referência para altitudes elevadas;

h_1 é a altura efetiva após todas as correções;

v é o coeficiente de terreno ondulado;

z' é a coordenada vertical corrigida para espalhamento direto;

z'' – coordenada vertical corrigida para reflexão na estimativa mais baixa;

z''' é a coordenada vertical corrigida para reflexão na estimativa superior vertical.

A expressão (4), utilizada no cálculo do modelo SYMOS'97, mantém estrutura bastante semelhante à da equação gaussiana básica apresentada em (3). Ambas as equações apresentam o termo advectivo no denominador, o que torna essas expressões sensíveis a baixos valores de velocidade. Porém, diferentemente da expressão (3), a expressão (4) apresenta um esquema de ponderação de coeficientes como uma tentativa para descrever efeitos de terrenos complexos. A

expressão (4) contempla ainda o cálculo da deposição do poluente simulado, através do coeficiente k_u , que também pode ser utilizado para descrever as transformações químicas que esse poluente poderá sofrer.

2.5. Descrição do modelo AERMOD

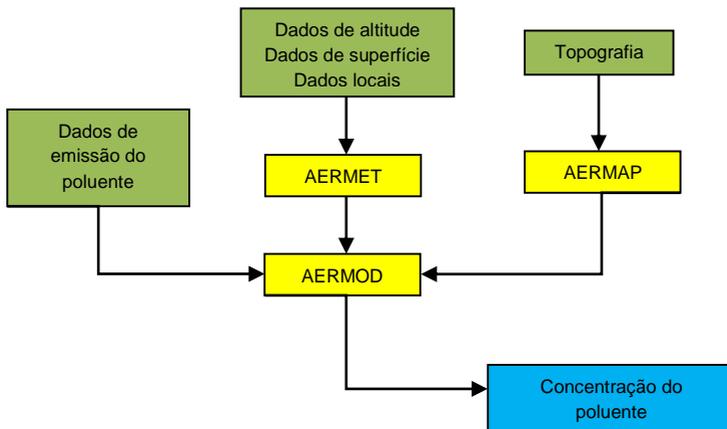
O modelo AERMOD é resultado do esforço conjunto da Agência Americana de Proteção Ambiental (EPA – ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, 2004) e da Sociedade Americana de Meteorologia (AMS). Ambas as organizações montaram um grupo de trabalho, denominado AERMIC (AMS/EPA *Regulatory Model Improvement Committee*), que desenvolveu o modelo.

A estrutura do modelo constitui-se de módulos integrados que alimentam o módulo principal AERMOD (Figura 2). As funções de seus principais módulos são descritas a seguir: o módulo AERMAP (processa dados de topografia); o módulo AERMET (processa dados meteorológicos); enquanto que o módulo AERMOD (calcula a concentração ao nível do solo com base nas informações pré-calculadas nos módulos anteriores). Outros dois módulos, o AERSURFACE e o BPIPRIIME, compõem a estrutura do modelo. O AERSURFACE estima dados de albedo, Razão de *Bowen* e rugosidade, com base em dados digitalizados de uso do solo, enquanto que o BPIPRIIME calcula os efeitos de turbulência, devido à presença de edificações, conhecido como *building downwash*.

Os seguintes tipos de fonte podem ser simulados pelo modelo: fontes pontuais, superficiais (área), volumétricas e linha (apenas nas versões comerciais do modelo). O modelo pode simular uma única fonte ou múltiplas fontes. Dentre as opções de fontes pontuais podem ser simuladas a emissão vertical, horizontal ou com recobrimento (chapéu chinês). As opções de emissão vertical e de emissão com recobrimento no topo da chaminé encontram-se em teste, e não podem ser utilizadas se a opção *DEFAULT*¹ for selecionada.

¹ A opção *DEFAULT* é a opção padrão ou regulatória.

Figura 2 – Fluxograma da estrutura do modelo de dispersão AERMOD.



Fonte: (CUNHA, 2009).

O modelo é indicado para a realização de simulações em um raio de até 50 km da fonte emissora. Ele inclui termos de decaimento para a simulação de algumas espécies químicas e dispõe de opções para simular as deposições seca e úmida (EPA – ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, 2004).

Ao longo de cada hora simulada, o modelo considera as condições atmosféricas como se elas permanecessem uniformes ao longo daquele período, e desconsidera o acúmulo de poluentes da hora anterior, no cálculo de concentrações da hora subsequente. Devido a essas simplificações, provenientes da sua formulação, o modelo apresenta resultados mais representativos para períodos de simulação mais longos.

Situações de calmaria não são adequadamente modeladas por meio do modelo AERMOD. Nessas condições, o poluente demora mais para se dissipar, o que normalmente está ligado aos piores cenários de poluição. Condições de calmaria ocorrem, em geral, nos períodos noturnos e em condições de inversão térmica (MFE - MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT, 2004). Apesar dessas limitações, o modelo é capaz de prover bons resultados, desde que utilizado adequadamente.

2.5.1. AERMAP

O AERMAP é o módulo responsável pelo processamento dos dados topográficos. Esse módulo permite a simulação de terrenos simples (planos) e terrenos complexos (com elevações). Para tal, devem ser definidos a projeção dos dados de entrada, o domínio da modelagem, a ancoragem da fonte e dos receptores, a quantidade e a localização das fontes e receptores, e a elevação dos receptores. O módulo calcula a altitude da base das fontes e dos receptores e a

hill height scale (altura que mais influencia na dispersão de um poluente). As alturas das fontes e receptores podem ser extraídas a partir do arquivo digital de elevação, ou podem ser informadas manualmente.

2.5.2. AERMET

O módulo ou processador AERMET é o responsável por preparar a entrada de dados meteorológicos para que o AERMOD possa simular a dispersão do poluente. Ele dispõe de três estágios de processamento. O primeiro estágio consiste na extração e avaliação dos dados. No segundo estágio, os dados de superfície e de altitude (sondagem) são mesclados para períodos de 24 horas. No terceiro, são inseridos os valores de albedo², comprimento de rugosidade³, e Razão de *Bowen*⁴. Ao final da terceira etapa, são gerados dois arquivos: .SFC (referente aos dados de superfície) e .PFL (referente aos dados de perfil atmosférico). Esses dois arquivos são utilizados como dados de entrada do modelo AERMOD.

O modelo requer, minimamente, a utilização de medições horárias de temperatura, cobertura de nuvens, pressão, direção e velocidade do vento e de pelo menos uma sondagem diária, a fim de estimar o valor das variáveis do terceiro estágio. Valores de ventos, em frequência superior a horária, podem ser inseridos no modelo por meio do pré-processador AERMINUTE, que efetua o cálculo das médias de direção e velocidade do vento a partir de valores sub-horários desses parâmetros (EPA – ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY, 2011).

O módulo AERMET processa três categorias de dados meteorológicos: dados de superfície (dados horários de variáveis meteorológicas); dados de altitude (obtidos através de radiossondagens, realizadas pelo menos uma vez ao dia); e dados locais (retirados de estações meteorológicas dispostas no local de estudo).

Caso não existam sondagens representativas para o local simulado pode-se recorrer à utilização do estimador de altitude. O estimador só é disponibilizado nas versões comerciais do modelo. Maiores detalhes podem ser encontrados em Turtos Carbonell, Gacita, Oliva, Garea, Rivero, Ruiz (2010). Outra opção é a utilização de modelos meteorológicos de mesoescala, como o WRF e o MM5, para a geração dos dados de sondagem. Maiores detalhes sobre a validade da

² Albedo - fração total refletida, sem absorção para o espaço da radiação que incide na superfície.

³ Comprimento de rugosidade superficial - refere-se a altura em que a velocidade do vento horizontal é zero, o que ocorre em decorrência de obstáculos presentes na superfície.

⁴ Razão de Bowen - Indica a umidade da superfície e é usada para determinar os parâmetros de camada limite convectiva em condições convectivas. A razão de Bowen é a razão entre calor sensível e o calor latente.

utilização de modelos meteorológicos, em conjunto com modelos de dispersão, pode ser vista em De Carvalho Souza (2011).

2.5.3. AERMOD

O módulo AERMOD assimila os dados fornecidos pelos módulos AERMAP e AERMET e realiza o cálculo das concentrações para a altura estabelecida pelo usuário no módulo AERMAP.

Cinco tipos de plumas diferentes (direta, indireta, penetrada, injetada e estável) podem ser utilizadas nas simulações. Dessas, três referem-se a condições convectivas (direta, indireta e penetrada), quando o comprimento de Monin-Obukhov é menor do que zero. As outras duas (injetada e estável) são referentes a condições estáveis (CUNHA, 2009).

Nas condições estáveis, considera-se a distribuição gaussiana na horizontal e na vertical; enquanto que, nas condições convectivas, considera-se a distribuição gaussiana apenas na horizontal, e considera-se distribuição bi-gaussiana na vertical (CIMORELLI *et al*, 2004; CUNHA, 2009).

A pluma direta é emitida no interior da camada de mistura e apresenta ausência de interação da pluma com o topo da camada de mistura. A pluma indireta também se encontra na camada de mistura, entretanto a sua parte superior apresenta interação com o topo da camada de mistura. A pluma penetrada é liberada no interior da camada de mistura, porém penetra o nível mais estável acima, devido a sua flutuabilidade. A pluma injetada ocorre em situações convectivas, em que a altura de emissão da pluma é superior à altura de mistura. Os cálculos para esse tipo de pluma são realizados da mesma forma que para a pluma estável, mas são contabilizados a turbulência e os ventos da camada de mistura, quando o poluente adentra a camada de mistura e chega até aos receptores. Segue abaixo, a descrição da expressão gaussiana utilizada no modelo para calcular concentrações sob condições estáveis. As variáveis e parâmetros dessa formulação estão definidos no Quadro 1 (CIMORELLI *et al*, 2004; CUNHA, 2009).

A expressão (5) possui forma muito semelhante a da expressão da solução gaussiana básica (3). O termo advectivo, assim como nas equações (3) e (4), aparece no denominador:

$$C_s \{x_r, y_r, z\} = \frac{Q}{\sqrt{2\pi u \sigma_{zs}}} \cdot F_y \cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\exp \left(-\frac{(z - h_{es} - 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zs}^2} \right) + \exp \left(-\frac{(z + h_{es} + 2mz_{ieff})^2}{2\sigma_{zs}^2} \right) \right], \quad (5)$$

em que

$$F_y = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y}} \exp \left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2} \right) \right).$$

Quadro 1 – Descrição das variáveis da equação gaussiana utilizada pelo AERMOD

z	Concentração no ponto x, y, z
x_r, y_r	Localização do receptor
z	Altura acima do nível do mar (m)
Q	Taxa de emissão da fonte (g/s)
u	Velocidade média do vento (m/s)
σ_{zs}	Dispersão vertical total na camada limite convectiva
m	Número de fontes
h_{es}	Altura da pluma (altura da chaminé + elevação da pluma)
z_{ieff}	Altura de mistura mecânica da camada limite
m	Número de imagens fonte (WEIL; CORIO; BROWER, 2011)

Fonte: Elaborado pelo autor.

Na expressão (5), F_y , função de distribuição horizontal com meandro, refere-se ao fator que multiplica a taxa de emissão em (3). Assim, a expressão (5) é basicamente a mesma que a apresentada em (3).

2.6. Algoritmo PRIME e Building Downwash

O algoritmo PRIME, incluído através do módulo BPIPRIME, foi anexado ao modelo AERMOD para incluir o efeito da turbulência conhecido como efeito *downwash*, devido à presença de obstáculos na vizinhança da chaminé. O efeito *downwash* pode ser descrito em função de dois efeitos que o compõe: o *stack downwash* e o *building downwash*.

A Figura 3 apresenta o efeito de *building downwash* ocasionado pela presença de um edifício. À sotavento do edifício, a pluma de poluentes sofre uma depleção em relação ao escoamento, devido à presença de uma zona de baixa pressão, na parte posterior do edifício.

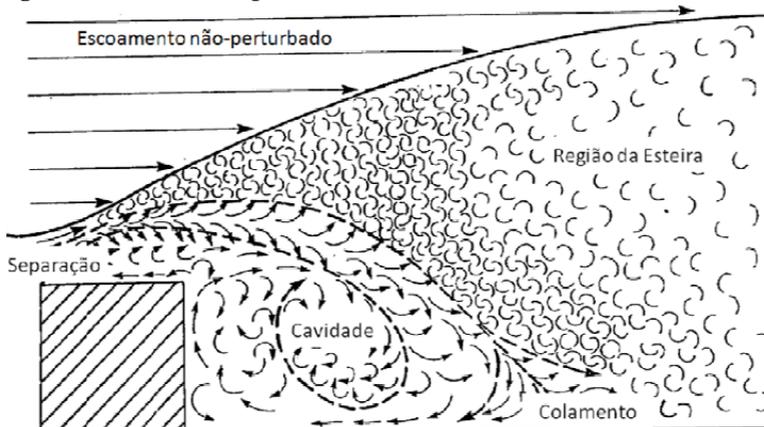
Figura 3 – Efeito *Building Downwash*.



Fonte: (CUNHA, 2009).

Na parte posterior do obstáculo, a camada limite sofre um descolamento em relação ao escoamento. Esse descolamento ocorre devido à formação de uma zona de baixa pressão, que gera uma recirculação, que por sua vez gera a formação de um gradiente adverso ao escoamento do fluido. Esse efeito provoca a formação de *vortex* que resfriam o ar e dificultam a ascensão da pluma.

Figura 4 – Efeito *Building Downwash*.



Fonte: (CUNHA, 2009).

Uma vez que o efeito *downwash* pode acarretar a elevação de concentrações à jusante do obstáculo, a USEPA normatizou, em seu manual de GEP (*Good Engineering Practice* – Boas práticas de engenharia) que alturas de chaminé evitam efeitos *downwash*. O algoritmo PRIME foi inicialmente concebido para ser utilizado com classes de Pasquill-Gifford. Contudo, foi

adaptado para ser utilizado também em conjunto com os perfis de turbulência da teoria da similaridade, uma vez que o modelo AERMOD faz uso desses últimos. O algoritmo utiliza um esquema que efetua a soma ponderada das concentrações calculadas pelo AERMOD, sem e com o uso do PRIME. À medida que se afasta do obstáculo, esse esquema de ponderação reduz a influência das concentrações calculadas pelo PRIME (CUNHA, 2009). A equação de ponderação utilizada no algoritmo é descrita abaixo:

$$C_{\text{total}} = \gamma C_{\text{prime}} + (1 - \gamma) C_{\text{AERMOD}}, \quad (6)$$

em que:

C_{prime} é a concentração estimada pelo PRIME;

C_{AERMOD} é a concentração estimada pelo AERMOD;

γ é o parâmetro de ponderação.

O modelo AERMOD detecta se os efeitos de *building downwash* são ou não negligíveis; caso o sejam, o algoritmo é eliminado do cálculo das concentrações (CUNHA, 2009). À medida que o escoamento se distancia do obstáculo, às influências deste no escoamento tendem a reduzir-se e, então, o escoamento retorna às características anteriores à presença do obstáculo (MAÍZI *et al.*, 2010).

2.7. Classes de estabilidade – teoria da similaridade

Diferentemente de outros modelos gaussianos, como o ISC3 (modelo substituído pelo AERMOD), que utilizam classes de estabilidade atmosférica, o modelo AERMOD faz uso da teoria da similaridade na determinação da estabilidade atmosférica. A seguir, é apresentada uma breve descrição da teoria da similaridade e de suas classes de estabilidade equivalentes, juntamente com uma descrição das condições atmosféricas de cada uma dessas classes.

A teoria da similaridade de Monin-Obukov é dependente de três grandezas principais, quais sejam: u_* , z e H .

A velocidade de fricção é dada por u_*

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}},$$

em que ρ é a densidade do ar, e τ é a tensão de cisalhamento, que é dada por

$$\tau(y) = \mu \frac{\partial u}{\partial y},$$

em que μ é a viscosidade dinâmica do fluido, u é a velocidade do fluido ao longo do limite e y é a altura acima do limite.

As outras duas variáveis, z e H , são respectivamente a altura e o fluxo de calor sensível. O fluxo de calor sensível é positivo durante o dia, período no qual é emitido da atmosfera para a terra, e negativo durante a noite, período no qual é emitido da terra para a atmosfera.

Duas dessas três grandezas básicas estão presentes no cálculo do comprimento de Monin-Obukov, o qual é utilizado para determinar a estabilidade atmosférica. O comprimento de Monin-Obukov é dado por

$$L = \frac{\bar{\theta} u_*^3 \rho c_p}{kgH},$$

em que $\bar{\theta}$ é a temperatura potencial, ρ é a densidade do ar, c_p é o calor específico à pressão atmosférica constante, g é a gravidade, e k é a constante de Von Karman, com limites entre 0,35 e 0,42.

Em dias de sol, sem nuvens, o fluxo de calor sensível é elevado, o que reduz o comprimento de Monin-Obukov. Na prática, as massas de ar próximas à superfície aquecem-se rapidamente ocasionando um fluxo ascendente de ar quente e um descendente de ar frio, que ocupa o lugar do ar que subiu. Isso significa que há predominância de efeitos convectivos, o que caracteriza a classe de estabilidade A. À medida que o fluxo de calor sensível diminui, os efeitos mecânicos passam a predominar, ou seja, a velocidade de fricção torna-se a grandeza predominante no cálculo do comprimento de Monin-Obukov. Isso começa a ocorrer gradativamente na classe B e, em maior escala, na classe C. Já em ocasiões de forte nebulosidade, o fluxo radioativo é muito pequeno, o que faz com que o comprimento de Monin-Obukov fique extramente grande. Esse efeito torna-se evidente na classe D.

No período noturno, o fluxo de calor se inverte, tornando-se negativo. Nesse período, a terra passa a emitir calor para a atmosfera e aquece o ar próximo a superfície, que ascende até uma determinada altura. Essas características são apresentadas nas classes de estabilidade E e F. Uma descrição das equivalências, entre os valores apresentados nas classes de estabilidade e seus respectivos valores de comprimento de Monin-Obukov, pode ser encontrado no Quadro 2.

Quadro 2 – Classes de estabilidade e comprimentos de Monin-Obukov. Adaptado do material didático apresentado pelo professor Neyval R. Costa Jr.

Classe de estabilidade	L (metros)
A – muito instável	-2 a 3
B – moderadamente instável	-4 a 5
C – levemente instável	-12 a 15
D – neutra	$\pm\infty$
E – levemente estável	35 a 75
F – moderadamente instável	8 a 35

Fonte: http://www.inf.ufes.br/~neyval/Fund_Dispos_Gradua/1_Introducao.pdf

Uma vez calculado o comprimento de Monin-Obukov, pode-se efetuar o cálculo da altura em que os efeitos térmicos e mecânicos se igualam. Tem-se que a razão entre a altura e o comprimento de Monin-Obukov é dada por

$$\xi = \frac{z}{L}.$$

Assim, quando a altura (z) é igual ao comprimento de Monin-Obukov (L) ($\xi = 1$), os efeitos de turbulência mecânica e térmica se igualam. Acima desse valor de altura ($z > L$), predominam os efeitos térmicos; enquanto que abaixo ($z < L$), predominam os efeitos mecânicos. Maiores detalhes podem ser encontrados em Moreira; Tirabassi; Moraes (2008).

2.8. Análise de Sensibilidade

O modelo AERMOD faz uso de um grande número de variáveis de entrada, sobretudo no módulo meteorológico AERMET. Alguns trabalhos foram desenvolvidos com o objetivo de verificar quais dessas variáveis requerem maior ou menor precisão para o cálculo das concentrações. São descritos, a seguir, alguns estudos que avaliaram a sensibilidade do modelo AERMOD a diversos parâmetros de entrada, sobretudo os parâmetros de uso do solo: albedo, Razão de *Bowen* e rugosidade.

Grosch e Lee (1999) avaliaram a sensibilidade do modelo AERMOD na simulação de diferentes cenários de uso do solo, para quatro diferentes alturas de emissão. Simulou-se a variação do albedo, Razão de *Bowen* e rugosidade para emissão superficial, a 35m, 100m e 200m. A análise de sensibilidade foi realizada em duas etapas: inicialmente, foram variados todos os parâmetros ao mesmo tempo para quatro diferentes cenários; em uma segunda etapa, fixou-se um cenário base, correspondente ao valor médio das variáveis em análise, e variou-se uma a uma, cada variável. Os estudos revelaram que a rugosidade foi a variável mais sensível às variações e que, a medida que altura de emissão aumentava, os efeitos de uso do solo na dispersão eram cada vez menos sentidos.

Long, Cordova e Tanrikulu (2003) avaliaram a sensibilidade do modelo AERMOD aos parâmetros de albedo, Razão de *Bowen*, rugosidade, cobertura de nuvens, radiação solar, temperatura ambiente, população urbana e perfil de temperatura, na simulação de três fontes de emissão. Verificou-se que a rugosidade foi o parâmetro que teve maior influência no cálculo de concentrações. A variação da rugosidade, em relação à concentração, apresentou comportamento diretamente proporcional para uma fonte elevada, e inversamente proporcional para uma fonte superficial e uma fonte volumétrica.

Karvounis, Deligiorgi e Philippopoulos (2007) avaliaram a sensibilidade do modelo AERMOD a parâmetros de uso do solo diante de diversas condições climáticas. Foram utilizados dois anos de dados meteorológicos. Inicialmente, separaram-se os dados meteorológicos através de uma análise de *cluster K-means*. Através dessa análise, os dados foram separados em 10 diferentes grupos de condições meteorológicas e, para cada um desses grupos, variaram-se os parâmetros de albedo, Razão de *Bowen* e rugosidade. Verificou-se que, no cálculo das concentrações, o parâmetro de uso do solo foi o mais sensível às variações. Recomendou-se que os valores de entrada, utilizados no modelo, fossem obtidos a partir de medições de campo e não apenas com base nas tabelas do modelo, uma vez que o modelo sofre significativas variações em função desses valores.

Faulkner, Shaw e Grosch (2008) simularam a dispersão de uma fonte área superficial de 1000m x 1000m. A fonte emitia material particulado a uma taxa homogênea de $10 \mu\text{g}/\text{m}^2/\text{s}$. Variaram-se os parâmetros de albedo, Razão de *Bowen*, radiação solar média, velocidade do vento, altura de mistura, temperatura média e cobertura de nuvens. A sensibilidade de cada variável foi testada, em sucessivos intervalos de resolução, de acordo com os limites máximos e mínimos apresentados no Quadro 3. Enquanto que uma das variáveis sofria variação as demais permaneciam constantes de acordo com um cenário base. Após a realização dos testes, verificou-se que a variação de Albedo não modificou as concentrações horárias, mas alterou as concentrações diárias. A variação da Razão de *Bowen* não alterou as concentrações calculadas pelo modelo. A variação de rugosidade superficial alterou, significativamente, os valores calculados de concentração de forma inversamente proporcional, isto é, os maiores valores de concentração foram obtidos para os menores comprimentos de rugosidade superficial. A variação da radiação solar não alterou os cálculos de concentração do modelo. Os autores justificaram esse resultado em função das condições escolhidas serem preminentemente mecânicas e não convectivas, para o cenário base. Em condições convectivas a atmosfera tende a se tornar instável, favorecendo a dispersão atmosférica. A variação da velocidade do vento alterou as concentrações estimadas pelo modelo de forma inversamente proporcional, isto é, maiores velocidades implicaram em menores concentrações máximas. O modelo apresentou grande sensibilidade para o cálculo de concentrações em baixas velocidades ($< 3 \text{ m/s}$). A variação da temperatura apresentou menores concentrações para elevadas temperaturas. A variação da cobertura de nuvens afetou a distância alcançada pela pluma. Em condições de cobertura total de

nuvens, a pluma não se dispersou muito; enquanto que em condições em que não havia cobertura de nuvens, a pluma alcançou maiores distâncias. Não houve variações na altura de mistura no AERMOD – o modelo calcula esse parâmetro a partir de outras variáveis meteorológicas como: cobertura de nuvens, temperatura e ângulo de incidência solar. Portanto, não houve variação artificial desse parâmetro. De modo geral, as variáveis que se revelaram mais sensíveis às variações foram a rugosidade da superfície e a velocidade do vento. Isso indica que deve-se buscar uma maior precisão para esses dois parâmetros, a fim de serem obtidas simulações mais realísticas das situações em estudo.

Quadro 3 – Limites máximos e mínimos das variáveis testadas

Variável	Mínimo	Máximo	Resolução
Albedo	0,1	0,9	0,05
Razão de <i>Bowen</i>	0,1	10	0,1
Rugosidade da Superfície (m)	0,001	3,7	0,01 para $0,001 < RS < 0,1$ 0,1 para $0,1 < RS < 3,7$
Radiação solar média (W/m^2)	400	1200	50
Velocidade do vento (m/s)	1	30	1
Altura de Mistura (m)	20	2000	20 para $20 < z < 300$ 50 para $300 < z < 2000$
Temperatura Média (K)	270	310	5
Cobertura de Nuvens (décimos)	0	10	1

Fonte: Faulkner, Shaw e Grosch (2008).

Todos os estudos citados apresentaram uma grande influência da rugosidade no cálculo das concentrações realizado pelo modelo. Alturas elevadas de emissão reduzem a influência dos parâmetros de uso do solo, uma vez que reduzem a influência da camada limite, sobretudo no parâmetro de rugosidade do solo. Outro parâmetro muitíssimo importante é a velocidade do vento, que revelou-se ter elevada sensibilidade, sobretudo em baixas velocidades ($< 3m/s$). Esse fato decorre da concepção gaussiana do modelo, que faz uso do termo advectivo no denominador, ou seja, baixas velocidades geram elevadas concentrações.

2.9. Descrição do experimento de Uttenweiler

Foram realizados 15 experimentos (B até O), sendo um deles preliminar. Cada experimento teve duração de 10 minutos, durante os quais foram liberados pela chaminé pequenos volumes de gás traçador SF₆ e gás odorante de suinocultura. A sotavento da chaminé foram posicionados sensores de SF₆, ao

lado de 11/12 jurados⁵. Um termo-anemômetro registrava, a cada 10 segundos, medidas de temperatura, direção e velocidade do vento. Havia ainda um anemômetro de copo que registrava a direção e a velocidade do vento a cada 5 minutos. Paralelamente, realizaram-se duas medições de concentração de gás traçador, enquanto os jurados anotavam as intensidades odorantes percebidas em uma escala de 0-6, conforme a norma alemã VDI 3882 – Parte 1 (1992, apud VIEIRA, 2013) (Quadro 4), nos mesmos intervalos de tempo. O experimento foi realizado nos dias 12 e 13 de dezembro de 2000 e no dia 31 de outubro de 2001. Em todos os experimentos, havia cobertura de nuvens suficiente para impedir que as condições atmosféricas se tornassem turbulentas, e as velocidades do vento não se encontravam nas faixas de calmaria (BÄCHLIN; RÜHLING; LOHMEYER, 2002).

Quadro 4 – Escala de intensidades odorantes de 0-6.

Valor Numérico	Descrição do odorante
6	Extremamente forte
5	Muito forte
4	Forte
3	Distinto
2	Fraco
1	Muito fraco
0	Não perceptível

Fonte: VDI 3882 – Parte 1 (1992, apud VIEIRA, 2013).

2.10. Simulações do experimento de Uttenweiler

Aubrun e Leitl (2004) realizaram, em um modelo físico reduzido, a reprodução do experimento de Uttenweiler. Reproduziram-se os experimentos C, F e G, em escala reduzida 1:400, em um experimento análogo ao de campo, no túnel de vento. O modelo foi testado no instituto meteorológico da Universidade de Hamburgo. Os dados dos experimentos de campo possibilitaram a validação dos experimentos do túnel de vento. Ademais, o experimento do túnel de vento propiciou que fossem testadas configurações que não são encontradas em experimentos de campo.

Vieira de Melo, Santos, Mavroidis, Reis Junior (2012) realizaram estudo comparativo da dispersão odorante, utilizando os dados do modelo físico reduzido de túnel de vento, descrito anteriormente, em que foram avaliados os modelos algébricos AERMOD e CALPUFF. O modelo físico reduzido constituía-se de um conjunto de dois edifícios e uma chaminé. Ambos os modelos incorporam o algoritmo PRIME, que contempla a sobre-elevação da pluma e a dispersão ao redor de obstáculos (*building downwash*). Considerando-se que

⁵ Alguns experimentos foram realizados com 11 jurados apenas, enquanto outros foram realizados com todos os 12 jurados.

ambos os modelos calculam as concentrações em bases horárias, utilizou-se a equação $C_1/C_2 = (t_1/t_2)^P$ para transformar as concentrações horárias, em concentrações de pico para menores períodos. Nessa equação, C_1 é a máxima concentração média para o menor período de tempo, (t_1), e C_2 é a máxima concentração média para o maior período de tempo, (t_2). Comparou-se ainda, apenas para o modelo CALPUFF, os resultados obtidos através da equação anterior, com os resultados obtidos através da equação $\sigma_{y(t)} = \sigma_{y(t_0)} (t/t_0)^P$, em que $(\sigma_{y(t)})$ e $(\sigma_{y(t_0)})$ são valores de (σ_y) , para um período mais curto e para um período mais longo, respectivamente. Em ambas as transformações realizadas no modelo CALPUFF, foram utilizados os coeficientes de dispersão de Pasquill-Guifford.

Os ajustes para transformar concentrações horárias em concentrações de pico revelaram que aquelas calculadas por meio da equação $C_1/C_2 = (t_1/t_2)^P$ geraram concentrações mais elevadas que as calculadas pela equação de $\sigma_{y(t)}$.

Nas proximidades do conjunto, ambos os modelos apresentaram resultados que subestimaram as concentrações para algumas direções do vento e superestimaram as concentrações para outras direções do vento. Das direções de vento testadas, aquela que mais se assemelhou às direções de vento do experimento de campo foi a de 220 graus. Nessa direção, ambos os modelos subestimaram as concentrações nas proximidades dos edifícios. De modo geral, as simulações apresentaram melhores resultados para ambos os modelos à medida que houve um afastamento do complexo. Segundo os autores, isso se deve, provavelmente, a uma menor influência dos edifícios. Os resultados indicaram que o modelo AERMOD é mais adequado que o modelo CALPUFF para simulações de curta distância, enquanto que o CALPUFF apresentou melhores resultados que o AERMOD para maiores distâncias da fonte. Nas vizinhanças da chaminé, ambos os modelos não reproduziram as concentrações do túnel de vento, o que, segundo os autores, se deve às simplificações do algoritmo PRIME, que não foi capaz de reproduzir adequadamente a influência dos edifícios. No geral, o modelo AERMOD mostrou melhor capacidade preditiva que o modelo CALPUFF, reproduzindo 68,25% das concentrações medidas no túnel de vento, enquanto que o CALPUFF representou apenas 44% das concentrações medidas. Apesar de apresentar melhor capacidade preditiva a curtas distâncias, a grandes distâncias o modelo AERMOD apresentou falsas concentrações, isto é, concentrações que não foram verificadas no túnel de vento. Os autores pretendem realizar futuros estudos com modelos CFD, a fim de verificar se os mesmos poderão melhor representar a dispersão nas vizinhanças do complexo.

STENZEL *et al* (2011) compararam os modelos de dispersão LASAT (modelo de simulação de transporte de aerossóis) e GRAL (modelo lagrangeano GRAZ), a partir do experimento de campo de Uttenweiler. O estudo comparativo

teve o objetivo de comparar as potencialidades do recém-concebido modelo GRAL, com o já consolidado LASAT. Ambos os modelos apresentaram bom desempenho na simulação das concentrações medidas em campo.

Pongratz, Öttl e Uhrner (2012) realizaram a validação do modelo de partícula lagrangeano GRAL, a partir de uma série de 26 experimentos de campo que incluíam o experimento de campo de Uttenweiler. Na simulação deste experimento, considerou-se o terreno plano, com comprimento de rugosidade igual a 0,01. Foram simuladas 180.000 partículas por hora, em um domínio de dimensões 500m x 470m. Utilizou-se o modelo de prognóstico de microescala, com fechamento de turbulência k-l, resolução horizontal de 4m, resolução vertical de 1m e fator de alargamento vertical 1. No procedimento de validação do modelo, comparou-se os resultados obtidos no experimento do traçador com outras simulações realizadas com outros modelos, através dos índices estatísticos erro quadrático médio normalizado (NMSE) e viés fracionário (FB). Adotou-se NMSE menor que 4 e FB máximo de +/- 0,3, como índices aceitáveis na avaliação dos resultados. Para ambos os índices, o modelo lagrangeano GRAL obteve resultados satisfatórios.

Keder, Bubnik e Macoun (2003), e Keder (2008) realizaram a adaptação e a validação do modelo Symos'97 para odores, a partir do experimento com gás odorante de Uttenweiler. A fim de se adaptar o modelo para odores, simulou-se a dispersão odorante e do traçador e aplicou-se uma razão pico média de 2,2 (FREEMAN; CUDMORE, 2002) às concentrações horárias, calculadas pelo modelo para ambos os poluentes. Uma vez que o experimento de Uttenweiler não disponibilizou correlação de intensidade por concentração odorante, adotou-se o seguinte procedimento para encontrar a curva que melhor correlacionasse essas variáveis: agruparam-se as concentrações estimadas pelo modelo em classes de intensidade, de acordo com sua respectiva intensidade aferida pelos jurados; calcularam-se as medianas das concentrações para cada classe de intensidade dos experimentos B,C e E até O; e por fim, obteve-se a equação logarítmica que melhor descreve o conjunto de pontos. Esse artigo foi apresentado por último, apesar de não seguir a ordem cronológica dos trabalhos descritos nesta seção, em virtude de descrever a metodologia seguida neste trabalho.

O grande número de estudos, aqui descritos, que fizeram uso da base de dados do experimento de Uttenweiler, demonstra a robustez e a importância desse experimento na avaliação do desempenho de modelos de qualidade do ar. Apesar de o desempenho do modelo AERMOD já haver sido testado em um modelo físico reduzido em um túnel de vento do experimento de Uttenweiler (VIEIRA DE MELO *et al.*, 2012), não se tem conhecimento de um trabalho que tenha avaliado o modelo AERMOD através do experimento de campo de Uttenweiler. O experimento de campo apresenta algumas vantagens em relação ao experimento de túnel de vento, dentre elas a grande variabilidade de parâmetros micrometeorológicos que não foi reproduzida em laboratório (ex: grande variabilidade de direções e velocidades do vento ao longo do experimento). Outro aspecto é a utilização de um poluente odorante em conjunto com um traçador inerte, enquanto que no experimento de laboratório apenas um traçador foi

utilizado. A utilização de um poluente odorante em conjunto com um traçador possibilita que seja feita, em primeira instância, uma comparação da dispersão do poluente odorante em relação ao traçador e, posteriormente, em relação ao modelo.

Deve-se fazer, ainda, uma discussão sobre quais índices estatísticos seriam os mais apropriados para analisar o desempenho dos modelos. Alguns índices já foram utilizados na avaliação do desempenho de modelos da qualidade do ar para o experimento de Uttenweiler. Entretanto, alguns desses índices podem favorecer artificialmente as análises, provendo aparentes bons resultados, uma vez que não são os índices mais adequados para o caso a ser estudado.

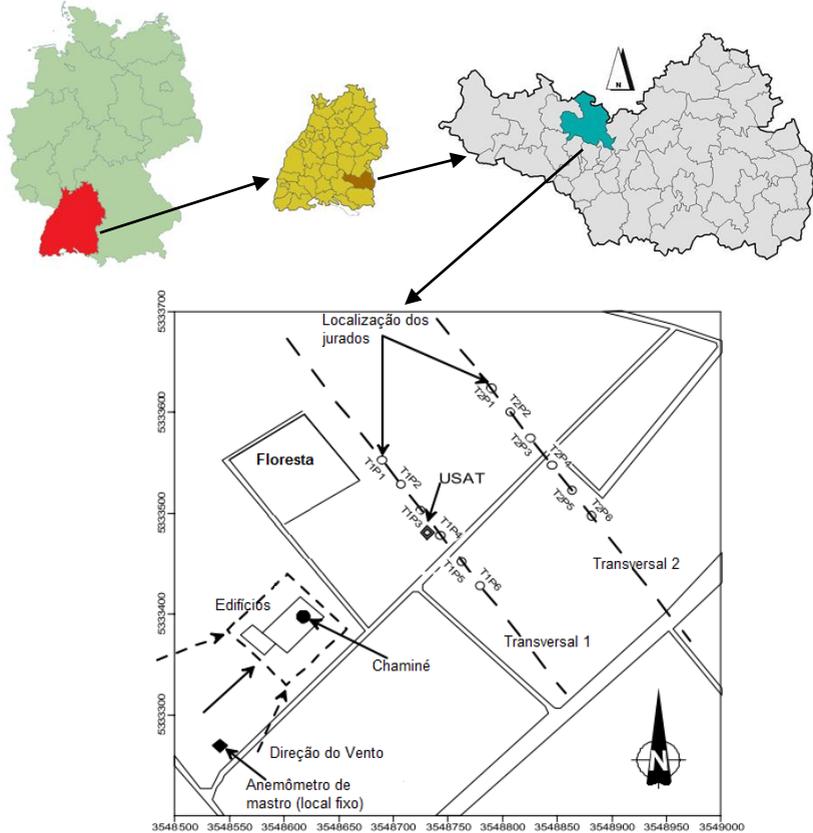
3. MATERIAIS E MÉTODO

Neste capítulo, são descritos, de forma sucinta, o local de realização do experimento de Uttenweiler, a simulação da dispersão do traçador e a simulação da dispersão do experimento odorante de suinocultura. Ao final deste capítulo, são descritos os índices estatísticos utilizados na avaliação dos resultados e o método utilizado para transformar as concentrações odorantes calculadas pelo modelo em intensidades odorantes.

3.1. Caracterização do local

O objeto deste estudo é uma fazenda de suínos com celeiro, localizada em Uttenweiler, estado de Baden-Württemberg, Alemanha. A Figura 5, apresenta a localização do estado Baden-Württemberg, na Alemanha, e a localização do município no distrito de Biberach. O local do estudo situa-se na parte rural do município de Uttenweiler. A fazenda e seu entorno constituem-se, basicamente, de campos cultivados (Figura 6) e de um pequeno bosque, de aproximadamente 100 x 100 metros, localizado ao norte do celeiro. O celeiro é constituído por dois edifícios de, respectivamente, 7,65 e 10,65 metros de altura. O menor deles tem duas chaminés de 8,5 metros de altura, conectadas a sistemas de ventilação interna. Apenas uma das chaminés foi utilizada no experimento. A chaminé utilizada apresentava três compartimentos, que totalizavam 3,6 m² de área (BÄCHLIN; RÜHLING; LOHMEYER, 2002).

Figura 5 – Em sentido horário apresenta-se o mapa da Alemanha, o estado de Baden-Wüttemberg, o distrito de Biberach e a localização do experimento (coordenadas em Gauss-Krüger, em metros).



Fonte: Adaptado de Bächlin, Rühling e Lohmeyer (2002) e de imagens da Wikipédia.

As coordenadas Gauss-Krüger, referentes às posições dos jurados, da chaminé, e dos dois edifícios, foram transformadas para UTM, a fim de serem inseridas no modelo AERMOD. Utilizou-se, para isto, duas calculadoras automáticas, disponibilizadas online. Inicialmente, transformaram-se as coordenadas Gauss-Krüger⁶ para coordenadas de latitude e longitude e, posteriormente, transformaram-se as coordenadas de latitude e longitude para

⁶ <http://geo-en.hlipp.de/latlong.php> - Transforma as coordenadas Gauss-Krüger para latitude e longitude.

UTM⁷. As coordenadas do bosque foram extraídas do software Google Earth, uma vez que não constavam na base de dados de Uttenweiler.

Figura 6 – Imagem do local do experimento no dia 29 de setembro de 2001 (Coordenadas UTM em metros). As marcações em vermelho são referentes às posições dos jurados para o experimento B.



Fonte: Elaborado pelo autor a partir dos softwares Google Earth e AERMOD View.

3.2. Descrição da simulação com o modelo AERMOD

Neste trabalho, avaliou-se o desempenho do modelo AERMOD para simular o experimento de dispersão do traçador SF₆ e o experimento de dispersão de compostos odorantes de suinocultura, provenientes das emissões de uma chaminé, sob o efeito de obstáculos. Para isto, utilizou-se o mesmo procedimento proposto por Keder, na adaptação e validação do modelo SYMOS'97 para odores (KEDER; BUBNIK; MACOUN, 2003; KEDER, 2008a, 2008b). Os resultados obtidos nesses experimentos foram então comparados com aqueles obtidos por Keder para os mesmos índices estatísticos utilizados por ele, na adaptação e validação do modelo SYMOS'97. Apesar de ambos os modelos requererem procedimentos distintos, buscou-se repetir os mesmos procedimentos de processamento dos dados após os modelos terem efetuado seus respectivos cálculos preditivos (ver Seção 3.4). É necessário destacar que algumas hipóteses adotadas nas simulações, realizadas com o modelo AERMOD, diferem daquelas utilizadas nas simulações realizadas com o modelo SYMOS'97. Em todas as simulações, realizadas com o modelo AERMOD, buscou-se obter os melhores resultados que o modelo pudesse gerar, sem que houvesse uma preocupação de

⁷ <http://home.hiwaay.net/~taylorc/toolbox/geography/geoutm.html> - Transforma as coordenadas de latitude e longitude para UTM.

se inserir exatamente os mesmos dados de entrada inseridos nas simulações do modelo SYMOS'97. Além disso, algumas características intrínsecas de cada modelo não permitem a simples utilização dos mesmos dados de entrada. As principais diferenças entre as simulações realizadas pelo modelo AERMOD e as realizadas por Keder para o modelo SYMOS'97 ocorreram na rugosidade do solo, na correção dos valores de taxa de emissão, e na inserção de dados meteorológicos. O Quadro 5 aponta as principais diferenças em ambas as simulações. É necessário destacar que não foi encontrado, pelo autor, nenhum outro estudo na literatura avaliando a adaptação do modelo AERMOD na simulação de compostos odorantes para o experimento de campo de Uttenweiler.

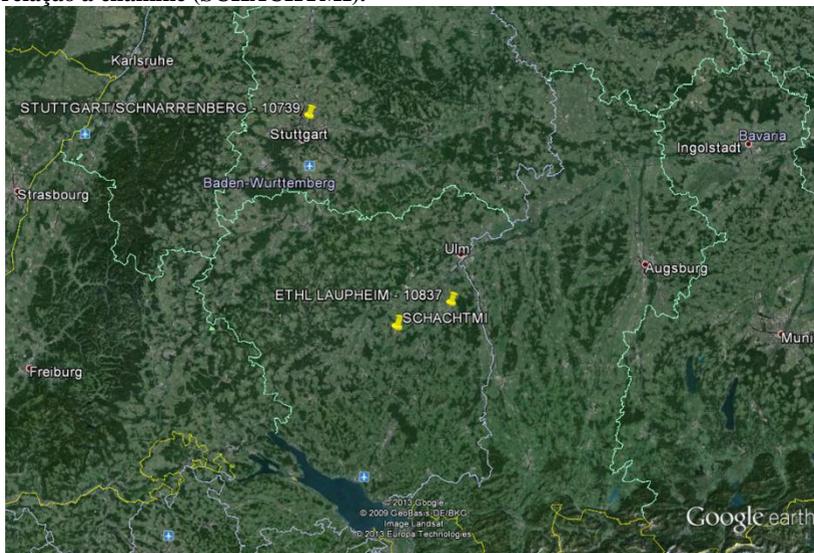
Quadro 5 – Descrição das principais diferenças de ambas simulações.

	AERMOD	SYMOS'97
Meteorologia	Utilização de médias dos dados de 10 minutos do anemômetro sônico	Utilização dos dados do anemômetro de copo
Sondagem	Utilizou dados de sondagem de um aeroporto	Não se fez uso de dados de sondagem
Uso do solo	Utilizou comprimento de rugosidade do solo igual a 0,01	Utilizou comprimento de rugosidade do solo igual a 0,3
Taxa de emissão	Não foi realizada nenhuma correção nos dados de taxa de emissão, utilizou-se a temperatura e pressão ambientes	Realizou-se a correção da taxa de emissão para condições normais de temperatura e pressão.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Nas simulações realizadas com o AERMOD, utilizaram-se três sondagens diárias e mesclaram-se os dados de duas estações meteorológicas de superfície, a fim de suprir os requisitos mínimos do modelo. Utilizaram-se as médias de vento e temperatura do termoanemômetro, para cada experimento. As demais variáveis foram obtidas da estação meteorológica do aeroporto de Laupheim, situada a 22km a nordeste da fazenda. As sondagens foram obtidas do aeroporto de Schnarrenberg, localizado a 84km a noroeste do local. A respectiva localização de cada um desses aeroportos, em relação à chaminé, pode ser verificada na Figura 7.

Figura 7 – Localização dos aeroportos de Laupheim e de Schnarrenberg em relação à chaminé (SCHACHTMI).



Fonte: Google Earth.

Optou-se por corrigir o valor das direções e velocidades do vento no terceiro estágio do AERMET, uma vez que o modelo arredonda o valor das direções do vento a cada 10 graus, além de arredondar o valor das velocidades do vento para classes de velocidade estabelecidas no modelo. Inseriram-se, ainda, no terceiro estágio, os valores do desvio padrão horizontal do vento – S_{Ann} (graus) e do desvio padrão da componente w do vento – SW_{nn} (m/s). Esses desvios foram calculados, a partir do conjunto de dados de direção e velocidade do vento medidos pelo termoanemômetro, para cada experimento. A sequência de dados meteorológicos de superfície utilizada nas simulações dos experimentos é apresentada na Tabela 1. Os dados de cobertura de nuvens e de pressão atmosférica não foram medidos no local do experimento, entretanto, julgou-se que a extrapolação dessas variáveis era aceitável para uma distância de 22 quilômetros do local do estudo. Ademais, os valores de cobertura de nuvens iguais a oito décimos são compatíveis com a descrição das condições meteorológicas, de céu encoberto, apresentadas na descrição do experimento. Maiores detalhes sobre as condições meteorológicas predominantes, ao longo do experimento, podem ser encontradas em Bächlin, Rühling e Lohmeyer (2002).

Tabela 1 – Variáveis meteorológicas do experimento de Uttenweiler utilizadas no modelo AERMOD.

	Cobertura de nuvens	Pressão (atm)	Temperatura (°C)	Direção do vento (graus)	Velocidade do vento (m/s)	SAnn (graus)	SWnn (m/s)
B	8	1025	12,2	212	3,2	3,94	0,11
C	8	1024	12,0	222	3,2	5,02	0,15
D	8	1024	11,5	234	2,3	5,03	0,09
E	8	1021	12,1	251	6,8	6,96	0,20
F	8	1021	12,4	245	6,1	5,37	0,15
G	8	1021	12,0	245	5,7	4,75	0,16
H	8	1021	11,4	240	4,6	6,95	0,16
I	6	1021	17,1	221	5,4	5,78	0,23
J	8	1021	17,3	223	5,8	5,70	0,26
K	8	1021	17,6	219	4,3	6,28	0,16
L	8	1020	17,4	227	4,4	4,63	0,21
M	8	1020	16,4	231	4,4	3,46	0,17
N	8	1020	16,0	228	3,8	3,18	0,14
O	8	1020	15,3	230	3,0	4,18	0,11

Fonte: Elaborado pelo autor.

Devido à base de dados do experimento de Uttenweiler apresentar algumas inconsistências nas altitudes dos elementos a serem simulados, optou-se por extrair as altitudes de um mapa de elevação digital SRTM3, com resolução de 90 metros. Simulou-se o *building downwash* ocasionado por três obstáculos: dois celeiros, um deles contendo a chaminé utilizada nos experimentos, e um pequeno bosque de aproximadamente 20 metros de altura. Adotou-se albedo de 0,18, Razão de *Bowen* de 0,4 e comprimento de rugosidade de 0,01. Apesar de não haver sido feita uma análise de sensibilidade em relação aos valores adotados, optou-se pela utilização de comprimentos rugosidade (parâmetro de maior sensibilidade) que gerassem valores de velocidade de fricção próximos daqueles quantificados pelo anemômetro sônico. Para isto, uma série de testes com diversos valores de comprimento de rugosidade foi efetuada preliminarmente a escolha desse parâmetro. Os valores de albedo e de Razão de *Bowen* foram extraídos do manual meteorológico do modelo, para condições de solo cultivado molhado no outono do hemisfério norte; enquanto que para o comprimento de rugosidade, adotou-se o mesmo valor utilizado nas simulações de validação do modelo Lagrangeano GRAL, para o experimento de Uttenweiler, visto que gerava valores de velocidade de fricção próximos aqueles quantificados no anemômetro sônico (PONGRATZ; ÖTTL; UHRNER, 2012).

Os experimentos simulados constituem duas bases de dados distintas que foram geradas concomitantemente. Em cada experimento de B a O foram liberados ao mesmo tempo porções de gás traçador e porções de gás odorante de suinocultura. Inicialmente, simulou-se a dispersão do gás traçador e, posteriormente, simulou-se a dispersão odorante. As velocidades e as taxas de emissão do gás traçador inerte SF6 são apresentadas no Quadro 6.

Quadro 6 –Taxa de emissão. Experimento do traçador SF6.

	Taxa de emissão (g/s)	Velocidade de emissão (m/s)
B	0,03	4,23
C	0,03	4,24
D	0,03	4,24
E	0,03	4,25
F	0,03	4,12
G	0,03	4,15
H	0,03	4,22
I	0,07	4,37
J	0,07	4,28
K	0,07	4,35
L	0,07	4,31
M	0,07	4,28
N	0,07	4,33
O	0,07	4,33

Fonte: Elaborado pelo autor.

Uma vez efetuada a simulação da dispersão do experimento do traçador SF6 prosseguiu-se com a simulação da dispersão do experimento odorante. Para inserção dos dados de taxa de emissão odorante no modelo de dispersão, efetuou-se a multiplicação da concentração odorante dos gases, Z_{50} (em UO/m^3), na chaminé, pela sua respectiva vazão em m^3/s . Não foi efetuada nenhuma correção das concentrações descritas na base de dados do experimento de Uttenweiler, em função da temperatura ou da pressão. Nas simulações, utilizou-se a temperatura ambiente como temperatura de emissão. São apresentados, na Tabela 2, os valores referentes às velocidades de emissão, concentrações odorantes, vazões volumétricas e as taxas de emissão obtidas a partir das concentrações odorantes e das vazões volumétricas. No processo de determinação das concentrações odorantes, foram determinados mais de um valor de concentração odorante em alguns experimentos. Para esses experimentos, utilizou-se a média dos valores de concentração odorante no cálculo das taxas de emissão.

Tabela 2 – Cálculo da taxa de emissão. Experimento de dispersão odorante de suinocultura de Uttenweiler.

	Z50 (UO/m ³)	Vazão volumétrica (m ³ /h)	Taxa de emissão (UO/s)	Velocidade de emissão (m/s)
B	1.260	55.100	19.285,00	4,23
C	1.225	55.200	18.738,33	4,24
D	1.130	55.200	17.326,67	4,24
E	3.000	55.300	46.083,33	4,25
F	3.000	53.700	44.750,00	4,12
G	3.000	54.100	45.083,33	4,15
H	2.520	55.000	38.500,00	4,22
I	1.220	56.600	19.181,11	4,37
J	1.000	55.700	15.472,22	4,28
K	940	56.700	14.805,00	4,35
L	870	56.100	13.557,50	4,31
M	750	55.700	11.604,17	4,28
N	890	56.400	13.943,33	4,33
O	940	56.400	14.726,67	4,33

Fonte: Elaborado pelo autor.

3.3. Análise e comparação dos resultados

A intercomparação dos resultados de ambos os modelos foi subdividida em duas etapas: experimento com traçador; e experimento com odores. As concentrações máximas, preditas e observadas, foram pareadas no espaço, para cada experimento de 10 minutos, e comparadas entre si. Utilizaram-se os índices estatísticos propostos por Chang e Hanna (2005), para a avaliação de modelos de dispersão atmosférica. Isto é, os índices viés (Bias), viés fracionário (FB), erro médio quadrático normalizado (NMSE), correlação (R), viés médio geométrico (MG), variância geométrica (VG) e fator de dois (FAC2), bem como os limites aceitáveis para esses índices na avaliação de modelos:

$$BIAS = \overline{C_o} - \overline{C_p}, \quad (7)$$

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5 \cdot (\overline{C_o} + \overline{C_p})}, \quad (8)$$

$$NMSE = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})^2}{\overline{C_o C_p}}, \quad (9)$$

$$R = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_o})(\overline{C_p} - \overline{C_p})}{\sigma_{C_p} \sigma_{C_o}}, \quad (10)$$

$$MG = \exp(\ln \overline{C_o} - \ln \overline{C_p}), \quad (11)$$

$$VG = \exp \left[\overline{(\ln C_o - \ln C_p)^2} \right], \quad (12)$$

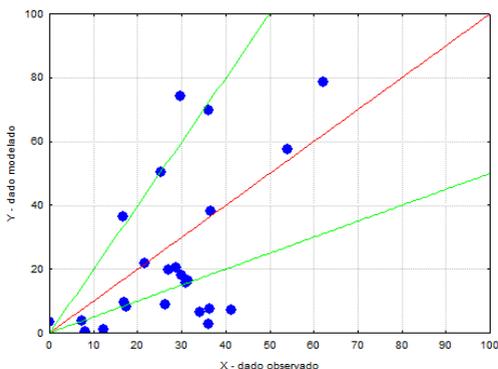
$$FAC2 = \text{fração de dados que satisfaz } 0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2, \quad (13)$$

Das equações acima, C_o é o valor observado; C_p é a predição do modelo; \bar{C} é o dado médio do conjunto de dados; e σ_C é o desvio padrão do conjunto de dados. Estes índices foram escolhidos visto que também foram utilizados por Keder (2008b) na avaliação do desempenho do modelo de dispersão SYMOS'97. Uma vez que pretende-se comparar os resultados obtidos no presente trabalho com aqueles obtidos por Keder, utilizaram-se os mesmos índices estatísticos.

Os índices de viés fracionário e de viés médio geométrico são erros de tendência e indicam apenas erros sistemáticos, enquanto que os índices de erro médio quadrático normalizado e variância geométrica indicam erros aleatórios e sistemáticos. O índice de correlação (R) reflete a relação linear entre duas variáveis quaisquer e mantém-se inalterado, mesmo quando os dados são multiplicados ou somados por determinado fator (CHANG; HANNA, 2005).

O índice fator de dois indica se os dados modelados estão sub ou superestimando os dados aferidos em campo. O gráfico desse índice é constituído por uma série de pares ordenados, formados pelo dado observado versus o dado modelado ($X =$ dado observado, $Y =$ dado modelado), Figura 8. Nele são apresentadas três retas: ($y = 2x$ (verde); $y = x$ (vermelho) e $y = 0,5x$ (verde)). Caso a maior parte dos pontos esteja localizada entre as retas em verde, os resultados do modelo seriam considerados aceitáveis. Caso a maior parte dos dados esteja localizada abaixo da linha $y = x$ (vermelho), o modelo estaria subestimando os resultados observados; caso contrário o modelo estaria superestimando os resultados observados.

Figura 8 – Exemplo de um gráfico do índice fator de 2.



Fonte: Elaborado pelo autor.

3.4. Análise dos dados do traçador

Para efetuar as análises de dados no experimento do traçador, compararam-se as concentrações máximas medidas em campo, com as concentrações máximas simuladas através do modelo AERMOD. Conforme descrito na seção de revisão, cada um dos 14 experimentos de Uttenweiler contou com dois medidores de SF₆ que quantificavam a concentração do gás traçador a cada 10s. Assim, comparou-se a concentração máxima aferida nos medidores, ao longo de cada experimento de 10 minutos, com a concentração máxima calculada pelo modelo para as coordenadas desses medidores. Visto que o modelo AERMOD não foi concebido para calcular concentrações para intervalos de tempo inferiores a uma hora, adotou-se o procedimento de multiplicar as concentrações médias calculadas pelo modelo por razões pico-média, a fim de transformar concentrações médias horárias, em concentrações de pico. Para isto, adotou-se o mesmo procedimento proposto por Freeman e Cudmore (2002), e utilizado por Keder, Bubnik e Macoun (2003), na validação e adaptação do modelo SYMOS'97 para odores. Segundo Freeman e Cudmore (2002), chaminés baixas que sofrem influência da esteira, ocasionada pela presença de obstáculos, na ascensão da pluma, devem ter as suas concentrações horárias multiplicadas pela razão pico-média de 2,2 (ver Quadro 7).

Quadro 7 – Razão pico-média por tipo de fonte emissora.

Tipo de Fonte	Concentração odorante do composto (média de 1 hora)	
	Razão pico-média próxima à fonte	Razão pico média distante da fonte
Área	2 - 2,2	2,2 - 2,6
Chaminé alta sem influência da esteira	0,14 - 0,3	0,8 - 1,6
Chaminé baixa com influência da esteira	2,2	2,2
Fonte volumétrica	2,2	2,2
Linha	0,8	0,8
Ponto Superficial	0,2 - 0,4	0,7 - 1,7

Fonte: Freeman e Cudmore (2002).

A fim de verificar se a utilização da razão pico-média de 2,2 era razoável, utilizou-se o método de cálculo da razão pico-média descrito por Vieira de Melo, Santos, Mavroidis, Reis Junior (2012), apresentado no Item 2.10 deste trabalho. Utilizou-se a equação $C_1/C_2 = (t_1/t_2)^p$ em que C_1 é a máxima concentração média para o menor período de tempo, (t_1), e C_2 é a máxima concentração média para o maior período de tempo, (t_2), ou concentração modelada. Adotou-

se $p = -0,2$, por ser este o valor mais frequentemente usado na literatura (VIEIRA DE MELO *et al*, 2012), $t_1 = 10s$ e $t_2 = 600s$ ou 10 minutos. Fazendo-se os cálculos encontra-se que $C_1/C_2 = (10/600)^{-0,2} = 2,27$. Isto é, encontra-se um valor de razão pico-média muito próximo ao proposto por Freeman e Cudmore. O valor de $t_2 = 10$ minutos foi adotado, uma vez que cada experimento durou esse intervalo de tempo. É importante acrescentar que a despeito de o modelo AERMOD ter sido concebido para efetuar cálculos de concentrações horárias, assumiu-se que as concentrações horárias calculadas pelo modelo eram referentes a concentrações de 10 minutos. Essa simplificação foi considerada aceitável em função dos dados meteorológicos inseridos no modelo serem referentes a esse período de tempo. Feita essa simplificação, utilizou-se a razão pico-média para transformar a concentração modelada de 10 minutos, calculada pelo modelo, em uma concentração máxima (de pico) de 10s.

3.5. Transformação das concentrações preditas em intensidades

Como descrito anteriormente, os modelos realizam cálculos de concentração odorante, enquanto que os jurados quantificam o odor em termos de intensidade odorante. A fim de avaliar o potencial de um modelo na predição de intensidades odorantes é necessário fazer uso de equações que possam transformar os valores de concentração calculados pelo modelo, em valores de intensidades modeladas. Assim, é possível comparar os valores de intensidades modelados, com intensidades observadas.

Em uma situação ideal, a relação entre as variáveis de intensidade e concentração deveria ser determinada em laboratório, entretanto isso não foi determinado no experimento de Uttenweiler. A fim de superar essa dificuldade, utilizou-se a mesma abordagem proposta por Keder no processo de avaliação e adaptação do modelo SYMOS'97 para odores. Isto é, uma vez calculadas as concentrações odorantes referentes às coordenadas de cada jurado, agruparam-se os valores calculados de acordo com a intensidade odorante, aferida pelo respectivo jurado. Como a escala de intensidade utilizada variava de 0 até 6, originaram-se seis grupos de concentrações⁸; um para cada classe de intensidade. Calcularam-se, então, seis medianas de concentração referentes a cada grupo de intensidades. Feito isto, utilizou-se a ferramenta de curva de ajuste do software Matlab, a fim de determinar qual curva melhor ajusta os dados de concentração aos dados de intensidade. Adotou-se a exponencial como curva de ajuste e determinou-se os coeficientes K e n , referentes à equação de Steven ($I = KC^n$).

Assim, semelhantemente ao procedimento adotado por Keder, determinou-se uma equação de ajuste que possibilita a transformação dos valores

⁸ Apenas seis grupos de concentrações foram originados, uma vez que nenhum jurado percebeu intensidades de odor extremamente fortes.

de concentração em valores de intensidade. Realizou-se, então, uma comparação da curva de ajuste obtida neste trabalho, com a obtida no experimento de validação do modelo SYMOS'97 proposto por Keder (KEDER; BUBNIK; MACOUN, 2003; KEDER, 2008a, 2008b). As equações foram plotadas em um gráfico de concentrações odorantes por intensidades odorantes, a fim de comparar o crescimento de ambas as curvas. Foi adicionada ao gráfico, além dessas duas curvas, uma terceira curva obtida em laboratório, que também correlacionava as variáveis de intensidade e concentração, para edificações de suinocultura (NICOLAI; CLANTON; GUO, 2000; YU, 2010). Segundo Nicolai, Clanton e Guo (2000), esta última curva foi obtida através da detecção dos limites odorantes, por olfatométrica de escolha forçada, e da medição de intensidades odorantes, por meio da comparação com o composto de referência n-butanol. Uma escala de seis intensidades odorantes foi utilizada, em que avaliou-se o ajuste obtido pelos métodos de Beidler, de Steven e de Weber-Fechner para odores provenientes de instalações de suinocultura e de esterqueiras. As comparações se deram através da determinação dos limites de detecção odorante e de intensidades odorantes mediante a utilização de métodos de olfatométrica de escolha forçada. Neste trabalho, utilizou-se apenas os dados da curva obtida para instalação de suinocultura. Esta última curva foi utilizada com o intuito de possibilitar uma análise comparativa do comportamento das curvas de ajuste, obtidas neste experimento e no experimento de Keder, com o comportamento apresentado por uma curva obtida em laboratório. Para a curva de laboratório utilizou a equação de Weber-Fechner ($I = \log C + b$), enquanto que as curvas de ajuste do experimento de Uttenweiler fez-se uso da lei de Steven ($I = KC^n$).

A fim de avaliar qual das duas curvas de ajuste do experimento de Uttenweiler (curva obtida por Keder, e curva obtida neste trabalho) apresenta melhor desempenho na conversão de concentrações em intensidades, para o conjunto de concentrações modeladas através do AERMOD, foram empregados os mesmos índices estatísticos anteriormente descritos para a análise do experimento com o traçador.

4. RESULTADOS

Neste capítulo, são apresentados e discutidos os resultados das simulações dos experimentos de emissão de gás traçador SF₆ e de emissão odorante de suinocultura. Primeiramente, serão discutidos os resultados das simulações referentes ao experimento do traçador e, subsequentemente, serão discutidos os resultados das simulações do experimento de emissão odorante. Essa separação é feita com o objetivo de dar maior clareza às análises dos resultados, porém é necessário reiterar que ambos os experimentos ocorreram concomitantemente.

As análises aqui apresentadas buscam comparar o desempenho do modelo AERMOD na simulação do experimento de campo de Uttenweiler, com o desempenho do modelo SYMOS'97 na simulação do mesmo experimento. Visto que as análises das simulações do modelo SYMOS'97 foram realizadas por Keder para os índices de viés fracionário, erro médio quadrático normalizado, correlação, viés médio geométrico, variância geométrica e fator de dois (KEDER, 2008b), repetir-se-ão nas análises do modelo AERMOD as mesmas análises realizadas por Keder com o intuito de comparar o desempenho de ambos os modelos.

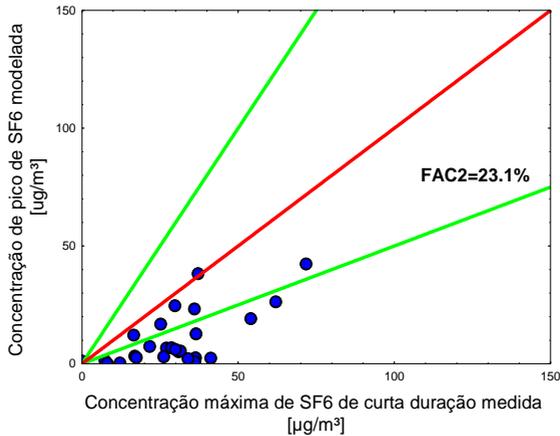
4.1. Experimento do Traçador

As análises aqui apresentadas consistem na consolidação dos resultados obtidos nas simulações de cada experimento de 10 minutos, B, C e E até O. Compararam-se as medições de gás SF₆ obtidas em campo, com as concentrações de gás SF₆ simuladas pelos modelos AERMOD e SYMOS'97. São apresentadas, a seguir, as análises para o índice fator de dois, simuladas pelos modelos SYMOS'97 e AERMOD.

Na Figura 9, é apresentada uma análise comparativa entre as concentrações máximas medidas em campo e as concentrações máximas estimadas através das simulações do modelo AERMOD. A fim de obter-se as concentrações máximas estimadas através do modelo, assumiu-se a hipótese de que a razão pico média de 2,2, proposta por Freeman e Cudmore (2002), poderia transformar as concentrações médias de 10 minutos em concentrações de pico de 10 segundos. Isto é, na obtenção das concentrações máximas simuladas multiplicaram-se as concentrações médias de 10 minutos, calculadas pelo modelo, pelo fator 2,2. O índice fator de dois, conforme descrito anteriormente, verifica se um modelo subestima ou superestima as observações de campo. Nele são apresentadas três retas ($y = 2x$ (verde); $y = x$ (vermelho) e $y = 0,5x$ (verde)). Caso a maior parte dos pontos esteja contida entre as retas em verde, os resultados do modelo seriam considerados aceitáveis. Caso a maior parte dos dados esteja situada abaixo da linha $y = x$, o modelo estaria subestimando os resultados; caso contrário, o modelo estaria superestimando os resultados. A Figura 9 apresenta as concentrações máximas medidas versus as concentrações máximas simuladas, totalizando 26 pontos. Esses pontos são referentes aos experimentos B, C e E a O, sendo dois pontos provenientes de cada experimento.

Como já descrito anteriormente, cada experimento contou com dois medidores de SF6 que quantificavam o gás a cada 10 segundos.

Figura 9 – Gráfico do índice fator de dois utilizando razão pico média igual 2,2 (usando o AERMOD).

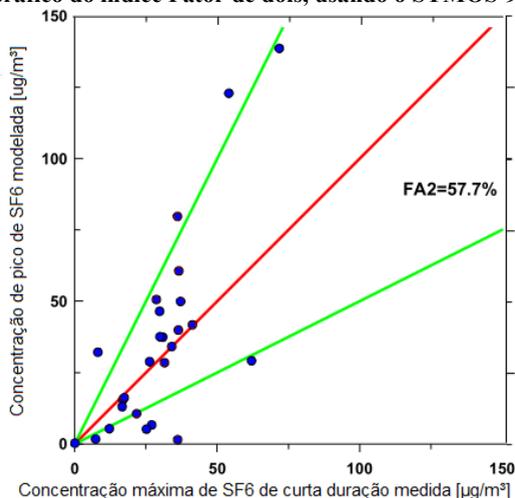


Fonte: Elaborado pelo autor.

Nas análises realizadas para o fator de dois com o modelo AERMOD (Figura 9), verificou-se que apenas 23% dos dados ficaram contidos entre os limites impostos pelas retas $y = 2x$ e $y = 0,5x$. Visto que a maior parte dos dados encontrou-se abaixo da curva $y=x$, verificou-se que as concentrações de SF6 simuladas pelo modelo AERMOD subestimaram as concentrações observadas de SF6. É importante destacar que esse resultado foi alcançado fazendo-se uso da hipótese de que a razão pico-média de 2,2 poderia transformar as concentrações médias de 10 minutos, em concentrações de pico de 10 segundos.

Comparando-se as concentrações simuladas em relação as observadas para os modelos AERMOD (Figura 9) e SYMOS'97 (Figura 10), por meio do índice fator de dois, verifica-se que o modelo tcheco reproduziu, aceitavelmente, as concentrações aferidas no experimento de Uttenweiler (mais da metade dos dados ficaram contidos na região aceitável) (Figura 10), enquanto que o modelo norte-americano não foi capaz de reproduzir o mesmo desempenho (Figura 9).

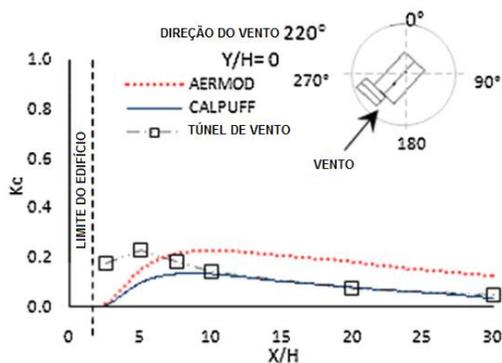
Figura 10 – Gráfico do índice Fator de dois, usando o SYMOS'97.



Fonte: Keder (2008).

Resultado semelhante foi obtido por Vieira DE Melo, Santos, Mavroidis e Reis Junior (2012), em que o AERMOD tendeu a subestimar as concentrações nas proximidades da fonte simulada no túnel de vento para a direção de 220° graus, em uma reprodução em escala reduzida do experimento de Uttenweiler (Figura 11). Apesar de o experimento em túnel de vento ter sido realizado em outras direções, escolheu-se comparar os resultados de campo com os do túnel de vento para a direção de 220°, por ser esta direção de vento equivalente à direção predominante de vento ao longo dos experimentos realizados em campo.

Figura 11 – Concentração longitudinal à barlavento das edificações para a direção do vento de 220°.



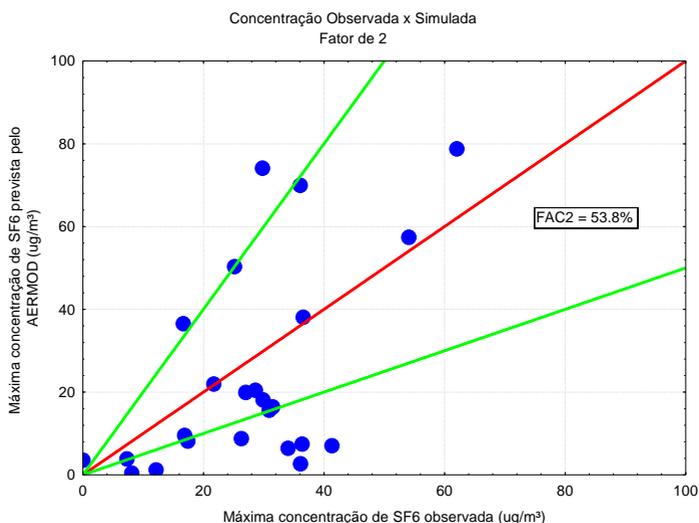
Fonte: Adaptado de Vieira de Melo, Santos, Mavroidis, Reis Junior (2012).

Segundo Maïzi, Dhaouadi, Bournot, Mhiri (2010) nas proximidades de uma edificação, as linhas de fluxo de escoamento do poluente tendem a ser grandemente afetadas pela influência da edificação. Porém, à medida que se distancia da edificação sua influência é reduzida até tornar-se desprezível. A utilização do algoritmo PRIME busca descrever esse fenômeno através da inserção de obstáculos que interagem com o escoamento. Esse efeito pode ser mais claramente observado no Apêndice, em que nas proximidades do obstáculo é percebida uma interferência mais notável no escoamento e à medida que se afasta do obstáculo o escoamento tende a voltar às suas características originais.

Percebeu-se na Figura 11, referente ao experimento do túnel de vento, que nas proximidades da chaminé ocorre uma subestimação das concentrações pelo modelo, enquanto que à medida que se afasta da chaminé esse efeito se inverte e ocorre uma superestimação das concentrações observadas. Visto que no experimento de campo as concentrações modeladas subestimam as observadas, entende-se que a região modelada no experimento de campo é referente àquela que se encontra mais próxima da chaminé, no experimento do túnel de vento. Isto é, em ambos os casos (experimento de campo, e experimento do túnel de vento próximo à fonte para a direção de 220 graus) as concentrações simuladas subestimam as observadas.

Uma vez verificado um padrão de subestimação das concentrações estimadas a partir da hipótese de utilização da razão pico-média de 2,2, nas proximidades da chaminé, resolveu-se testar a utilização de outra razão pico-média que melhor ajustasse as concentrações simuladas às observadas, para a mesma localidade. Através de procedimentos de tentativa e erro, encontrou-se a razão pico-média de 6,6 que propiciou uma melhora significativa no ajuste entre as concentrações simuladas através do modelo e as concentrações observadas em campo (Figura 12).

Figura 12 – Comparação do fator de dois das concentrações medidas e simuladas com o modelo AERMOD.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A utilização de um valor maior de razão pico-média (6,6) fez com que a ordem de grandeza dos resultados simulados pelo modelo fosse aumentada. Isto é, a utilização dessa razão pico-média fez com que as concentrações máximas simuladas não mais subestimassem as concentrações máximas observadas.

Além do índice fator de dois, avaliaram-se também os índices vies fracionário, erro médio quadrático normalizado, correlação, vies médio geométrico, variância geométrica, para as razões pico média 2,2 e 6,6. Os resultados obtidos, através das simulações do modelo AERMOD por meio das duas abordagens de razão pico-média, foram comparados com os resultados obtidos por Keder, através do modelo SYMOS'97 utilizando razão pico média 2,2. Todos os resultados foram ainda comparados em relação aos limites aceitáveis propostos por Chang e Hanna (2005), para cada um dos índices acima listados. Quanto mais próximos dos resultados de um modelo perfeito (em que os resultados modelados replicam perfeitamente os observados), melhores foram considerados os desempenhos dos respectivos modelos (Tabela 3).

Tabela 3 – Comparação dos modelos AERMOD e SYMOS'97 para o experimento com traçador SF6 de Uttenweiler e suas respectivas razões pico-média.

	AERMOD PM 2,2	AERMOD PM 6,6	SYMOS'97 PM 2,2	Modelo perfeito (CHANG; HANNA, 2005)	Limites (CHANG; HANNA, 2005)
BIAS	19,34	-1,63	6,08	0,0	<0,3
FB	0,96	0,05	0,18	0,0	<0,3
NMSE	1,64	0,77	0,60	0,0	<1,5
R	0,67	0,67	0,74	1,0	Próximo de 1
MG	4,35	1,45	0,88	1,0	0,7<MG<1,3
VG	53,66	7,11	1,02	1,0	<4
FAC2 (%)	23,1	53,8	57,7	100,0	>50

Fonte: Elaborado pelo autor.

Segundo Chang e Hanna (2005) a distribuição de concentrações de poluentes atmosféricos é em sua maioria próxima a log-normal. Nesses casos, medidas lineares como FB e NMSE são fortemente influenciadas por elevados valores de concentrações preditas ou observadas, enquanto que medidas logarítmicas como MG e VG tendem a prover medidas mais balanceadas de extremos elevados ou baixos. Segundo Chang e Hanna (2004) recomenda-se que, quando forem utilizados os índices estatísticos MG e VG, sejam escolhidos limites inferiores de concentrações para não prejudicar a análise do desempenho dos modelos. Um exemplo de atribuição de limite inferior seria o descarte de concentrações observadas e simuladas que se encontrem abaixo dos limites de detecção do instrumento quantificador do composto. Nos trabalhos realizados por Keder não é mencionada a utilização de limites inferiores nas concentrações simuladas ou observadas. Assim, na comparação dos resultados para o presente trabalho não foram utilizados limites inferiores de concentração.

Outro aspecto a ser destacado é quanto ao tipo de erro detectado pelos índices. Segundo Chang e Hanna (2004) os índices FB e MG detectam erros sistemáticos, enquanto que os índices NMSE e VG são capazes de detectar erros sistemáticos e não sistemáticos. No cálculo dos índices NMSE e VG, elevam-se as diferenças entre os valores preditos e observados ao quadrado, o que faz com que os erros não se compensem. Assim, a utilização desses índices permite a detecção de erros sistemáticos, bem como de erros não sistemáticos.

Comparando-se os resultados do modelo AERMOD com os do modelo SYMOS'97 para a razão pico média 2,2, verificou-se que o modelo SYMOS'97 apresentou resultado aceitável para a maior parte dos índices propostos por Chang e Hanna (2005). Enquanto isso, o AERMOD não alcançou resultados aceitáveis para todos os índices avaliados neste trabalho, exceto para a correlação entre as

concentrações preditas e observadas. Após a utilização da razão pico média 6,6, verificou-se que ambos os índices logarítmicos tiveram o seu desempenho melhorado. Entretanto, verificou-se que apesar de os resultados terem se revelado melhores em relação a utilização da razão pico média 2,2, o modelo AERMOD, com razão pico média 6,6, ainda não teve resultados satisfatórios para os índices logarítmicos propostos por Chang e Hanna (2005). O fato de ambos os índices logarítmicos não apresentarem resultados satisfatórios se deve a elevada quantidade de baixos valores de concentração no conjunto de dados, sobretudo no conjunto de dados simulados. Verificou-se ainda nas análises dos resultados do AERMOD com razão pico média 6,6 que o índice VG foi aquele que apresentou os resultados mais distantes dos limites aceitáveis propostos por Chang e Hanna (2005). Isso se deve ao fato de este índice captar erros sistemáticos e assistemáticos, acrescidos da influência de um grande número de baixas concentrações no conjunto de dados. Outra explicação é o fato de em alguns casos o modelo não ter captado o centro da distribuição de dados observados. Como pode ser visto no Apêndice, nem sempre o modelo reproduziu o centro de distribuição de concentrações observadas, o que reduziu a correlação entre os dados observados e simulados.

Caso o modelo AERMOD tivesse reproduzido exatamente as direções observadas, não apenas o índice VG apresentaria resultados mais próximos àqueles do modelo perfeito, mas todos os demais índices tenderiam a revelarem-se melhores. Entretanto, as limitações da concepção do modelo não permitem a reprodução exata das variações temporais da direção e velocidade do vento. Nos experimentos B e K, verificou-se, de forma mais acentuada, a presença de dois picos de concentração odorante provenientes da mudança na direção predominante de vento. Como as simulações foram feitas para condições médias de vento de 10 minutos, o modelo não simulou as variações da direção do vento que ocorreram ao longo desse intervalo de tempo. Apesar de o exemplo apresentado, nos experimentos B e K no Apêndice, referir-se a parte odorante do experimento simulado, entende-se que o mesmo fenômeno também ocorreu nos respectivos experimentos do traçador. Entretanto, isso não pode ser caracterizado de forma tão marcante no experimento do traçador, devido à ausência de um maior número de amostradores do gás SF₆ (dois por experimento).

Por fim, comparou-se o desempenho do modelo AERMOD para o experimento do traçador de Uttenweiler, descrito neste trabalho, com o desempenho de outros modelos que já simularam o mesmo experimento e relataram seu desempenho na literatura. Nessa comparação, além de serem incluídos os resultados obtidos por Keder (2008), utilizaram-se ainda aqueles apresentados por Pongratz, Öttl e Uhrner (2012) na validação do modelo Gral. Visto que na validação do modelo Gral todos os modelos foram avaliados apenas em função dos índices lineares NMSE e FB, a comparação do AERMOD para com os demais modelos deu-se apenas em função destes dois índices. A Tabela 4 apresenta os resultados obtidos por cada um desses modelos, para esses dois itens.

Tabela 4 – Comparação do desempenho entre diversos modelos para o experimento do traçador de Uttenweiler. Fonte: Adaptado de Pongratz, Öttl e Uhrner (2012).

Modelo	NMSE	FB
SYMOS'97 (PM 2,2)	0.6	0.18
AERMOD (PM 6,6)	0.77	-0.05
AUSTAL2000	0.8	-0.1
GRAL 12.5/level2	1	0.1
GRAL 12.5/level1	1	-0.3
LASAT	1.1	0
AERMOD (PM 2,2)	1.64	0.96
OENORM M9440	1.8	0.5
GRAL 12.5	2.6	0.7
STERN	3.6	0.8
ADMS 3.1	5.8	1.3
GIEBL	9.1	1.1
SCORER	21.3	1.6

Fonte: Elaborado pelo autor.

Através das comparações feitas para os índices NMSE e FB, verificou-se que o modelo AERMOD (razão pico-média 6,6) apresentou excelente desempenho, superando o desempenho de modelos de concepção mais avançada como os modelos lagrangeanos, GRAL, LASAT e AUSTAL2000. A utilização do modelo AERMOD com razão pico-média 2,2, apesar de ter sido mais modesta, superou o desempenho do também gaussiano ADMS. Entretanto, conforme já descrito neste capítulo, os índices NMSE e FB são índices lineares e não apresentam medidas tão balanceadas de extremos elevados e baixos. Assim, uma avaliação mais completa, incluindo um maior número de índices estatísticos, poderia fornecer resultados mais confiáveis na comparação do desempenho desses modelos para o experimento de Uttenweiler. Deve-se salientar que não foi informado, nos artigos dos demais modelos apresentados na tabela anterior, o processo de inserção de dados meteorológicos nos respectivos modelos. Dependendo do dado inserido, os resultados podem ser radicalmente diferentes. Neste trabalho, optou-se pela utilização das médias das direções e velocidades do vento do anemômetro sônico, uma vez que mostraram maior correlação com os resultados observados. Visto que não se sabe, de forma detalhada, a origem dos dados inseridos em cada um dos modelos, não é possível fazer uma análise mais assertiva quanto ao desempenho de cada um deles. Entretanto, cada resultado apresentado foi obtido por meio de especialistas em modelagem da qualidade do ar. Logo, não seria errado assumir que cada resultado reflete as melhores capacidades preditivas de cada modelo, para o conjunto de dados do experimento de Uttenweiler.

Por fim, resolveu-se verificar o porquê da hipótese de utilização da razão pico média 2,2 não ter sido capaz de reproduzir as ordens de grandeza das concentrações de pico observadas, para períodos de 10 segundos. Vieira de Melo, Santos, Mavroidis, Reis Junior (2012), conforme apresentado no capítulo

anterior, fizeram uso da equação $C_1/C_2 = (t_1/t_2)^p$ em que C_1 é a máxima concentração média para o menor período de tempo, (t_1), e C_2 é a máxima concentração média para o maior período de tempo, (t_2), ou a concentração média modelada no experimento do túnel de vento. Entretanto, essa afirmação é inconsistente, pois a concentração média difere da máxima concentração média. Enquanto a máxima concentração média é o valor máximo de um conjunto de valores de concentrações médias a concentração média é o valor obtido a partir do cálculo da média de um conjunto de valores de concentração, ou o valor de concentração obtido a partir de aferições médias de parâmetros meteorológicos. Uma vez que a concentração média neste trabalho foi obtida a partir de condições meteorológicas médias para determinados períodos de tempo, não deveríamos esperar que a formulação acima descrita por Vieira de Melo, Santos, Mavroidis e Reis Junior (2012) nos leve ao cálculo de máximas concentrações médias ou concentrações de pico e sim ao cálculo de concentrações médias referentes a um menor período de tempo. Esse fato é evidenciado pela subestimação das concentrações de pico modeladas, a partir da razão pico média 2,2, em relação às concentrações de pico observadas, podendo ser verificada através do cálculo do índice fator de 2 na Tabela 3.

Visto que a razão pico-média 2,2 gerou concentrações que subestimaram as concentrações de pico observadas. Resolveu-se então verificar se esta razão seria eficiente na obtenção de concentrações médias para intervalos de tempo de 10 segundos. Para tanto, calcularam-se os índices estatísticos, já descritos anteriormente, para os experimentos B, C e E até O, em relação às concentrações médias observadas de SF6, para intervalos de 10 segundos (Tabela 5). Os resultados obtidos foram comparados aos melhores resultados obtidos até então neste trabalho, isto é, as concentrações de pico obtidas a partir da multiplicação das concentrações médias de 10 minutos pela razão pico-média 6,6.

Tabela 5 – Comparação da utilização da razão pico-média 2,2 para transformar as concentrações modeladas em concentrações médias modeladas de 10 segundos com a utilização da razão pico-média 6,6 para transformar as concentrações modeladas de 10 minutos em concentrações de pico modeladas de 10 segundos, para o experimento de Uttenweiler.

	AERMOD PM 2,2 (média de 10 minutos - média de 10 segundos)	AERMOD PM 6,6 (média de 10 minutos – pico de 10 segundos)
BIAS	0,03	-1,63
FB	0,00	0,05
NMSE	0,50	0,77
R	0,77	0,67
MG	1,15	1,45
VG	5,39	7,11
FAC2 (%)	53,8	53,8

Fonte: Elaborado pelo autor.

A comparação apresentada na Tabela 5 demonstrou que a utilização da razão pico-média 2,2, para transformar concentrações médias de 10 minutos, em concentrações médias de 10 segundos, revelou-se superior à utilização da razão pico-média 6,6 para transformar as concentrações médias de 10 minutos, em concentrações de pico de 10 segundos. Esse fato reforça a tese de que a equação utilizada por Vieira de Melo *et al* (2012) não é adequada para transformar concentrações médias, referentes a um maior período de tempo, em concentrações de pico, referentes a um menor período de tempo. Entretanto, verifica-se que caso o valor da razão pico-média 2,2 seja majorado para 6,6 é possível estimar-se os valores referentes às concentrações de pico de forma bastante significativa, alcançando resultados aceitáveis em relação aos limites propostos por Chang e Hanna (2005) (Tabela 3) e superando o desempenho de modelos de arquitetura mais complexa, como modelos lagrangeanos e CFD (Tabela 4).

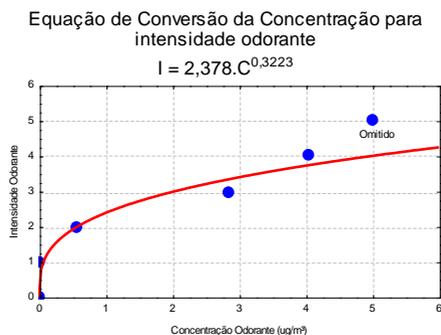
Para os objetivos propostos neste trabalho a estimação das concentrações de pico revela-se de maior interesse, visto que em alguns casos a simulação das concentrações médias não indica se haverá ou não impacto olfativo (DE MELO LISBOA *et al*, 2006). Assim, entende-se a partir das análises e considerações realizadas, que o modelo AERMOD não foi o responsável por subestimar as concentrações observadas em campo, mas que a razão pico-média utilizada não era adequada à transformação das concentrações médias em concentrações de pico.

4.2. Experimento Odorante

Uma vez realizada a análise dos resultados do experimento do traçador, comparou-se o desempenho dos modelos SYMOS'97 e AERMOD a partir do

experimento de emissão odorante de suinocultura em Uttenweiler. A fim de comparar as intensidades odorantes percebidas pelos jurados em campo, com as concentrações preditas pelos modelos para as posições dos jurados, utilizou-se o mesmo procedimento utilizado por Keder, Bubnik e Macoun (2003), e descrito no Tópico 3.5 de materiais e método. Isto é, transformaram-se as concentrações odorantes estimadas pelo modelo em intensidades odorantes, por meio de uma curva de ajuste da intensidade pela concentração, obtida a partir das concentrações estimadas pelo modelo AERMOD, em relação às intensidades percebidas pelos jurados. A Figura 13 apresenta a curva de ajuste obtida a partir do conjunto de pontos dos experimentos B, C e E até O. Como já descrito anteriormente no Tópico 3.5, as concentrações odorantes estimadas pelo modelo AERMOD foram pareadas em relação a respectiva intensidade odorante aferida pelo jurado para a posição em que a concentração foi estimada. Assim, calculou-se a mediana das concentrações para cada classe de intensidade percebida pelos jurados, em uma faixa de intensidade de 0 até 5. Uma vez feito isso, plotaram-se as medianas das concentrações estimadas pelo modelo pelas suas respectivas intensidades observadas, e buscou-se a curva que melhor se ajustasse a esse conjunto de dados. Encontrou-se então a Curva (1), que permitiu a transformação das concentrações odorantes estimadas pelo modelo em intensidades odorantes. Uma vez transformadas as concentrações simuladas em intensidades simuladas, compararam-se as intensidades modeladas com as respectivas intensidades odorantes aferidas pelos jurados. Nesse processo, verificou-se a necessidade de se excluir o ponto de intensidade 5, uma vez que dificultava a obtenção de uma curva de ajuste. Procedimento semelhante foi realizado por Keder, Bubnik e Macoun (2003), na obtenção da curva de ajuste de intensidade pela concentração, na validação do modelo SYMOS'97 para odores. Assim, como neste trabalho, Keder omitiu o ponto de intensidade 5 na obtenção da curva de ajuste.

Figura 13 – Comparação das curvas de intensidade – concentração.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Visto que o procedimento de obtenção da curva de ajuste das concentrações estimadas pelas intensidades observadas foi idêntico ao proposto por Keder, Bubnik e Macoun (2003), resolveu-se comparar a curva de ajuste obtida neste trabalho com aquela obtida na validação do modelo SYMOS'97 para odores, para o experimento de Uttenweiler – Curva (2). Acrescentou-se a essas duas curvas uma curva teórica obtida em experimento laboratorial para odor de suinocultura, com características semelhantes ao simulado no experimento de Uttenweiler – Curva (3). A curva laboratorial escolhida é referente a emissões odorantes provenientes de instalações de manejo de suinocultura “swine building” (NICOLAI; CLANTON; GUO, 2000), porém varia apenas em escala de intensidade odorante de 0-5.

São apresentadas abaixo as equações e os gráficos (Figura 14) das curvas de ajuste de intensidade–concentração obtidas neste experimento, no experimento de Keder, bem como a equação da curva obtida através de experimento de laboratório por Nicolai.

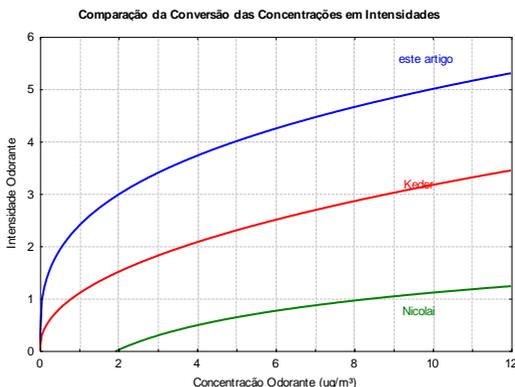
$$I_{od} = 2.378(C_{od})^{0.3223^9} - \quad \text{curva (1),}$$

$$I_{od} = 1.086(C_{od})^{0.464} 10^{-} \quad \text{curva (2),}$$

$$I_{od} = 1.57(\log_{10} C_{od}) - 0.466^{11} - \quad \text{curva (3),}$$

Nas curvas acima, I_{od} é a intensidade odorante e C_{od} , a concentração odorante. Optou-se por não utilizar a curva de laboratório no cálculo dos índices estatísticos, devido a mesma não apresentar valores de intensidade válidos para baixas concentrações.

Figura 14 – Comparação das curvas de intensidade – concentração.



Fonte: Elaborado pelo autor.

⁹ Este artigo

¹⁰ (KEDER; BUBNIK; MACOUN, 2003)

¹¹ (NICOLAI; CLANTON; GUO, 2000)

As curvas de ajuste (1) e (2) seguem a lei de Steven, enquanto que a curva (3) segue a lei de Weber-Fechner. Comparando-se as curvas de Keder e a obtida neste trabalho com uma curva obtida em laboratório (NICOLAI; CLANTON; GUO, 2000 apud YU, 2010), verificou-se que as duas primeiras apresentam crescimento bem mais acentuado, enquanto que a curva teórica apresentou crescimento mais suave. Isto é, seriam necessárias concentrações odorantes muito maiores para que as intensidades odorantes se elevassem de forma mais significativa na curva obtida em laboratório. Visto que a relação entre intensidades e concentrações, que mais provavelmente ocorreria na prática, é dada pela curva de laboratório, o crescimento mais acentuado das demais curvas indica que, além de correlacionar as variáveis de intensidade e concentração, a utilização de uma curva de ajuste promove uma espécie de correção na ordem de grandeza dos resultados. Isso é um indicativo de que, assim como ocorreu no experimento do traçador, o modelo AERMOD estaria subestimando as concentrações odorantes calculadas pelo modelo nas proximidades da chaminé. Ou seja, a curva de ajuste estaria desempenhando o mesmo papel desempenhado pela razão pico-média no experimento do traçador, isto é, majorar as concentrações estimadas pelo modelo.

A fim de avaliar se o método utilizado por Keder para obter intensidades odorantes simuladas era adequado, resolveu-se utilizar a curva intensidade-concentração utilizada na validação do modelo SYMOS'97 para odores, para o conjunto de concentrações simuladas através do AERMOD. Comparou-se então o desempenho da Curva (1), obtida neste trabalho, com o da Curva (2), obtida na validação do modelo SYMOS'97 para odores. Para tanto, utilizaram-se os mesmos índices estatísticos já usados na avaliação do experimento do traçador, isto é, viés (BIAS), viés fracionário (FB), erro médio quadrático normalizado (NMSE), correlação (R), viés médio geométrico (MG), variância geométrica (VG) e fator de dois (FAC2) (KEDER, 2008b). O desempenho de cada curva foi avaliado em relação aos limites e aos valores ótimos (modelo perfeito) propostos por Chang e Hanna (2005), os quais também foram utilizados na avaliação do experimento do traçador. Os resultados dessas análises são apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Comparação do desempenho entre as curvas de Keder e Souza, para as simulações realizadas com o modelo AERMOD para o experimento de Uttenweiler.

	SOUZA	KEDER	Modelo perfeito (CHANG; HANNA, 2005)	Limites (CHANG; HANNA, 2005)
BIAS	0.73	1.34	0.0	<0.3
FB	0.30	0.63	0.0	<0.3
NMSE	2.47	1.08	0.0	<1.5
R	0.59	0.55	1.0	Próximo de 1
MG	1.91	0.74	1.0	0.7<MG<1.3
VG	2.79	22.48	1.0	<4
FAC2 (%)	66.7	45.3	100.0	>50

Fonte: Elaborado pelo autor.

Comparando-se os resultados de ambas as curvas, verificou-se que, devido a ambas serem muito semelhantes, às correlações obtidas também foram muito próximas. Entretanto, a correlação obtida através da curva deste trabalho foi ligeiramente superior àquela obtida na validação do modelo SYMOS'97 para odores.

Verificou-se ainda que os resultados fornecidos através da curva obtida neste artigo ficaram mais próximos dos limites máximos estabelecidos por Chang e Hanna (2005), do que os fornecidos por meio da curva obtida por Keder. De modo geral, a utilização da metodologia proposta por Keder, Bubnik e Macoun (2003) não permite a conversão adequada de concentrações odorantes em intensidades odorantes, pois, no processo de obtenção de intensidades odorantes por meio do método da curva de ajuste, ocorre um processo de ajuste/correção dos erros provenientes das simulações. Dessa maneira, a utilização de índices estatísticos para avaliar o desempenho do procedimento não é a mais adequada, uma vez que os resultados modelados são corrigidos por meio da curva de ajuste. Um procedimento mais indicado seria transformar as concentrações simuladas em intensidades odorantes simuladas, através da utilização de uma curva de ajuste determinada em laboratório para o experimento de interesse. Essa curva de ajuste obtida em laboratório poderia ser utilizada junto a uma razão pico média adequada.

Neste trabalho, a curva de ajuste desempenha duas funções simultaneamente: transformar as concentrações/intensidades estimadas pelo modelo para períodos mais longos, em concentrações/intensidades para períodos mais curtos; majorar os cálculos do modelo. Uma forte evidência de que as curvas de ajuste utilizadas no procedimento proposto por Keder, Bubnik e Macoun (2003) não realizam apenas a transformação de concentrações em intensidades odorantes é o fato de os índices estatísticos calculados por meio da curva de ajuste

deste trabalho proverem resultados mais próximos aos limites propostos por Chang e Hanna (2005), que os obtidos por meio da curva de ajuste utilizados na validação do modelo SYMOS'97 para odores.

Apesar de não se dispor de um método de transformação de concentrações em intensidades mais confiável, foi possível observar que o algoritmo PRIME aprimorou o desempenho do modelo, como pode ser observado no Apêndice. Nesse Apêndice, observa-se que, para vários experimentos, a simulação das interferências do bosque no escoamento foi condizente com os resultados observados pelos jurados em campo, e que, à medida que o escoamento se afastava dos obstáculos, o escoamento passava a indicar uma influência cada vez mais reduzida dos obstáculos.

A despeito de algumas dificuldades, verificou-se que o modelo AERMOD é capaz de simular de forma satisfatória a dispersão de poluentes odorantes, uma vez realizados os devidos ajustes. Recomenda-se que sejam efetuados testes de validação que permitam a detecção de padrões de subestimação ou superestimação de concentrações.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho avaliou-se comparativamente o desempenho de dois modelos de dispersão em relação a um experimento de dispersão consagrado na literatura, o experimento de dispersão de Uttenweiler. A partir dos resultados e métodos propostos por Keder, Bubnik e Macoun (2003), Keder (2008a) e Keder (2008b), para o modelo SYMOS'97, foi feita uma avaliação comparativa do desempenho do modelo AERMOD.

A realização deste trabalho permitiu conhecer de forma mais detalhada as limitações e aplicabilidades de modelos gaussianos. Verificou-se que os modelos gaussianos, devido a sua formulação, não são adequados para simular condições meteorológicas de ventos pouco intensos, uma vez que o termo advectivo é inversamente proporcional à concentração nessa formulação. Verificou-se ainda que a formulação do modelo assume, por definição, condições meteorológicas estacionárias, para cada intervalo de tempo simulado, ou seja, a ocorrência de pequenas mudanças nas condições meteorológicas, ao longo de cada experimento simulado, não é reproduzida nas simulações, uma vez que faz-se uso apenas de dados meteorológicos médios. Apesar disso, os modelos gaussianos podem ser bastante úteis, provendo resultados seguros, desde que sejam conhecidas e respeitadas essas limitações e outras, como a utilização do modelo para terrenos com topografia muito acidentada.

Quanto ao experimento de Uttenweiler, a estabilidade atmosférica foi limitada às classes estável e neutra, o que simplificou a situação modelada. Em uma situação real, outras condições meteorológicas, que não foram avaliadas neste estudo, estariam presentes.

Apesar de conter algumas simplificações, o experimento de Uttenweiler possui alguns fatores que aumentam a complexidade da situação modelada, quais sejam: a presença de obstáculos e a simulação de concentrações de pico a partir de concentrações médias. Além das características já mencionadas, o experimento de Uttenweiler dispõe de uma característica em especial: a possibilidade de intercomparação dos resultados. Este experimento já foi amplamente simulado o que permite que os resultados obtidos sejam comparados aos já realizados.

Ao longo das simulações realizadas com o modelo AERMOD, percebeu-se que as variáveis de uso do solo podem ser utilizadas para auxiliar no ajuste do modelo à situação a ser modelada, em especial o comprimento de rugosidade superficial. A realização de simulações prévias no módulo AERMET, para diversos valores de comprimentos de rugosidade, permitiu que se conhecesse que comprimentos melhor conseguiriam simular a velocidade de fricção quantificada pelo anemômetro sônico. Essa estratégia revelou-se bastante eficaz e aprimorou o desempenho das simulações realizadas pelo modelo, sendo demonstrado através dos índices estatísticos calculados. É importante destacar que, em locais onde não se dispõe de uma base de uso do solo atualizada, existe muitas vezes uma grande preocupação na estimação adequada desses parâmetros. Entretanto,

a realização de um experimento de campo de curta duração poderia prover respostas que melhor ajustassem o modelo ao experimento a ser modelado.

Em relação às simulações do experimento de Uttenweiler, verificou-se que a utilização de um traçador revelou-se bastante interessante, visto que as plumas geradas para o traçador eram muito semelhantes às plumas de concentração odorante (as plumas geradas para o experimento do traçador pelo modelo AERMOD foram tão semelhantes às geradas para o experimento odorante que resolveu-se não incluí-las nos anexos, por entender-se que a inclusão das mesmas era desnecessária). A utilização de um gás traçador poderia auxiliar no processo de calibração do modelo, através da implementação de um procedimento análogo ao realizado por Bächlin, Rühling e Lohmeyer, (2002). O procedimento poderia ser aprimorado através do posicionamento de sensores, ao longo de todo o raio da fonte monitorada, e uma campanha de monitoramento mais duradoura poderia ser realizada.

Quanto às simulações do experimento do traçador, verificou-se que o modelo AERMOD conseguiu apresentar resultados próximos a aqueles obtidos para o modelo SYMOS'97, porém para isto foi necessário fazer-se uso de uma razão pico média mais elevada. Percebeu-se que, fazendo-se uso da razão pico média 2,2 para transformar concentrações médias de 10 minutos em concentrações médias de 10 segundos, geravam-se resultados mais significativos que os apresentados por quaisquer modelos já testados para o experimento de Uttenweiler. Entretanto, como já discutido, a concentração média não indica o real impacto causado por um poluente que necessite ter a sua concentração de pico avaliada, como no caso de um poluente odorante. E, uma vez que as médias das concentrações, para períodos de 10 segundos, não são capazes de indicar a extensão do impacto odorante, realizou-se uma majoração das concentrações simuladas, obtendo-se concentrações de pico de 10 segundos. Este procedimento revelou-se satisfatório, visto que, com a utilização do mesmo, o modelo AERMOD superou o desempenho de outros modelos mais avançados, com relação aos índices estatísticos de NMSE e FB.

Neste trabalho, a razão pico média 6,6 foi obtida de forma que o modelo pudesse gerar melhores resultados. Isto é, essa razão foi obtida a partir de uma correlação entre os dados observados e simulados. Esse procedimento foi adotado com o intuito de verificar quão bom poderia ser o desempenho do modelo AERMOD diante de um ajuste adequado do mesmo. Entretanto, esse procedimento não valida a utilização da razão pico-média adotada para um conjunto de dados mais amplo que aquele utilizado para sua obtenção. Uma alternativa seria utilizar apenas parte do experimento para a obtenção da razão pico-média e o restante do experimento para testar se a razão escolhida foi ou não adequada. Caso o modelo AERMOD seja utilizado para simular o impacto odorante, sugere-se que seja efetuado um experimento de campo preliminar que permita determinar a razão pico-média adequada, bem como ajustar o modelo às características da localidade a ser simulada. É possível que seja necessário variar a razão pico média em função de outras grandezas não avaliadas no estudo, como por exemplo a estabilidade atmosférica.

Quanto ao desempenho do modelo AERMOD na simulação do experimento do traçador de Uttenweiler, verificou-se que o modelo apresentou excelente desempenho, superando inclusive o desempenho de modelos mais avançados. Mas, apesar desse excelente resultado, é necessário fazer uma análise dos procedimentos adotados na realização desse trabalho, isto é: o procedimento da escolha da razão pico-média, e da escolha das variáveis de uso e ocupação do solo.

Outro aspecto a ser considerado são as características da situação modelada, que, no caso, eram extremamente favoráveis à utilização de modelos gaussianos. Caso a situação modelada apresentasse: proximidade em relação a cursos d'água, interferência significativa da topografia no escoamento ou ventos de baixa intensidade; a utilização de um modelo mais robusto seria altamente recomendada. Todavia, apesar das limitações que os modelos gaussianos possuem, verificou-se que tanto o modelo SYMOS'97 quanto o modelo AERMOD alcançaram resultados relevantes, quando comparados aos obtidos por modelos mais avançados. Isto demonstra que, dependendo das condições simuladas, os modelos gaussianos podem prover respostas seguras, simples e confiáveis.

Em relação às simulações de dispersão odorante, verificou-se que a não determinação de uma curva que correlacionasse as variáveis de intensidade e concentração odorante prejudicou a avaliação do desempenho do modelo na simulação desse experimento. A utilização da metodologia proposta por Keder, Bubnik e Macoun (2003), Keder (2008a) e Keder (2008b) revelou-se insatisfatória, visto que parte dos erros do modelo foram corrigidos pela curva de ajuste obtida, o que prejudicou a avaliação do desempenho do modelo para esse experimento. Como alternativa a esse problema apresentado, pode ser testada a utilização de curvas de intensidade-concentração, como a proposta por Nicolai, Clanton e Guo (2000). Porém, o procedimento ideal seria a realização de um experimento olfatométrico laboratorial para determinar as relações entre as variáveis intensidade e concentração, sobretudo no caso de ser realizada uma nova campanha de monitoramento para poluentes odorantes. Esse procedimento permitiria que fossem conhecidas as relações entre as variáveis intensidade e concentração odorante, sem que fosse necessário efetuar a utilização de curvas de ajuste baseadas na literatura ou que se fizesse uso de métodos de estimação da curva de intensidade-concentração, a partir de procedimentos não muito precisos.

A determinação da curva de intensidade-concentração a partir de um experimento laboratorial ainda permitiria que se estabelecesse uma análise crítica mais pormenorizada em relação ao desempenho dos modelos na simulação de poluentes odorantes. Outra alternativa seria a utilização de equipamentos como olfatômetros de campo que permitiriam a aferição de concentrações odorantes a sotavento da chaminé, e que as mesmas fossem comparadas às concentrações modeladas.

Entretanto, apesar de as bases de dados do experimento de Uttenweiler já terem sido amplamente testadas, ainda há espaço para a realização de novos

trabalhos que avaliem a série de dados meteorológicos como um todo, e não apenas a utilização de médias para períodos de 10 minutos.

A utilização de outros modelos que permitam a inserção de um maior número de dados meteorológicos também poderia ser testada. Modelos como o CALPUFF, que assimilam dados de mais de uma estação meteorológica por simulação e permitem a utilização de dados em frequência sub-horária, permitiriam uma investigação mais ampla das potencialidades do modelo frente ao conjunto de dados disponibilizado.

Outro aspecto a ser verificado é a correção das taxas de emissão odorante. Poder-se-iam realizar simulações comparativas de emissões nas condições normais de temperatura e pressão, e em condições ambientes, a fim de verificar que correções na taxa de emissão melhor reproduziriam às condições verificadas em campo.

O experimento de Uttenweiler é representativo de condições reais de dispersão de compostos odorantes, avaliando a dispersão odorante em condições neutras de estabilidade atmosférica. Porém, ainda são necessárias a realização de inspeções de campo que permitam a avaliação dos modelos de dispersão com condições atmosféricas mais realísticas do local simulado, isto é, que incluam condições de atmosfera turbulenta e condições de calmaria.

Visto que não existe uma base de dados de odores nacional, que permita a avaliação do desempenho de modelos para o Brasil, sugere-se que se realize uma investigação através de inspeções de campo nos moldes da norma alemã GOAA (2003), em solo brasileiro, a fim de se testar que modelos melhor caracterizariam a dispersão odorante para as condições encontradas em alguma região do país.

Finalmente, pode-se concluir que a realização deste trabalho possibilitou uma maior compreensão das limitações e aplicabilidades dos modelos gaussianos e das dificuldades encontradas na modelagem da dispersão de compostos odorantes. Espera-se com isso contribuir para o desenvolvimento de novos trabalhos na área da modelagem da dispersão de odores, bem como no controle e gestão de odores, sobretudo em solo nacional.

6. REFERÊNCIAS

AUBRUN, S.; LEITL, B. Unsteady characteristics of the dispersion process in the vicinity of a pig barn. Wind tunnel experiments and comparison with field data. **Atmospheric Environment**, v. 38, n. 1, p. 81–93, jan. 2004.

BÄCHLIN, W.; RÜHLING, A.; LOHMEYER, A.. **BEREITSTELLUNG VON VALIDIERUNGS- DATEN FÜR GERUCHSAUSBREITUNGS- MODELLE – NATURMESSUNGEN**. Baden-württemberg: Ingenieurbüro Lohmeyer, 2002. 188 p.

BOEKER, P.; WALLENFANG, Oliver; KOSTER, Frank; CROCE, Roberto; DIEKMANN, Bernd; GRIEBEL, Michael; LAMMERS, Peter Schulze. The Modelling of Odour Dispersion with Time-Resolved Models. **Agrartechnische Forschung**, v. 6, n. 4, p. 84–89, 2000.

BUBNÍK, J.; KEDER, J.; MACOUN, J. **SYMOS'97 - Systém modelování stacionárních zdrojů - Metodická příručka**. Praha. p. 65.

CAPELLI, Laura; SIRONI, Selena; DEL ROSSO, Renato; CÉNTOLA, Paolo; IL GRANDE; Massimiliano. A comparative and critical evaluation of odour assessment methods on a landfill site. **Atmospheric Environment**, v. 42, n. 30, p. 7050–7058, set. 2008.

CAPELLI, Laura; SIRONI, Selena; DEL ROSSO, Renato; CÉNTOLA, Paolo; ROSSI, Adriano; AUSTERI, Caterina. Olfactometric approach for the evaluation of citizens' exposure to industrial emissions in the city of Terni, Italy. **The Science of the total environment**, v. 409, n. 3, p. 595–603, 1 jan. 2011.

CAPELLI, Laura; SIRONI, Selena; DEL ROSSO, Renato. Electronic Noses for Environmental Monitoring Applications. **Sensors**, v. 14, n. 11, p. 19979–20007, 2014.

CARMO JUNIOR, G. N. DA R. **Otimização e avaliação de metodologias olfatométricas voltadas ao saneamento ambiental**. Universidade Federal de Santa Catarina, 2005.

CHANG, J. C.; HANNA, S. R. Air quality model performance evaluation. **Meteorology and Atmospheric Physics**, v. 87, n. 1-3, p. 167–196, 2 jun. 2004.

CHANG, J. C.; HANNA, S. R. **Technical Descriptions and User's Guide for the BOOT Statistical Model Evaluation Software Package**.

CIMORELLI, A. J.; PERRY, Steven G.; VENKATRAM, Akula; WEIL, Jeffrey C.; PAINE, Robert J.; WILSON, Robert B.; LEE, Russell F.; PETERS, Warren D.; BRODE, Roger W.; PAUMIER, James O.. **AERMOD: description of model formulation**, 2004.

CUNHA, B. D. DA. **Estratégias de uso do modelo AERMOD para avaliação da qualidade do ar**. [s.l.] Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2009.

DE CARVALHO SOUZA, F. F. **Utilização conjunta do modelo de prognóstico mm5 e do modelo de dispersão aermod para a região metropolitana do rio de janeiro**. [s.l.] Universidade Federal de Santa Catarina, 2011.

DE MELO LISBOA, H.; GUILLOT, Jean-Michel.; FANLO, Jean-Louis; CLOIREC, Pierre Le. Dispersion of odorous gases in the atmosphere - Part I: Modeling approaches to the phenomenon. **The Science of the total environment**, v. 361, n. 1-3, p. 220–8, 2006.

EPA – ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **User's guide for the ams/epa regulatory model-AERMOD**. p. 216.

EPA – ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **AERMINUTE User's Instructions**. p. 1–33.

FAULKNER, W. B.; SHAW, B. W.; GROSCH, T. Sensitivity of Two Dispersion Models (AERMOD and ISCST3) to Input Parameters for a Rural Ground-Level Area Source. **Journal of the Air & Waste Management Association**, v. 58, n. 10, p. 1288–1296, 2008.

FREEMAN, T.; CUDMORE, R. **Review of Odour Management in New Zealand**.

GOAA. **Determination and assessment of odour in ambient air (Guideline on odour in ambient air / GOAA) with background information and interpretation to the GOAA issued 7 th May**, 1999 Translation March 2003.

GOSTELOW, P.; PARSONS, S. A.; STUETZ, R. M. REVIEW PAPER ODOUR MEASUREMENTS FOR SEWAGE TREATMENT. **Water Research**, v. 35, n. 3, p. 579–597, 2001.

GROSCH, T. G.; LEE, R. F. **Sensitivity of the AERMOD air quality model to the selection of land use parameters**. 1999.

IBGE. **Produção da Pecuária Municipal**. Rio de Janeiro. Disponível em: <<http://www.ibge.gov.br/home/estatistica/economia/ppm/2010/ppm2010.pdf>>.

KARVOUNIS, G.; DELIGIORGI, D.; PHILIPPOPOULOS, K. **On the sensitivity of aermod to surface parameters under**. p. 43–47, 2007.

KEDER, J. Adaptation fo the Czech regulatory dispersion model for odour dispersion calculation, its validation and critical evaluation. **Chemical Engineering Transactions**, v. 15, p. 17–22, 2008a.

KEDER, J. **Czech odour dispersion model and its validation**. Disponível em: <<http://www.cschi.cz/odour/files/pdf1/003-Keder-CHMI.pdf>>.

KEDER, J.; BUBNIK, J.; MACOUN, J. **Validation of czech reference model symos'97, adapted for odour dispersion modeling 1**. p. 139–142, 2003.

LONG, G. E.; CORDOVA, J. F.; TANRIKULU, S. **Meteorology Data**. p. 1–4, 2003.

MAÏZI, A.; DHAOUADI, H.; BOURNOT, P.; MHIRI, H.. CFD prediction of odorous compound dispersion: Case study examining a full scale waste water treatment plant. **Biosystems Engineering**, v. 106, n. 1, p. 68–78, 2010.

MANDU, J. B. **Aplicação do modelo de dispersão aermod às emissões odorantes oriundas de um frigorífico**. Universidade Federal de Santa Catarina, 2010.

MCGINLEY, M. A.; MCGINLEY, C. M.; JEFF, M. **Olfactomatics: Applied Mathematics For Odor Testing**. 2000.

MFE - MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT. **Good Practice Guide for Atmospheric Dispersion Modelling** New Zealand, 2004.

MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T.; MORAES, M. R. DE. Meteorologia e poluição atmosférica. **Ambiente & sociedade**, v. 11, n. 1, p. 1–13, 2008.

NICELL, J. A. Assessment and regulation of odour impacts. **Atmospheric Environment**, v. 43, n. 1, p. 196–206, 2009.

NICOLAI, R. E.; CLANTON, C. J.; GUO, H. Modeling the relationship between detection threshold and intensity of swine odors. **American Society of Acricultural Enginners**, p. 296–304, 2000.

PONGRATZ, T.; ÖTTL, D.; UHRNER, U. **Documentation of the Lagrangian Particle Model GRAL (Graz Lagrangian Model)**.

RANZATO, L. Barausse, Alberto; MANTOVANI, Alice; PITTARELLO, Alberto; BENZO, Maurizio; PALMERI, Luca. A comparison of methods for the assessment of odor impacts on air quality: Field inspection (VDI 3940) and the air dispersion model CALPUFF. **Atmospheric Environment**, v. 61, p. 570–579, 2012.

RØRDAM, Helge; LØFSTRØM, Per; BERKOWICZ, Ruwim; KETZEL, Matthias. **Regulatory odour model development: Survey of modelling tools and datasets with focus on building effects** NERI Technical Report No. 541.

SCHAUBERGER, Günther; PIRINGER, Martin; KNAUDER, Werner; PETZ, Erwin. Odour emissions from a waste treatment plant using an inverse dispersion technique. **Atmospheric Environment**, v. 45, n. 9, p. 1639–1647, 2011.

STENZEL, Sirma; POLREICH, Erwin; PETZ, Erwin; SKOMOROWSKI, Paul; RAU, Gabriele; **Model comparison study - LASAT vs. GRAL** Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. Anais...Kos, Greece: 2011.

STOCKIE, J. M. The Mathematics of Atmospheric Dispersion Modeling. **SIAM Review**, v. 53, n. 2, p. 349–372, jan. 2011.

TURTOS CARBONELL, Leonor Maria; GACITA, Madeleine Sanchez; OLIVA, Jose de Jesus Rivero; GAREA, Larisa Curbelo; RIVERO, Norberto Diaz; RUIZ, Elieza Meneses. Methodological guide for implementation of the AERMOD system with incomplete local data. **Atmospheric Pollution Research**, v. 1, n. 2, p. 102–111, 2010.

VIEIRA DE MELO, Andler Magno; SANTOS, Jane Meri; MAVROIDIS, Ilias; REIS JUNIOR, Neyval Costa. Modelling of odour dispersion around a pig farm building complex using AERMOD and CALPUFF. Comparison with wind tunnel results. **Building and Environment**, v. 56, p. 8–20, 2012.

VIEIRA, M. M. **Avaliação da Eficiência de um Lavador de Gases no Tratamento dos Efluentes Gasosos de um Restaurante no Município de Florianópolis (SC)**. Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.

VIEIRA, M. M. **Abordagem de procedimentos legais para o controle de incômodos olfativos**. Universidade Federal de Santa Catarina, 2013.

YU, Z. **Development of a Livestock Odour Dispersion Model.** University of Saskatchewan, 2010.

APÊNDICE

No apêndice, são apresentados os resultados das comparações das intensidades odorantes observadas em campo pelos jurados em relação às intensidades odorantes previstas pelo modelo AERMOD. Para cada experimento B-O foram confeccionadas duas imagens. Na primeira delas, é apresentada a direção de dispersão da pluma de poluentes odorantes e sua concentração, simulada a partir do modelo AERMOD. Na segunda imagem, é apresentada uma comparação entre as intensidades simuladas em relação às intensidades observadas pelos jurados em campo.

A seguir, é realizada uma breve descrição que auxiliará no entendimento dos dados apresentados em cada figura deste anexo:

Na figura que apresenta a direção em que o poluente se dispersa, os pontos vermelhos indicam a posição de cada jurado, enquanto que as linhas circulares tracejadas designam a região de influência exercida pelos obstáculos. As circunferências menores são referentes a área de influência das edificações, enquanto que a circunferência maior é referente a área de influência do bosque. Dentro das áreas de influência dos obstáculos, as concentrações são calculadas considerando-se a influência exercida por eles, enquanto que fora delas essa influência é desconsiderada. Para maiores detalhes, recomenda-se que seja vista a Seção 2.3, que explica com maiores detalhes o processo de cálculo das concentrações, sob a influência de edificações, no modelo AERMOD. No lado direito de cada uma dessas figuras, é apresentada uma escala de concentrações odorantes. As concentrações apresentadas nessas figuras não foram multiplicadas pela razão pico-média, porém são capazes de indicar as regiões de máximas e mínimas concentrações, para cada experimento simulado. O entendimento dessas primeiras imagens auxilia na compreensão da figura subsequente, apresentada em cada experimento. A segunda figura de cada experimento apresenta um comparativo das intensidades simuladas pelo modelo AERMOD. Em ambas, realizou-se a transformação das concentrações odorantes simuladas em intensidades odorantes simuladas, a partir da curva de ajuste encontrada por Keder e através da utilização da curva de ajuste encontrada neste trabalho, por meio da aplicação do método proposto por Keder.

Nas figuras em que se comparam as intensidades odorantes simuladas e as observadas, as barras em azul e em vermelho são referentes as intensidades odorantes previstas pelo modelo AERMOD, diferindo entre si, pelo método de transformação das concentrações em intensidades. Nas barras em azul, utilizou-se a equação $I = 2,378 \cdot C^{-0,3223}$. Essa equação é proveniente do método de ajuste que melhor descreve o conjunto de dados observados e estimados pelo AERMOD, para este trabalho. As barras em vermelho são referentes a equação $I = 1,086^{0,464}$. Essa equação foi obtida por Keder, em trabalho análogo a este, em que utilizou-se o modelo SYMOS'97, para se obter a equação de ajuste das concentrações em intensidades. As barras em verde são referentes às intensidades percebidas pelos jurados em campo. A seguir, são apresentadas as imagens

referentes aos resultados dos experimentos B a O. Apesar de o experimento D não ter sido utilizado no cálculo dos índices estatísticos do modelo AERMOD, devido não terem sido utilizados nos experimentos de validação do modelo SYMOS'97 realizados por Keder, apresentam-se neste anexo as figuras referentes à simulação do experimento D, realizado a partir do modelo AERMOD.

Experimento B:

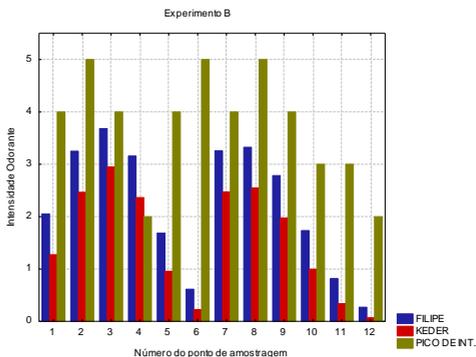
Neste experimento, percebe-se que o centro da pluma simulada está situado sobre os receptores 2-4, na primeira linha de receptores, e entre os receptores 7 e 8, na segunda (Figura15). Verificou-se que houve boa concordância entre os resultados simulados e observados para este experimento. Entretanto, os jurados 5 e 6 perceberam picos de intensidade que não foram reproduzidas nas simulações apresentadas na Figura 16. Uma mudança repentina da direção do vento poderia ser responsável pelas elevadas concentrações percebidas por esses jurados. Visto que o modelo simula as condições meteorológicas médias, variações temporais da direção do vento não são reproduzidas pelo modelo.

Figura 15: Localização dos jurados no experimento B.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 16: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento B (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento C:

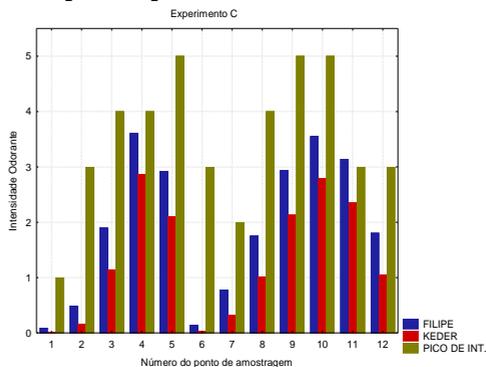
Neste experimento, percebeu-se que o centro da distribuição situou-se entre os jurados 3-6, na primeira linha, e de 8 a 12, na segunda (Figura 17). Assim como no experimento anterior, os primeiros seis jurados encontravam-se na área de influência dos obstáculos, enquanto que os seis últimos não. Na Figura verificou-se que, mesmo fazendo uso da razão pico média, os valores simulados através do AERMOD mantiveram-se abaixo dos valores observados em campo pelos jurados. Ainda em relação à Figura 17, a pluma de poluentes parece ter sofrido uma leve mudança de direção entre a primeira e a segunda linha de jurados. Na primeira linha de jurados, a intensidade odorante cresce na direção do jurado de número seis, enquanto que, na segunda linha, a pluma de poluentes parece ter ficado centrada entre os jurados na metade da linha (Figura 18). Conforme pode-se ver na Figura 17, o bosque parece exercer uma influência na mudança de direção do escoamento, que depois tende a não ser mais percebida. Efeito semelhante a este foi verificado por Maïzi, Dhaouadi, Bournot, Mhiri (2010), através da simulação da dispersão de compostos odorantes provenientes de uma ETE, por meio de um modelo CFD.

Figura 17: Localização dos jurados no experimento C.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 18: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento C (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento D:

No experimento D, a influência do bosque no escoamento da pluma pode ser mais fortemente percebida. Nas proximidades do bosque, o escoamento sofre uma perturbação, que tende a voltar à normalidade à medida que o escoamento se afasta do bosque (Figura 19). Verificou-se que o bosque limitou a dispersão lateral do poluente. A influência do bosque fez com que o modelo estimasse as maiores concentrações na direção do jurado de número 6, na primeira linha, e na direção do jurado de número 12, na segunda (Figura 20). Verificou-se ainda que,

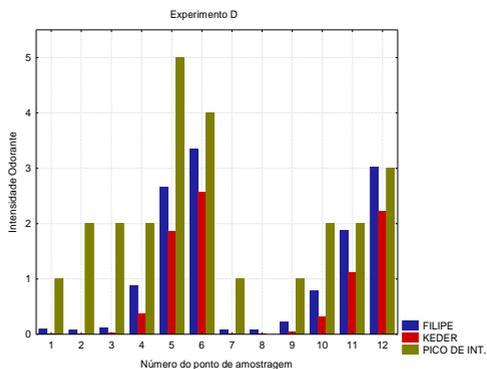
na primeira linha, os resultados simulados ficaram abaixo das intensidades observadas, porém alcançaram as mesmas ordens de grandeza das intensidades observadas na segunda linha.

Figura 19: Localização dos jurados no experimento D.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 20: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento D (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento E:

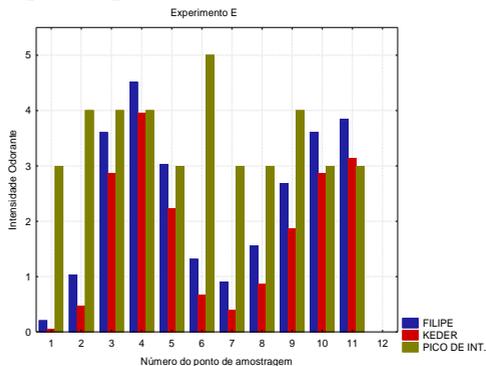
O experimento E apresenta uma leve mudança de direção entre a primeira e segunda linhas (Figura 21). Essa mudança faz com que o pico de concentrações se apresente próximo ao jurado de número 3, na primeira linha, e na direção do jurado de número 12, na segunda. Esse experimento, apresentado na Figura 22, revela um comportamento peculiar em que o jurado de número 6 percebe as maiores intensidades odorantes, apesar de não estar situado em uma posição que corresponderia ao centro da pluma. A situação mais esperada para este caso seria que as concentrações crescessem na direção do centro da pluma e decrescessem à medida que se afastassem do centro da pluma, porém, neste caso, um comportamento não esperado é apresentado. Esse comportamento pode ter ocorrido devido a dois fatores: primeiramente, pode ter ocorrido uma rápida mudança na direção do vento em relação ao jurado de número 6 fazendo com que o jurado percebesse elevadas concentrações odorantes. Visto que nessa análise consideram-se somente as concentrações máximas por jurado, uma elevada concentração devido a uma rápida mudança na direção do vento poderia gerar concentrações mais altas que aquelas obtidas por meio da manutenção da direção média do vento para o restante do experimento. Em segundo lugar, pode ter ocorrido um erro nas aferições do jurado de número 6. Essa peculiaridade influencia diretamente o cálculo do índice de correlação que, por sua vez, é fortemente influenciado pelos acertos e erros que o modelo efetua em relação às taxas de crescimento e decrescimento de concentrações e intensidades observadas. Vale à pena lembrar que o experimento observado não é isento de falhas e que a avaliação do desempenho de um modelo deve considerar a consistência do experimento de campo e dos dados observados no mesmo. A rápida mudança na direção do vento é um fator que reduz a reprodutibilidade pelos modelos das condições aferidas em campo. Caso fosse utilizada a totalidade do conjunto de dados meteorológicos quantificados em campo, o modelo poderia gerar resultados mais próximos daqueles aferidos em campo, durante a realização do experimento de Uttenweiler. Entretanto, a ferramenta utilizada, aqui neste estudo, não foi concebida para simular variações temporais de dados meteorológicos em intervalos tão pequenos quanto aos disponíveis para este experimento.

Figura 21: Localização dos jurados no experimento E.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 22: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento E (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento F:

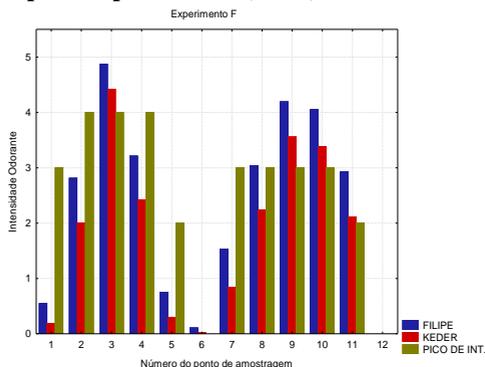
No experimento F, percebeu-se uma fortíssima correlação entre os dados simulados e observados. Os máximos percebidos pelos jurados foram reproduzidos nas simulações, sendo que as intensidades máximas simuladas coincidiram com os locais em que os jurados perceberam as máximas intensidades odorantes (Figura 23). Verifica-se ainda que, em ambas as linhas, o modelo previu intensidades odorantes da mesma ordem de grandeza das intensidades observadas em campo. Assim como nos experimentos anteriores, a utilização da conversão de concentração em intensidades, pelo método de Keder, gerou intensidades ligeiramente inferiores àquelas obtidas neste trabalho, através da aplicação de método análogo ao proposto por Keder (Figura 24).

Figura 23: Localização dos jurados no experimento F.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 24: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento F (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento G:

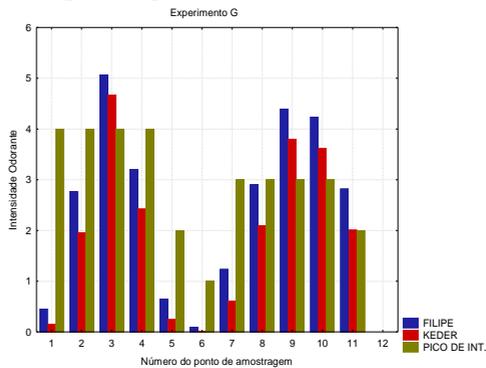
Assim como no experimento anterior, o experimento G também apresenta uma excelente correspondência entre os dados simulados por meio do modelo AERMOD e os dados aferidos pelos jurados em campo (Figura 26). Nesse experimento a influência do bosque na dispersão é menor visto que os jurados encontram-se quase na sua totalidade fora da área de influência desse obstáculo (Figura 25). A ordem de grandeza dos dados simulados é ligeiramente superior a dos dados observados (Figura 26). Percebeu-se ainda que, nos experimentos F e G, o jurado de número 1 não teve uma boa reprodução dos dados observados (Figuras 23 e 25).

Figura 25: Localização dos jurados no experimento G.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 26: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento G (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento H:

No experimento H praticamente não há mudança de direção da pluma em função dos obstáculos (Figura 27). Porém, a simulação do experimento situa o centro da distribuição na primeira linha sobre os jurados de número 2 e 3, enquanto que no experimento observado o centro da distribuição situa-se sobre o jurado de número 3. Esse erro não se verificou na segunda linha, que manteve uma maior correlação entre os dados simulados e os dados observados (Figura 28).

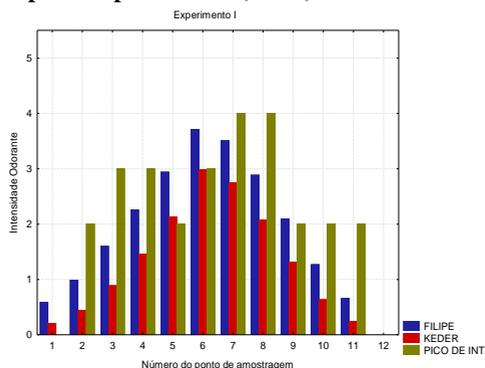
odorantes. Isto é, o escoamento se afasta do bosque inicialmente e à medida que o escoamento se afasta do bosque a influência do mesmo passa a ser não mais percebida e o escoamento tende a voltar a seu estado anterior. Comparando-se as intensidades simuladas e observadas, percebe-se que o modelo tem um bom desempenho; porém, enquanto os jurados perceberam as máximas intensidades odorantes entre os jurados de número 7 e 8, o modelo estipula máximas concentrações entre os jurados 6 e 7. Essa limitação do modelo só pode ser detectada através dessa nova disposição de jurados, que aproximou os jurados uns dos outros (Figura 30).

Figura 29: Localização dos jurados no experimento I.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 30: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento I (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento J:

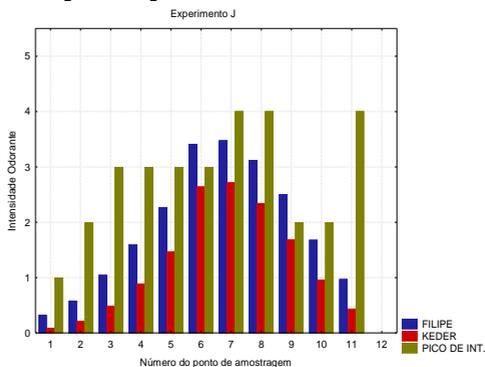
Semelhantemente ao experimento anterior, a disposição dos jurados foi mantida. Percebeu-se ainda que, assim como no experimento anterior, o bosque exerceu influência no estreitamento da pluma a sotavento do mesmo (Figura 31). Ainda em relação ao experimento anterior, percebe-se que o modelo não simulou as máximas intensidades para as mesmas localidades em que os jurados perceberam as máximas intensidades odorantes (Figura 32). Porém, o fato de os jurados estarem mais próximos, do que nas simulações em que são utilizadas duas linhas, demonstra que o modelo continua tendo uma boa acurácia, apesar de perder precisão em simulações que consideram receptores muito próximos uns aos outros. Diferentemente do experimento anterior, o jurado de número 11 percebeu uma elevada intensidade odorante, que não foi detectada na simulação do experimento. Como já discutido anteriormente, esse fato pode ter sido ocasionado devido a uma rápida mudança na direção do vento, que não foi reproduzida nas simulações, uma vez que considerou-se apenas a direção média do vento para cada experimento de 10 minutos.

Figura 31: Localização dos jurados no experimento J.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 32: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento J (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento K:

O experimento K, assim como os dois anteriores posicionou os jurados em uma única linha. Como nos casos anteriores, o bosque exerceu influência no estreitamento da pluma de poluentes (Figura 33). Entretanto, para este experimento, o modelo não foi capaz de detectar as máximas intensidades odorantes nos mesmos locais em que os jurados perceberam. O jurado de número 8 foi aquele que percebeu as máximas concentrações no experimento de campo. Isso é demonstrado através do crescimento e diminuição das intensidades

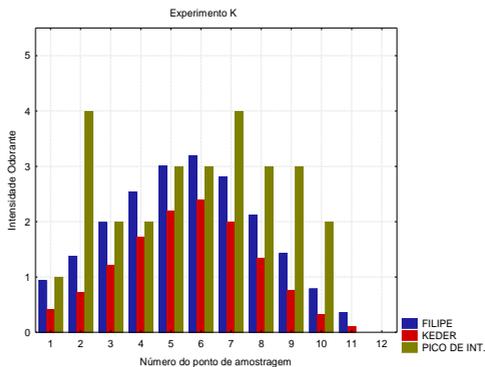
odorantes percebidas pelos jurados anexos a este. Já no experimento simulado, o centro da pluma ficou próxima ao jurado de número 6 (Figura 34). Neste experimento, verificou-se que o jurado de número 2 percebeu as maiores intensidades odorantes, e que isto não se reproduziu nas simulações. O fato de o jurado de número 2 ter detectado elevadas concentrações pode ser devido a um erro nas aferições efetuadas pelo jurado ou pode ainda ser devido a uma rápida mudança na direção do vento em relação a sua direção média.

Figura 33: Localização dos jurados no experimento K.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 34: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento K (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento L:

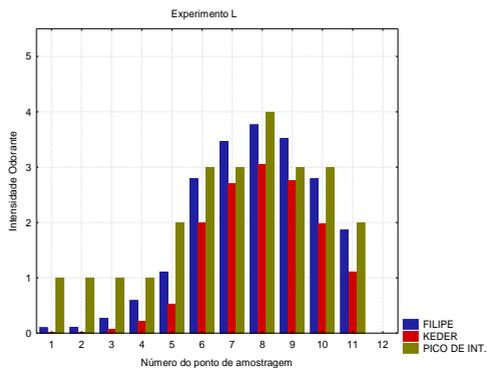
No experimento L, assim como nos três experimentos anteriores, os jurados foram posicionados lado a lado em uma única linha dentro da área de influência do bosque. Assim como nos experimentos anteriores, o bosque provoca o estreitamento da pluma de poluentes, fazendo com que os jurados de 1 a 5 percebam uma baixa concentração de poluentes (Figura 35). Esse efeito foi percebido pelos jurados em campo e na localização equivalente a posição dos jurados nas simulações realizadas (Figura 36). Neste experimento os dados simulados obtiveram uma elevada correlação com os observados, uma vez que o modelo detectou os mesmos efeitos percebidos pelos jurados em campo.

Figura 35: Localização dos jurados no experimento L



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 36: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento L (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento M:

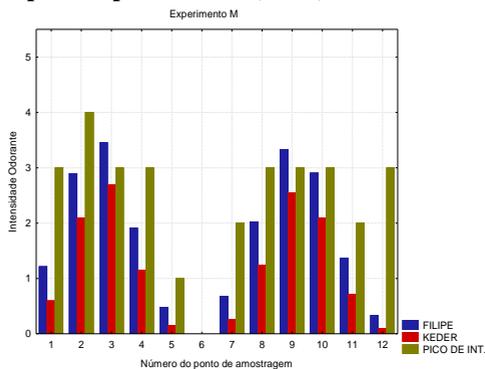
No experimento M voltou-se a fazer uso de duas linhas de jurados: a primeira com cinco jurados e a segunda com seis. Neste experimento a influência do bosque é percebida no escoamento por meio das ondulações que a pluma de odores efetua nas adjacências do bosque (Figura 37). Apesar de não reproduzir de forma tão perfeita o experimento de campo, o experimento simulado conseguiu captar as regiões em que se perceberam as máximas intensidades odorantes. Apenas o jurado de número 12 percebeu uma intensidade odorante acima daquela que seria esperada para a sua localidade (Figura 38), uma vez que o mesmo encontra-se na região em que as intensidades odorantes observadas pelos jurados começam a ser de menores proporções. Ou seja, assim como justificado nos casos anteriores esse efeito pode ter sido proveniente de um erro nas aferições do jurado ou de uma rápida alternância nas direções do vento. A primeira hipótese é bastante plausível uma vez que cada jurado efetua 60 aferições por experimento e apenas, uma delas (a maior) está sendo utilizada para fins de quantificação dos picos de intensidade odorante.

Figura 37: Localização dos jurados no experimento M.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 38: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento M (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento N:

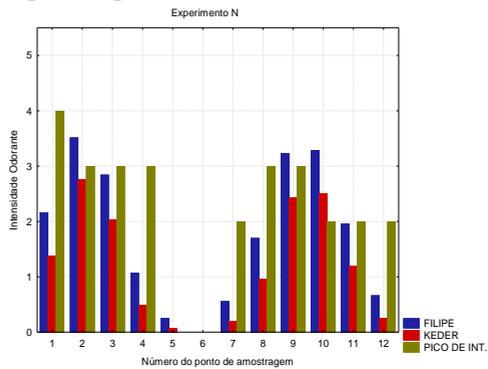
No experimento N, a primeira linha encontra-se dentro da área de influência do bosque. Apesar de a angulação do vento causar uma interferência menos significativa do bosque no escoamento pode ser verificada uma flutuação da direção da pluma nas proximidades do bosque (Figura 39). Verificou-se ainda que os jurados 4 e 5 encontram-se em uma região em que a influência da pluma é pouco sentida no experimento simulado. Porém, isso não se confirmou no experimento de campo, uma vez que as intensidades odorantes ainda são verificadas pelo jurado de número 4 (Figura 40).

Figura 39: Localização dos jurados no experimento N.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 40: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento N (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Experimento O:

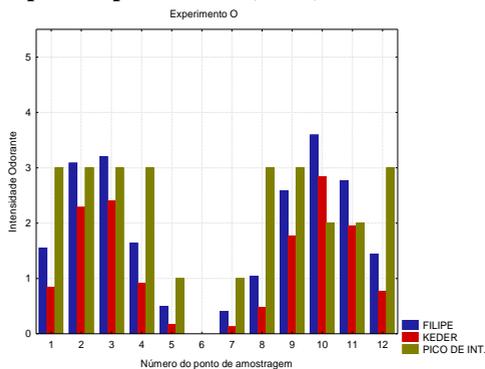
O experimento O também contou com duas linhas sendo que a primeira delas encontra-se dentro da área de influência do bosque (Figura 41). Os jurados que encontravam-se na primeira linha detectaram um platô de intensidades odorantes sem que um pico de intensidades fosse efetivamente percebido (Figura 42). Na segunda linha o pico de intensidades odorantes observadas ficou situado entre os jurados 8 e 9. Já o pico de intensidades simuladas situa-se próximo a região do jurado de número 10. O jurado de número 12 aferiu elevadas intensidades odorantes que podem ter sido oriundas de uma rápida mudança da direção do vento que não alterou significativamente a direção média do vento ou por um erro de aferição do jurado.

Figura 41: Localização dos jurados no experimento O.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 42: Comparação das concentrações estimadas pelo AERMOD e transformadas em intensidades a partir da curva obtida neste trabalho (azul) e da curva obtida por Keder, Bubnik e Macoun (2003) (vermelho) com os picos de intensidade de campo do experimento O (verde).



Fonte: Elaborado pelo autor.

De modo geral verificou-se que as barras em azul foram capazes de melhor reproduzir o comportamento das barras em verde que as barras em vermelho. Isso significa que a curva de ajuste obtida para o conjunto de dados gerados pelo modelo AERMOD foi capaz de melhor ajustar as intensidades simuladas às observadas que as ajustadas a partir da curva obtida para as concentrações simuladas pelo modelo SYMOS'97. Esse fato já era esperado e demonstra que o método de ajuste utilizado faz com que parte dos erros da simulação seja absorvido pela curva de ajuste, fazendo com que o modelo gere resultados aparentemente mais próximos aos valores observados. Vale ressaltar que a maneira ideal de se obter os coeficientes da lei de Steven seria através de um experimento laboratorial em que os erros do modelo não exerceriam influência na obtenção da curva e o desempenho efetivo do modelo poderia ser avaliado.

ANEXO

1. LEIS DE CONSERVAÇÃO

Objetiva-se aqui, nesta seção, obter-se a dedução da equação de Navier-Stokes.

A dedução da equação de Navier-Stokes, a partir do balanço de momentum e da conservação da massa, pode ser vista em Chorin (1990), mas para maior clareza e completude deste trabalho apresenta-se aqui o desenvolvimento para obtenção da dedução físico-matemática dessa equação.

1.1 Conservação de Massa

Seja D uma região no espaço bi ou tridimensional preenchido com um fluido. Objetiva-se descrever o movimento de tal fluido.

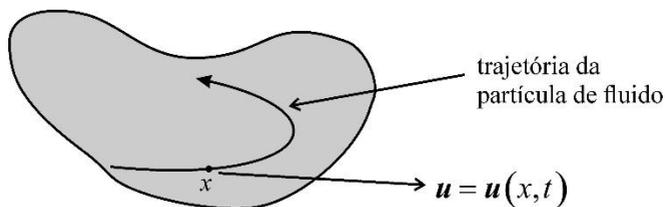
Seja $x \in D$ um ponto em D e considere uma partícula de fluido movendo-se através de x no tempo t (x está sendo pensado como um ponto fixo). Usa-se o negrito para distingui-lo de sua componente x .

$$\mathbf{x} = (x, y, z).$$

Imagine uma partícula (uma partícula de pó suspensa) no fluido, que percorra uma trajetória bem definida. Denote por $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t)$ a velocidade da partícula do fluido que está se movendo por x no tempo t . Assim, para cada tempo t fixado, \mathbf{u} é um campo vetorial em D , como na

Figura 1 \mathbf{u} é chamado de campo de velocidade (espacial) do fluido.

Figura 1: Trajetória do fluido de uma partícula.



Para cada tempo t , pode-se assumir que o fluido tem uma densidade de massa bem definida $\rho(x, t)$. Assim, se W é uma sub-região qualquer de D , a massa de fluido em W no tempo é dado por

$$m(W, t) = \int_W \rho(x, t) dV,$$

onde dV é o elemento de volume no plano ou no espaço.

No que segue, assume-se que as funções \mathbf{u} e ρ são suficientemente suaves para que as operações usuais do cálculo possam ser realizadas sobre elas.

A premissa de que ρ exista é um pressuposto do contínuo. Claramente, ela não é satisfeita se a estrutura molecular da matéria é tomada em conta. Mas, para a maioria dos fenômenos macroscópicos que ocorrem na natureza, crê-se que este pressuposto é extremamente razoável.

A derivação das equações que são obtidas é baseada em dois princípios básicos:

- I. Massa não é criada nem destruída;
- II. A taxa de variação de momentum de uma porção de fluido é igual à força aplicada nela (Segunda lei de Newton);

Para isto, seja W uma sub-região fixada de D (W não varia com o tempo). A taxa de variação de massa em W é

$$\frac{d}{dt}m(W,t) = \frac{d}{dt} \int_W \rho(x,t) dV = \int \frac{\partial \rho}{\partial t}(x,t) dV .$$

Seja ∂W a fronteira de W , assumida suave, e denota-se por \mathbf{n} a normal exterior unitária definida nas partes de ∂W ; e seja dA o elemento de área sobre ∂W . A taxa de fluxo de volume através de ∂W por unidade de área é $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ e a taxa de fluxo de massa por unidade de área é $\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ (ver Figura 2).

O princípio de conservação de massa pode ser mais precisamente estabelecido como: a taxa de crescimento de massa em W é igual à taxa com que a massa está atravessando ∂W na direção interna, isto é,

$$\frac{d}{dt} \int_W \rho dV = - \int_{\partial W} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA , \quad (1)$$

Esta expressão em (1) é a forma integral da lei de conservação de massa. Pelo teorema da divergência, essa afirmação é equivalente a

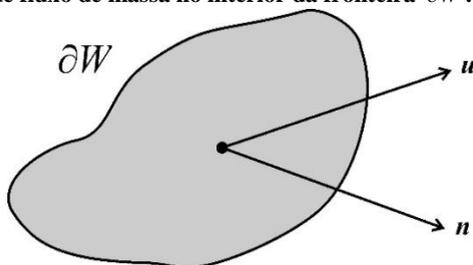
$$\int_W \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) \right] dV = 0 . \quad (2)$$

Visto que isto é satisfeito para qualquer região W , a expressão em (2) é equivalente a

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0} . \quad (3)$$

A equação em (3) é a forma diferencial da lei de conservação de massa, que também é conhecida como a equação da continuidade.

Figura 2: Taxa de fluxo de massa no interior da fronteira ∂W .



A taxa de fluxo de massa através de ∂W é:

$$\frac{d}{dt}(\text{massa atravessando } \partial W) = -\int_{\partial W} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dA.$$

Observação: Substituindo-se $\rho(x, t)$ por $C(x, t)$, no final, na equação da conservação de massa (3), obtém-se a equação da concentração com advecção pura.

1.2 Balanço de Momentum

Seja $\mathbf{x}(t) = (x(t), y(t), z(t))$ um caminho seguido por uma partícula de fluido, de modo que o campo de velocidade é dado por

$$\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}(x(t), y(t), z(t), t) = (\dot{x}(t), \dot{y}(t), \dot{z}(t))$$

isto é,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}(t), t) = \frac{d\mathbf{x}}{dt}(t).$$

Uma vez que a aceleração de uma partícula de fluido é dada por

$$\mathbf{a}(t) = \frac{d}{dt} \mathbf{u}(x(t), y(t), z(t), t),$$

então, pela regra da cadeia, obtém-se que

$$\mathbf{a}(t) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \cdot \dot{x} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial y} \cdot \dot{y} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \cdot \dot{z} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t},$$

e usando-se a notação

$$\mathbf{u}_x = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}, \quad \mathbf{u}_t = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \quad \dots, \text{ etc,}$$

com

$$\mathbf{u}(x, y, z, t) = (u(x, y, z, t), v(x, y, z, t), w(x, y, z, t)),$$

obtém-se

$$\mathbf{a}(t) = u\mathbf{u}_x + v\mathbf{u}_y + w\mathbf{u}_z + \mathbf{u}_t.$$

que pode também ser escrita como

$$\mathbf{a}(t) = \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u},$$

onde $\partial_t \mathbf{u} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$ é a aceleração local e $\mathbf{u} \cdot \nabla = u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}$ é a aceleração advectiva.

Chama-se de **derivada material** a derivada

$$\frac{D}{Dt} = \partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla,$$

que leva em conta o fato de que o fluido está se movendo e que a posição da partícula de fluido muda com o tempo.

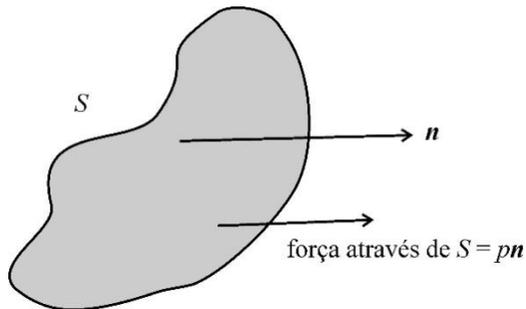
1.2.1 Fluido Ideal

Para qualquer movimento do fluido existe uma função $p(x, t)$ chamada de **pressão**, tal que se S é uma superfície de fluido com um dado vetor normal unitário \mathbf{n} , a força de tensão exercida ao longo da superfície S por unidade de área em $x \in S$ no instante t é $p(x, t)\mathbf{n}$, isto é,

$$\text{força através de } S \text{ por unidade de área} = p(x, t)\mathbf{n}.$$

Para um fluido ideal, pode-se observar que a força está na direção \mathbf{n} e que a força age ortogonalmente à superfície S , isto é, não existem forças tangenciais (ver Figura 3).

Figura 3: Força ortogonal à superfície S.



Se W é uma região no fluido em um instante particular de tempo t , a força total exercida sobre o fluido dentro de W por meio da tensão sobre sua fronteira é

$$S_{\partial W} = \{\text{força sobre } W\} = - \int_{\partial W} p \mathbf{n} dA,$$

onde o sinal é negativo visto que \mathbf{n} aponta para fora da superfície.

Agora se \mathbf{e} é um vetor constante qualquer fixado no espaço, o teorema da divergência fornece

$$\mathbf{e} \cdot S_{\partial W} = -\int_{\partial W} p \mathbf{e} \cdot \mathbf{n} dA = -\int_W \operatorname{div}(p \mathbf{e}) dV = -\int_W (\operatorname{grad} p) \cdot \mathbf{e} dV .$$

Assim,

$$S_{\partial W} = -\int_W \operatorname{grad} p dV .$$

Se $\mathbf{b}(x, t)$ denota uma força de corpo dada por unidade de massa, a força de corpo total é

$$\mathbf{B} = \int_W \rho \mathbf{b} dV ,$$

onde $\rho = \rho(x, t)$ é a densidade de massa do fluido. Assim, a força agindo sobre uma porção material de fluido por unidade de volume é

$$\text{força por unidade de volume} = -\operatorname{grad} p + \rho \mathbf{b} .$$

Logo, pela segunda lei de Newton (*força = massa \times aceleração*), obtém-se a forma diferencial da lei de conservação de momentum:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\operatorname{grad} p + \rho \mathbf{b} . \quad (\text{CM1})$$

Da equação de conservação de momentum em sua forma diferencial, usando a derivada material, tem-se

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla p + \rho \mathbf{b} ,$$

e usando-se a equação da continuidade que diz que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 ,$$

obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) = -\operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \mathbf{u} - \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla p + \rho \mathbf{b} .$$

Se \mathbf{e} é um vetor fixado qualquer no espaço, obtém-se que

$$\begin{aligned} \mathbf{e} \cdot \frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) &= -\operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \mathbf{u} \cdot \mathbf{e} - \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \cdot \mathbf{e} - (\nabla p) \cdot \mathbf{e} + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{e} = \\ &= -\operatorname{div}(p \mathbf{e} + \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{e})) + \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{e} , \end{aligned}$$

Portanto, se W é um volume fixado no espaço, a taxa de variação do momentum na direção \mathbf{e} em W é

$$\mathbf{e} \cdot \frac{d}{dt} \int_W \rho \mathbf{u} dV = -\int_{\partial W} [p \mathbf{e} + \rho \mathbf{u}(\mathbf{e} \cdot \mathbf{u})] \cdot \mathbf{n} dA + \int_W \rho \mathbf{b} \cdot \mathbf{e} dV ,$$

pelo teorema da divergência. Assim, a forma integral da conservação de momentum fica:

$$\frac{d}{dt} \int_W \rho \mathbf{u} dV = -\int_{\partial W} (p \mathbf{n} + \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})) dA + \int_W \rho \mathbf{b} dV . \quad (\text{CM2})$$

Agora, seja denotada por D a região na qual o fluido se move. Seja $x \in D$ e escreva-se $\varphi(x, t)$ para designar a trajetória seguida pela partícula que está no

ponto x no instante $t=0$. Pode-se assumir que φ seja suficientemente suave para que as manipulações seguintes sejam válidas e para t fixado, φ é uma aplicação invertível. Denote-se por φ_t a aplicação $x \mapsto \varphi(x, t)$, isto é, para t fixado, esta aplicação leva cada partícula do fluido de sua posição no instante $t=0$ para sua posição no instante t . φ é chamada de **aplicação de fluxo do fluido**. Observe-se que φ mapeia pontos não vetores. Agora, se W é uma região em D , então $\varphi_t(W) = W_t$ é o volume W movendo-se com o fluido (ver

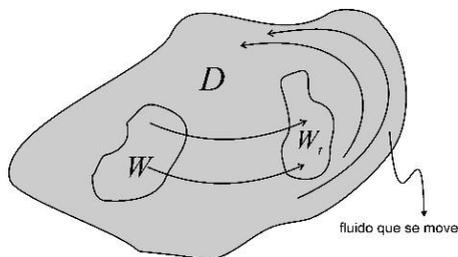
Figura 4).

A forma integral “primitiva” da conservação de momentum estabelece que

$$\frac{d}{dt} \int_{W_t} \rho \mathbf{u} dV = \int_{\partial W_t} \rho \mathbf{b} dV, \quad (\text{CM3})$$

isto é, a taxa de variação do momentum de uma porção de fluido que se move é igual à força total (tensões de superfície mais as forças de corpo) agindo sobre ela.

Figura 4: Movimento do fluido.



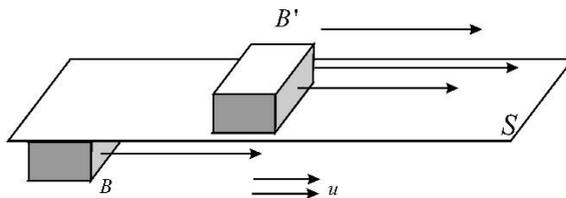
Essas duas formas de conservação de momentum (CM1) e (CM3) são equivalentes.

1.2.2 Fluido não ideal – A equação de Navier-Stokes

Seja S uma superfície de fluido. Considere-se que o campo velocidade u seja paralelo à superfície S , mas salta em magnitude ou subitamente ou rapidamente, quando atravessa S . Se as forças são todas normais a S , não haverá transferência de momentum entre o volume do fluido denotado por B e B' na

Figura 5. Entretanto, lembrando a teoria cinética da matéria, pode-se ver que isto é, de fato, irrazoável. Moléculas mais rápidas acima de S se difundirão através de S e transferirão momentum para o fluido abaixo de S e do mesmo modo moléculas mais lentas abaixo de S se difundirão através de S para frear o fluido acima de S . Para mudanças razoavelmente rápidas em velocidade sobre distâncias curtas, este efeito é importante.

Figura 5: Superfície de fluido S com dois volumes de fluido B e B'.



Agora, considere-se não mais um fluido ideal, mas um em que

$$\text{força sobre } S \text{ por unidade de área} = p(x,t)\mathbf{n} + \boldsymbol{\sigma}(x,t)\mathbf{n} \quad (4)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}$ é uma matriz, a respeito da qual algumas hipóteses serão feitas. A nova característica é que $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ não necessita ser paralelo a \mathbf{n} . A separação das forças em pressão e outras forças em (4) é algo ambíguo visto que $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ pode conter alguma componente paralela a \mathbf{n} .

Como antes, a segunda lei de Newton estabelece que a taxa de variação de uma quantidade qualquer de fluido W_i movendo-se é igual à força que age sobre ela (conservação do momentum):

$$\frac{d}{dt} \int_{W_i} \rho \mathbf{u} dV = - \int_{\partial W_i} (p\mathbf{n} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) dA$$

(compare com (CM3)).

Assim, vê-se que $\boldsymbol{\sigma}$ modifica o transporte do momentum através da fronteira de W_i . Escolher-se-á $\boldsymbol{\sigma}$ de modo que ela aproxime de maneira razoável o transporte de momentum pelo movimento molecular.

Pode-se legitimamente perguntar porque a força (4) que age sobre S deveria ser uma função linear de \mathbf{n} . De fato, se simplesmente se assumisse que ela é uma função contínua arbitrária de \mathbf{n} , então usando-se a conservação de momentum, poder-se-ia demonstrar que ela é linear em \mathbf{n} . Esse resultado é chamado de Teorema de Cauchy.

Faz-se as seguintes hipóteses sobre o tensor $\boldsymbol{\sigma}$:

1. $\boldsymbol{\sigma}$ depende apenas do gradiente de velocidade $\nabla \mathbf{u}$ e é proporcional a ele, isto é, $\boldsymbol{\sigma}$ está relacionado a $\nabla \mathbf{u}$ por alguma transformação linear;
2. $\boldsymbol{\sigma}$ é invariante sob rotação e translação de corpo rígido, isto é, se U for uma matriz ortogonal, então

$$\boldsymbol{\sigma}(U \cdot \boldsymbol{\sigma} u \cdot U^{-1}) = U \cdot \boldsymbol{\sigma}(\nabla u) \cdot U^{-1}.$$

Isto é razoável, visto que, quando um fluido atravessa um corpo rígido em rotação, não deveria haver difusão de momentum.

3. $\boldsymbol{\sigma}$ é simétrico.

De fato, dessas 3 hipóteses pode-se concluir que as componentes σ_i são funções lineares que são simétricas da forma:

$$\sigma_i = \lambda(d_1 + d_2 + d_3) + 2\mu d_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

onde σ_i são os autovalores de $\boldsymbol{\sigma}$ e d_i são os de D . Isto define as constantes λ e μ . Lembrando que $d_1 + d_2 + d_3 = \text{div } \mathbf{u}$, pode-se usar a hipótese (2) para transformar σ_i de volta à base usual e deduzir que

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda(\text{div } \mathbf{u})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (5)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade.

Pode-se reescrever isto colocando-se todo traço em um termo:

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\mu \left[\mathbf{D} - \frac{1}{3}(\text{div } \mathbf{u})\mathbf{I} \right] + \xi(\text{div } \mathbf{u})\mathbf{I},$$

onde μ é o primeiro coeficiente da viscosidade e $\xi = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ é o segundo coeficiente da viscosidade.

Se for aplicado o teorema do transporte e o teorema da divergência como feito em conexão com (CM3), a conservação de momentum resulta na equação de **Navier-Stokes**:

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + (\lambda + \mu)\nabla(\text{div } \mathbf{u}) + \mu\Delta\mathbf{u} \quad (6)$$

onde $\Delta\mathbf{u} = \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \mathbf{u}$ é o Laplaciano de \mathbf{u} , e ainda, usando-se a derivada material,

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p + (\lambda + \mu)\nabla(\text{div } \mathbf{u}) + \mu\Delta\mathbf{u}.$$

No caso de escoamento homogêneo incompressível em que $\rho = \rho_0 = \text{constante}$, o conjunto completo das equações resulta nas equações de **Navier-Stokes** para fluxo incompressível:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} &= -\text{grad } p' + \nu\Delta\mathbf{u} \\ \text{div } \mathbf{u} &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

onde $\nu = \frac{\mu}{\rho_0}$ é o coeficiente da viscosidade cinemática, e onde $p' = \frac{p}{\rho_0}$.

2. MODELAGEM FÍSICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA ATMOSFERA

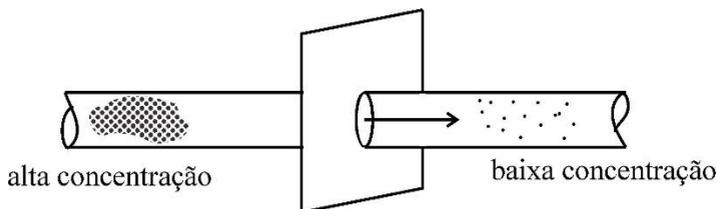
É importante observar-se aqui, que boa parte do material apresentado nesta seção é oriundo de notas de aula de um curso do Professor Elói de Melo, ministrado no curso de Pós-Graduação da Engenharia Ambiental da UFSC, em 2011. Inicia-se com o conceito de concentração.

A concentração de uma substância é o limite da razão da quantidade dessa substância presente em um volume infinitesimal ΔV , quando ΔV tende a zero, isto é,

$$c = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta M}{\Delta V},$$

onde ΔM é a quantidade infinitesimal de substância presente em ΔV , no instante t e $c = c(x, y, z, t)$ é o campo de concentração da substância. A formulação da modelagem matemática para a concentração de uma substância foi feita pelo fisiologista e matemático alemão Adolph Fick em 1855, em analogia à formulação matemática feita pelo matemático Fourier para difusão do calor. Para isso, considere-se, então, a seguinte situação em um tubo transparente e longo preenchido com um fluido a princípio estático. Corante é introduzido nesse tubo, colocando-se em uma parte corante em alta concentração e, em outra parte, corante em baixa concentração (Figura 6).

Figura 6: Difusão de um corante ao longo de uma seção transversal.



$$q_D = \text{Fluxo Difusivo (Fluxo de Massa de Corante)}$$

A ideia de Fick foi considerar o fluxo de massa do corante como sendo proporcional ao gradiente de concentração desse corante, isto é,

$$q_D = -\lambda \cdot \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (8)$$

onde q_D é o fluxo de massa do corante (fluxo difusivo), c é a concentração do corante e λ é o coeficiente de difusão molecular, na unidade de $\left[\frac{L^2}{T} \right]$. O sinal

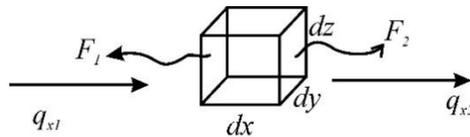
“-” decorre em função de que o fluxo vai da alta concentração para a baixa concentração. A difusão molecular é determinada pelo movimento aleatório das moléculas do fluido que promove o fluxo de moléculas do corante no sentido de reduzir o gradiente de concentração do mesmo.

Por agora, suponha que não haja momento de fluido, ou seja, que o mesmo seja estacionário.

2.1 Equação de conservação de massa

Considere-se, inicialmente, o caso unidimensional. Para isto, seja um cubo elementar infinitesimal fixo num determinado ponto de um fluido em escoamento 1-D na direção x ; o volume desse cubo é dado por $\Delta V = dx dy dz$ (Figura 7).

Figura 7: Escoamento unidimensional em um cubo.



F_1 e F_2 - faces do cubo

O princípio físico da “Lei de conservação de massa” diz que a massa se conserva, isto é, a massa do corante q_{x2} que saiu é igual à massa do corante q_{x1} que entrou mais a massa do corante dq_x que ficou acumulada no cubo. Assim,

$$q_{x2} = q_{x1} + dq_x = q_{x1} + \frac{\partial q_x(x,t)}{\partial x} dx, \quad (9)$$

ou ainda,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{taxa de variação de} \\ \text{massa dentro do cubo} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{balanço dos fluxos} \\ \text{de massa através do cubo} \end{array} \right\} = 0 \quad (10)$$

Considere-se que $m = c \cdot \Delta V$, onde m é a massa de corante e ΔV é o volume constante no cubo, tem-se que a taxa de variação de massa dentro do cubo é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(m(x,t)) = \frac{\partial}{\partial t}(c(x,t)\Delta V) = \frac{\partial c}{\partial t} \Delta V. \quad (11)$$

Agora para o balanço dos fluxos de massa através do cubo, usando-se (9) tem-se que:

$$\text{BF} = [-q_{x1} + q_{x2}] = \left[-q_{x1} + \left(q_{x1} + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx \right) \right] dydz, \quad (12)$$

onde $dydz$ é a área da face 1 e 2 do cubo infinitesimal. Na expressão acima, é utilizada a seguinte convenção de sinal:

Utiliza-se o sinal (+), quando q e n estão na mesma direção, onde n é o vetor normal à superfície ∂W ; e utiliza-se o sinal (-), quando q e n estão em direções contrárias.

Assim,

$$\text{BF} = \frac{\partial q_x}{\partial x} dx dy dz = \frac{\partial q_x}{\partial x} \Delta V. \quad (13)$$

Portanto, após dividir-se por ΔV , a equação de conservação da massa unidimensional (10) é dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} = 0. \quad (14)$$

No caso de um fluxo de massa de um poluente tridimensional $q = (q_x, q_y, q_z)$, com um raciocínio análogo para as direções y e z , obtém-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = 0, \quad (15)$$

ou ainda,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div } \mathbf{q} = 0 \quad (16)$$

Em geral, o fluxo de massa do poluente possui duas componentes, isto é,

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_A + \mathbf{q}_D$$

onde q_A é o fluxo advectivo e q_D é o fluxo difusivo. Quando o fluido é estacionário não há a presença de fluxo advectivo e $q_A = 0$. Logo, neste caso, conforme (8)

$$q = q_D = -\lambda \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (17)$$

pela lei de Fick. Agora, substituindo (17) na equação da conservação de massa (14), obtém-se

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-\lambda \frac{\partial c}{\partial x} \right) = 0,$$

e uma vez que \mathcal{D} é constante, obtém-se a equação da difusão:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (18)$$

Essa equação governa a maneira como a concentração de corante $c = c(x, t)$ deve variar no interior do tubo ao longo do tempo. Esta equação deverá ser acompanhada de condições iniciais, para $t = 0$, e de contorno, para $x = \pm\infty$, se um tubo infinitamente longo. Se o tubo é semi-infinito, isto é, $x \in (0, +\infty)$, usa-se a Transformada de Laplace para a obtenção da solução da equação da difusão, se o tubo é infinitamente longo, isto é, $x \in (-\infty, +\infty)$, usa-se a Transformada de Fourier.

2.2 O problema da equação de difusão em um tubo infinito: problema da evolução unidimensional

A equação de difusão é dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (\lambda = \alpha^2) \quad (19)$$

Essa equação descreve a maneira como a concentração $c(x, t)$ deve variar no interior do tubo ao longo do tempo $t > 0$. Para descobrir-se quem é $c(x, t)$ tem-se que resolver a equação diferencial parcial (19), sujeita às condições inicial e de contorno do problema em questão. No caso do tubo infinito, a concentração $c(x, t)$ deve satisfazer às condições:

$$(i) \quad c(x, 0) = M\delta(x) \quad (20.a)$$

$$(ii) \quad c(\pm\infty, t) = 0, \quad (20.b)$$

onde M é a massa de corante introduzida no tempo inicial $t = 0$, na posição $x = 0$, e $\delta(x)$ é a função delta de Dirac, definida por

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x = 0 \\ 0, & \text{se } x \neq 0 \end{cases}.$$

A função delta de Dirac é uma distribuição de suporte compacto que pode ser aplicada em uma função contínua. Embora o tubo seja infinito, isto não impede a difusão do corante na direção x , contudo para x muito grande, a concentração $c(x, t)$ será zero.

A quantidade total de massa de corante é constante para qualquer tempo t e vale M . Assim,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} c(x, t) dx = M. \quad (20.c)$$

Considere-se então o seguinte problema:

$$\begin{cases} c \in C^2(\mathbb{R} \times (0, +\infty)) \cap C(\mathbb{R} \times [0, +\infty)), \text{ limitado} \\ c_t = c_{xx}, (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ c(x, 0) = f(x), x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (21)$$

com $f \in C(-\infty, +\infty)$ e limitado.

Tomamos na equação da difusão (19), $\alpha = 1$, no entanto isso não constitui restrição alguma, pois a mudança de variável:

$$\begin{cases} y = \frac{x}{\alpha} \\ \tilde{c}(y, t) = c(x, t), \end{cases}$$

transforma a equação (19) na equação

$$\tilde{c}_t = \tilde{c}_{yy}$$

Será mostrado agora que a solução de (21) tem a seguinte forma:

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) K(x - y, t) dy = (f * K_t)(x), \forall x \in \mathbb{R}, t > 0, \quad (22)$$

onde

$$K(x, t) = K_t(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right), \forall x \in \mathbb{R}, t > 0, \quad (23)$$

é o núcleo da concentração $c(x, t)$.

Para isto proceder-se-á formalmente no intuito de se achar um candidato à solução para o problema (21). Assim, aplicando-se a Transformada de Fourier na variável x , obtemos

$$\begin{cases} \partial_t \hat{c} = -\xi^2 \hat{c}, & t > 0 \\ \hat{c}(\xi, 0) = \hat{f}(\xi). \end{cases} \quad (24)$$

Então, para cada $\xi \in \mathbb{R}$ fixado, o problema de valor inicial (24) é uma equação diferencial ordinária linear de primeira ordem na variável t , cuja solução é única. Usando-se o fator integrante $e^{\xi^2 t}$, obtém-se

$$\begin{aligned} \partial_t \left(e^{\xi^2 t} \hat{c} \right) &= 0 \Rightarrow e^{\xi^2 t} \hat{c}(\xi, t) = \hat{c}(\xi, 0) \Rightarrow \\ e^{\xi^2 t} \hat{c}(\xi, t) &= \hat{f}(\xi) \Rightarrow \hat{c}(\xi, t) = e^{-\xi^2 t} \hat{f}(\xi). \end{aligned}$$

Calculando-se formalmente a transformada inversa, obtém-se

$$\begin{aligned} c(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{c}(\xi, t) e^{i\xi x} d\xi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi x} e^{-\xi^2 t} \hat{f}(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\xi x} e^{-\xi^2 t} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) e^{-i\xi y} dy \right) d\xi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2 t} e^{i\xi(x-y)} d\xi dy. \end{aligned} \quad (25)$$

Para o cálculo dessa integral, necessita-se do seguinte lema:

Lema 1

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2 t} d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{t}}, \quad \forall t > 0; \quad (i)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2 t} e^{i\xi x} d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{t}} e^{-x^2/4t}, \quad \forall x \in \mathbb{R}, t > 0. \quad (ii)$$

Demonstração: ver Iorio (1991), p. 190.

Assim, substituindo-se o valor da integral do lema 1(ii), na fórmula (25), obtemos que

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4t}\right) dy, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0, \quad (26)$$

A fórmula (26) fornece, portanto, uma solução, que é única, para a equação de difusão (21). Observe que, para $t > 0$, como f é uma função contínua e limitada, a integral em (26) converge. A função

$$K(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (27)$$

é chamada de **núcleo da concentração** para o problema (21), e a equação (27) pode ser reescrita como:

$$c(x, t) = f(x) * K(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (28)$$

onde $f(x) * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \cdot g(x-y) dy$.

Agora, voltando ao problema (21), impondo-se, formalmente, as condições (20.a) e (20.b), uma vez que a condição inicial dada em (20.a) não é uma função contínua, tem-se que a fórmula (26) fica

$$c(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y) \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4t}\right) dy. \quad (29)$$

Aplicando-se a propriedade de filtragem à distribuição delta de Dirac, tem-se:

$$\langle \delta(y), \varphi(y) \rangle_{\mathcal{D}', \mathcal{D}} = \varphi(y) \Big|_{y=0} = \varphi(0), \quad \forall \varphi \in C(\mathbb{R}).$$

Observe que a integral com a função delta de Dirac é um abuso de notação e que esta pode ser entendida, de uma maneira mais geral, como um funcional, no caso a função delta aplicada a uma função contínua. Assim,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y) \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4t}\right) dt &= \left\langle \delta(y), \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4t}\right) \right\rangle = \\ &= \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4t}\right) \Big|_{y=0} = \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right). \end{aligned}$$

Utilizando-se o desenvolvimento acima na expressão (29), resulta que:

$$C(x, t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0. \quad (30)$$

Voltando à mudança de variável original, substituindo-se x por $\frac{x}{\alpha} = \frac{x}{\sqrt{\lambda}}$, obtém-se:

$$C(x,t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t > 0, \quad (31)$$

que é o que deseja-se obter.

Observe-se que os resultados apresentados acima são também válidos em \mathbb{R}^n . Nesse caso, o núcleo da concentração é

$$K(x,t) = (4\pi t)^{-n/2} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4t}\right), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad t > 0,$$

e a solução do problema:

$$\begin{cases} c \in C^2(\mathbb{R}^n \times (0, +\infty)) \cap C(\mathbb{R}^n \times [0, +\infty)), \text{ limitada} \\ c_t = \Delta c, \text{ em } \mathbb{R}^n \times (0, +\infty) \\ c(x, 0) = f(x), \end{cases}$$

onde $f \in C(\mathbb{R})$ é uma função conhecida e limitada, é dada por:

$$c(x,t) = \int_{\mathbb{R}^n} f(y) K(x-y,t) dy, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad t > 0.$$

3. SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

Objetiva-se nesta seção obter-se a formulação matemática da equação de advecção-difusão, como também a sua solução.

A explanação a ser feita pode ser encontrada em Stockie (2011), porém, para maior clareza deste trabalho, será apresentado aqui tal desenvolvimento.

3.1 Dedução matemática da equação de advecção-difusão

A lei de conservação de massa para a concentração C com um termo fonte pode ser expressa na forma diferencial como

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = S, \quad (32)$$

onde $S(\vec{x}, t)$ [kg/m^3s] é um termo fonte ou sorvedouro e a função vetorial $J(\vec{x}, t)$ representa o fluxo de massa [kg/m^2s] do próprio poluente para os efeitos combinados de difusão e advecção.

A difusão atmosférica pode ser descrita através da Lei de Fick, que estabelece que o fluxo difuso é proporcional ao gradiente da concentração, ou seja, $\vec{J}_D = -\Lambda \nabla C$. O sinal negativo assegura que o (fluxo) poluente flui da região de alta concentração para a região de baixa concentração e o coeficiente de difusão $\Lambda(\vec{x}) = \text{diag}(\Lambda_x, \Lambda_y, \Lambda_z)$ [m^2/s] é a matriz diagonal cujas entradas são as difusões turbulentas que em geral são funções da posição. A segunda contribuição para o fluxo é devido à advecção linear, provocada simplesmente pelo vento, que pode ser expressa como $\vec{J}_A = C\vec{u}$, onde \vec{u} [m/s] é a velocidade do vento. Adicionando-se estas duas contribuições, obtemos o fluxo total $\vec{J} = \vec{J}_A + \vec{J}_D = C\vec{u} - \Lambda \nabla C$, que, depois da substituição na equação de conservação de massa (32), resulta na equação tridimensional de advecção-difusão

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C\vec{u}) = \nabla \cdot (\Lambda \nabla C) + S, \quad (33)$$

onde $S(\vec{x}) = Q\delta(x) \cdot \delta(z-H)$, e $\delta(\cdot)$ é a função delta de Dirac. O poluente é emitido a uma taxa constante Q de uma fonte pontual única $\vec{x} = (0, 0, H)$, localizada na altura H acima da superfície da Terra. Conforme é descrito, H é a altura efetiva, $H = h + \delta h$, que é a soma da altura da chaminé e a “largura” da pluma δh . Em seguida, far-se-á algumas hipóteses simplificadoras que possibilitarão obter uma forma fechada para uma solução analítica de (33):

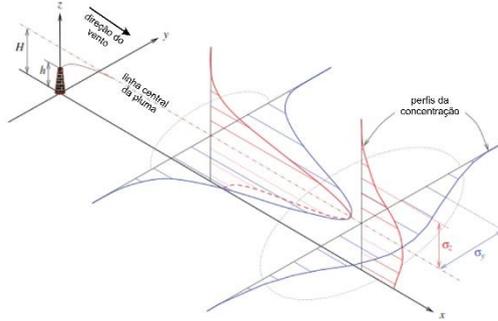
A.1. O poluente é emitido a uma taxa constante Q [kg/s] de uma fonte pontual única $\vec{x} = (0, 0, H)$ localizada na altura H acima da superfície da Terra, como representado na Figura 8. O termo fonte pode ser escrito como

$$S(\vec{x}) = Q\delta(x) \cdot \delta(y) \cdot \delta(z-H), \quad (34)$$

onde $\delta(\cdot)$ é a função delta de Dirac. Note que as unidades da função delta são [m^{-1}]. Para (da chaminé) configuração representada na Figura 8 a altura é

realmente uma **altura efetiva** $H = h + \delta h$, q é a soma da altura real da chaminé, h , e da elevação da pluma δh que surge dos efeitos de flutuação.

Figura 8: Concentração em uma posição x nas direções y e z .



A.2. A velocidade do vento é constante e alinhada com o eixo- x positivo de modo que $\vec{u} = (u, 0, 0)$ para alguma constante $u \geq 0$.

A.3. A solução é estacionária, que é razoável se a velocidade do vento e outros parâmetros são independentes do tempo e a escala de tempo de interesse é suficientemente grande.

A.4. As difusividades turbulentas são funções da distância x a sotavento somente, e a função é isotrópica de modo que

$$\Lambda_x(x) = \Lambda_y(x) = \Lambda_z(x) =: \Lambda(x).$$

A.5. A velocidade do vento é suficientemente alta de modo que a difusão na direção- x é muito menor que a advecção; então o termo $K_x \partial_x^2 C$ pode ser desprezado.

A.6. Variações na topografia são desprezíveis de modo que a superfície da Terra pode ser tomada como o plano $z = 0$.

A.7. O poluente não penetra no solo.

Fazendo-se uso das hipóteses A.1 – A.6. (33) se reduz a

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \Lambda \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \Lambda \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + Q \delta(x) \cdot \delta(y) \cdot \delta(z - H), \quad (35)$$

com as condições de fronteira, para $x, z \in [0, \infty)$, $y \in (-\infty, \infty)$

$$C(0, y, z) = 0, C(\infty, y, z) = 0, C(x, \pm\infty, z) = 0, C(x, y, \infty) = 0, \quad (36)$$

mais a condição de fronteira para z

$$K \frac{\partial C}{\partial z}(x, y, 0) = 0. \quad (37)$$

Solução da equação de advecção-difusão: problema estacionário tridimensional

Uma formulação equivalente para o problema ((35) – (37)) pode ser encontrada eliminando-se o termo fonte da EDP e, em vez disso, introduzindo-se esse termo juntamente com a função delta na condição de fronteira:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \Lambda \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \Lambda \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad (38)$$

$$C(0, y, z) = \frac{Q}{u} \delta(y) \cdot \delta(z - H) \quad (39)$$

$$C(\infty, y, z) = 0, C(x, \pm\infty, z) = 0, C(x, y, +\infty) = 0 \quad (40)$$

$$\Lambda \frac{\partial C}{\partial z}(x, y, 0) = 0. \quad (41)$$

Esse novo problema pode ser resolvido aplicando-se a transformada de Laplace duas vezes, após o mesmo ser desdobrado em dois problemas. Aplica-se então a transformada de Laplace em x , obtendo-se uma EDO em y , e depois aplica-se a transformada uma segunda vez mas agora na variável y . A solução encontrada para essa equação é dada em termos de uma função gaussiana.

Para isso, é prática comum substituir-se a variável x por uma nova variável independente r , qual seja:

$$r = \frac{1}{u} \int_0^x \Lambda(\xi) d\xi, \quad r = r(x), \quad (42)$$

com unidade em $[m^2]$. Essa mudança de variável elimina os coeficientes Λ na equação (38), levando ao seguinte problema a coeficientes constantes para $c(r, y, z) := C(x, y, z)$:

$$\frac{\partial c}{\partial r} = \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}. \quad (43)$$

As condições de contorno para c são idênticas àquelas para C em (40) e (41), exceto que a variável x agora é substituída pela variável r .

Aplica-se, em seguida, o método de separação de variáveis para (43), assumindo que a dependência da solução de y e z pode ser separada de acordo com

$$c(r, y, z) = \frac{Q}{u} a(r, y) b(r, z). \quad (44)$$

Então obtém-se dois problemas a uma dimensão reduzida que tem a forma de uma equação de difusão bidimensional:

$$\left[\begin{array}{l} \frac{\partial a}{\partial r} = \frac{\partial^2 a}{\partial y^2}, \text{ para } 0 \leq r < \infty \text{ e } -\infty < y < \infty, \\ a(0, y) = \delta(y), a(\infty, y) = 0, a(r, \pm\infty) = 0, \end{array} \right. \quad (45)$$

$$\left[\begin{array}{l} a(0, y) = \delta(y), a(\infty, y) = 0, a(r, \pm\infty) = 0, \\ \frac{\partial a}{\partial r} = \frac{\partial^2 a}{\partial y^2}, \text{ para } 0 \leq r < \infty \text{ e } -\infty < y < \infty, \end{array} \right. \quad (46)$$

e

$$\left[\begin{array}{l} \frac{\partial b}{\partial r} = \frac{\partial^2 b}{\partial z^2}, \text{ para } 0 \leq r < \infty \text{ e } 0 < z < \infty, \\ b(0, z) = \delta(z - H), b(\infty, z) = 0, b(r, \infty) = 0, \frac{\partial b}{\partial z}(r, 0) = 0. \end{array} \right. \quad (47)$$

$$\left[\begin{array}{l} \frac{\partial b}{\partial r} = \frac{\partial^2 b}{\partial z^2}, \text{ para } 0 \leq r < \infty \text{ e } 0 < z < \infty, \\ b(0, z) = \delta(z - H), b(\infty, z) = 0, b(r, \infty) = 0, \frac{\partial b}{\partial z}(r, 0) = 0. \end{array} \right. \quad (48)$$

Em ambos os problemas, a variável r se comporta como a variável tempo, de modo que as condições de fronteira em $r = 0$ (que contém a função delta) agem como condições iniciais para as respectivas equações de difusão.

Solução via transformada de Laplace

Aplicando-se a transformada de Laplace na EDP, na variável r , obtém-se

$$s\hat{a} - a(0, y) = \frac{\partial^2 \hat{a}}{\partial y^2},$$

onde $\hat{a}(s, y) := \mathcal{L}_r \{a(r, y)\} = \int_0^\infty e^{-sr} a(r, y) dr$ e s é a variável da transformada. Aplicando-se a condição de fronteira com a fonte (46), obtém-se a seguinte equação diferencial ordinária linear para \hat{a} :

$$\frac{\partial^2 \hat{a}}{\partial y^2} - s\hat{a} = -\delta(y).$$

Em seguida, toma-se a transformada de Laplace novamente, mas agora na variável y ,

$$\sigma^2 \hat{a} - \sigma \hat{a}(s, 0) - \frac{\partial \hat{a}}{\partial y}(s, 0) - s\hat{a} = -1,$$

onde $\hat{a}(s, \sigma) := \mathcal{L}_y \{\hat{a}(s, y)\} = \int_0^\infty e^{-\sigma y} \hat{a}(s, y) dy$ e σ é a variável da transformada.

Por um momento, restringir-se-á os valores de y a $0 \leq y < \infty$, mas será visto rapidamente que a simetria do problema permite que a solução seja estendida sobre toda a reta $-\infty < y < \infty$. Essa última equação pode então ser resolvida, para obter-se:

$$\hat{a}(s, \sigma) = \frac{\sigma c_1 + c_2}{\sigma^2 - s},$$

onde tem-se definido que $c_1 = \hat{a}(s, 0)$ e $c_2 = \partial_y \hat{a}(s, 0) - 1$. Então, aplica-se a transformada inversa em σ para obter-se

$$\begin{aligned} \hat{a}(s, y) &= c_1 \cosh(y\sqrt{s}) - \frac{c_2}{\sqrt{s}} \operatorname{sen} h(\sqrt{s}y) \\ &= \frac{c_1}{2} (e^{\sqrt{s}y} + e^{-\sqrt{s}y}) - \frac{c_2}{2} \frac{1}{\sqrt{s}} (e^{\sqrt{s}y} - e^{-\sqrt{s}y}). \end{aligned}$$

A fim de que $\hat{a} \rightarrow 0$ quando $y \rightarrow \infty$, é necessário que $c_1 = \frac{c_2}{\sqrt{s}}$, de modo

que a fórmula acima para \hat{a} se reduz a $\hat{a}(s, y) = \frac{c_2}{\sqrt{s}} e^{-\sqrt{s}y}$.

Admitindo-se por um momento que c_2 seja independente de s , pode-se aplicar a transformada inversa em s para obter-se

$$a(r, y) = \frac{c_2}{\sqrt{\pi r}} \exp\left(\frac{-y^2}{4r}\right).$$

Agora, aplicando-se a identidade da função delta

$$\delta(y) = \lim_{r \rightarrow 0} \exp\left(\frac{-y^2}{4r}\right) / \sqrt{4\pi r},$$

encontra-se que $c_2 = \frac{1}{2}$ é de fato uma constante e que

$$a(r, y) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r}} e^{-y^2/4r}. \quad (49)$$

Tem-se nos restringido até agora ao intervalo $0 \leq y < \infty$ a fim de aplicar-se a transformada de Laplace. Entretanto, o problema original, como estabelecido em (46), claramente tem uma simetria em relação a $y = 0$, e visto que a solução (49) é também uma função de y , então é possível estender-se simplesmente o domínio de validade da função $a(r, y)$ para $y \in (-\infty, \infty)$.

Agora retornando-se para a solução de (47) para $b(r, z)$ e aplicando-se a transformada de Laplace na variável r na EDP, obtém-se

$$\frac{\partial^2 \hat{b}}{\partial z^2} - s\hat{b} = -\delta(z - H),$$

onde $b(s, z) := \mathcal{L}_r \{b(r, z)\}$. Tomando-se a transformada de Laplace em z e definindo-se $\hat{\hat{b}}(s, \sigma) := \mathcal{L}_z \{\hat{b}(s, z)\}$, encontra-se que

$$\sigma^2 \hat{\hat{b}} - \sigma \hat{\hat{b}}(s, 0) - \frac{\partial \hat{\hat{b}}}{\partial z}(s, 0) - s\hat{\hat{b}} = -e^{-\sigma H}.$$

Após aplicar-se a transformada à condição de fronteira de Neumann $\partial_z \hat{b}(s, 0) = 0$, pode-se resolver a equação acima obtendo-se

$$\hat{\hat{b}}(s, \sigma) = \frac{\sigma \hat{\hat{b}}(s, 0) - e^{-\sigma H}}{\sigma^2 - s}$$

e então aplicar-se a transformada inversa em σ para obter-se

$$\hat{b}(s, z) = \hat{\hat{b}}(s, 0) \cosh(\sqrt{s}z) - \frac{1}{\sqrt{s}} \operatorname{sen} h(\sqrt{s}(z - H)).$$

Então, impõe-se a condição que $\hat{b} \rightarrow 0$ quando $z \rightarrow \infty$, o que significa que $\hat{\hat{b}}(s, 0) = \frac{\exp(-\sqrt{s}H)}{\sqrt{s}}$ e, portanto,

$$\hat{b}(s, z) = \frac{1}{2\sqrt{s}} \left(e^{-\sqrt{s}(z-H)} + e^{-\sqrt{s}(z+H)} \right).$$

Finalmente, aplicando-se a transformada inversa em s resulta que

$$b(r, z) = \frac{1}{\sqrt{4\pi r}} \left(e^{-(z-H)^2/4r} + e^{-(z+H)^2/4r} \right). \quad (50)$$

A concentração do poluente pode agora ser determinada, substituindo-se (49) e (50) na expressão (44). Assim,

$$c(r, y, z) = \frac{Q}{4\pi ur} \exp\left(\frac{-y^2}{4r}\right) \left[e^{-(z-H)^2/4r} + e^{-(z+H)^2/4r} \right]. \quad (51)$$

Essa expressão para a concentração c é comumente referida como a solução gaussiana para a equação de advecção-difusão, devido ao fato de exponencial, que depende de ambas as variáveis y e z , ser similar àquela de uma função do tipo gaussiana. Menciona-se, em conclusão, que expressões idênticas para a e b podem ser encontradas usando-se outros procedimentos baseados em séries infinitas e transformada de Fourier, como também métodos de similaridade. Todos esses métodos são procedimentos interessantes no uso de alternativas técnicas para obtenção de soluções de EDP.

Outro caminho para a obtenção da solução da equação de advecção-difusão é através da utilização de funções de Green devidas ao matemático George Green. Para maiores detalhes ver as referências [2], [3], [5], [6] e [8].

REFERÊNCIAS

- [1] CHORIN, A. J.. Marsden, J. E.. **A mathematical introduction to fluid mechanics**. Springer Verlag. New York. 1990.
- [2] DUFFY, D. G.. **Green's functions with applications**. Chapman & Hall/CRC. Boca Raton. FL. 2001.
- [3] CARSLAW, H. S., JAEGER J. C.. **Conduction of heat in solids**. Clarendon Press. Oxford. 1959. Chapter 4.
- [4] IORIO, V.. **EDP**, um curso de graduação. Instituto de Matemática Pura e Aplicada. CNPQ. Coleção Matemática Universitária. Rio de Janeiro. 1991.
- [5] CRANK, J.. **The mathematics of diffusion**. 2nd ed.. Oxford University Press. Oxford. 1975.
- [6] HABERMAN, R.. **Applied partial differential equations with Fourier series and boundary value problems**. Pearson Prentice-Hall. Upper Saddle River. NJ. 2004.

- [7] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M.. **Fluid mechanics**. Pergamon, 1968.
- [8] MATTHEIJ, R. M. M., RIENSTRA, S. W.. **Ten thije boonkkamp. partial differential equations**: Modeling, Analysis, Computation. SIAM Monogr. Math. Model. Comput. 10. SIAM. Philadelphia. 2005.
- [9] STOCKIE, J. M.; **The mathematics of atmospheric dispersion modeling**. Siam Review. vol. 53. n° 2. pp. 349-372. 2011.
- [10] MELO, E.. **Notas de Aula**. Curso de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental. UFSC. Florianópolis. 2011.