

Leonardo Hoinaski

***PARAMETRIZAÇÃO DE COEFICIENTES DE DISPERSÃO
LATERAL EM MODELOS DE QUALIDADE DO AR PARA
PREVISÕES EM TEMPOS DE MÉDIA CURTOS.***

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Ambiental.

Orientador: Prof. Henrique de Melo Lisboa, Dr.

Co-orientador: Prof. Davide Franco, Dr.

Florianópolis-SC
2015

FICHA CATALOGRÁFICA

HOINASKI, Leonardo

Parametrização de coeficientes de dispersão lateral em modelos de qualidade do ar para previsões em tempos de média curtos. 141p.

AERMOD, turbulência, Round Hill II e Uttenweiller.

Tese de Doutorado – Universidade Federal de Santa Catarina – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental – Florianópolis – SC – Maio, 2015.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

HOINASKI, Leonardo. Parametrização de coeficientes de dispersão lateral em modelos de qualidade do ar para previsões em tempos de média curtos. 2015. 141p. Tese de Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2015. Orientador: Dr. Henrique de Melo Lisboa

Leonardo Hoinaski

***PARAMETRIZAÇÃO DE COEFICIENTES DE DISPERSÃO
LATERAL EM MODELOS DE QUALIDADE DO AR PARA
PREVISÕES EM TEMPOS DE MÉDIA CURTOS.***

Tese aprovada como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor
no programa de pós-graduação em Engenharia Ambiental na
Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC.

Florianópolis, Maio de 2015.

Prof^o Dr. William Gerson Matias
Coordenador do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental

Prof^o Dr. Henrique de Melo Lisboa (orientador)

Prof^o Dr. Davide Franco (Co-orientador)

Banca examinadora:

Prof^o Dr. Luiz Claudio Gomes
Pimentel
(UFRJ)

Prof^o Dr. Jane Meri Santos
(UFES)

Prof^o Dr. Paulo Belli Filho
(UFSC)

Prof^o Dr. Catia Regina Silva de
Carvalho Pinto
(UFSC)

Prof^o Dr. Reinaldo Haas
(UFSC)

RESUMO

A modelagem de dispersão de poluentes na atmosfera pode ser considerado como um importante instrumento de decisão em avaliações do impacto ambiental de atividades antrópicas sobre o meio ambiente e suas populações. No cenário atual, o AERMOD é o modelo de dispersão recomendado pela agência de proteção ambiental dos Estados Unidos da América (US EPA) para realizar avaliações de impacto em distâncias menores que 50 km da fonte de emissão. Apesar de que o nível de sofisticação dos modelos tem se elevado, é conhecido que os mesmos ainda são ineficientes quando é necessário prever picos de concentrações em eventos de curta duração temporal. O ponto crítico na estimativa das concentrações por modelos analíticos é a determinação dos coeficientes de dispersão lateral e vertical, que representam o grau de espalhamento dos poluentes em torno do eixo central da pluma. No AERMOD, por exemplo, os coeficientes de dispersão foram ajustados para cálculos em tempos de média superiores a 10 minutos, o que impossibilita inferir sobre eventos em escalas temporais inferiores. Tendo conhecimento desta lacuna, neste trabalho os principais métodos de estimativa de coeficientes de dispersão lateral foram avaliados em diferentes tempos de média, utilizando a base de dados de Round Hill II. O resultado da avaliação mostrou que os métodos de Draxler e o empregado no AERMOD se correlacionam melhor às observações. No entanto, os respectivos métodos apresentaram erros sistemáticos elevados (*Bias*), que se intensificam com a redução do tempo de média. Assim, uma formulação foi proposta para corrigir o *Bias* da dispersão lateral do AERMOD, que contabiliza os efeitos do tempo de média em suas estimativas. Os resultados encontrados indicam uma melhoria significativa no desempenho do modelo em diferentes tempos de média quando comparado às observações dos experimentos de Round Hill II e Uttenweiller. Os resultados mostram que os ajustes propostos podem oferecer uma melhoria de até 40% na redução de erros sistemáticos no AERMOD, em previsões em tempos de média menores que 1 hora. O procedimento desenvolvido neste trabalho poderá melhorar a performance do modelo AERMOD para a estimativa de concentrações em curtos intervalos de tempo, o que terá sua importância em estudos de avaliação do impacto ambiental de odores ou de poluentes tóxicos.

PALAVRAS-CHAVE: AERMOD, turbulência, Round Hill II e Uttenweiller.

ABSTRACT

The dispersion modeling is an important decision tool for estimating the impact of human activities on the environment and its populations. However, it was proved by researchers that AERMOD and CALPUFF, current regulatory models, did not account the effect of averaging time. In consequence, these models does not have ability to predict short-term time peak concentrations. This inability arises from the errors on the lateral and vertical dispersion estimates, which are reliable only to predict 10 minutes or longer average concentrations. In this thesis, a novel evaluation was conducted to investigate de effect of averaging time on the lateral dispersion and maximum concentration estimates. Pasquill-Gifford, Högström, Draxler (embedded on CALPUFF) and AERMOD lateral dispersion schemes were tested using Round Hill II experiment, developed to investigate the effects of averaging time on atmospheric transport and diffusion. The results of the comparison shows that AERMOD and Draxler better correlate with measured data than P.G. and Högström methods. However, their estimates are biased and the magnitude of systematic errors tend to grow as the averaging time decreases. Moreover, AERMOD and Draxler, with Peak to Mean (P-M) adjustment, tend to overestimate the lateral dispersion farther from the source and underestimate in downwind distances shorter than 200 meters. A novel approach to account for the averaging time effect on AERMOD was proposed in this work. The results showed that the new model reached better results than the standard AERMOD for the two database used. The present analysis also highlight some concerns on the P-M ratio application due its subjectiveness.

KEYWORDS: AERMOD, Peak to Mean, turbulence, Round Hill II and Uttenweiller.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Segregação dos movimentos de dispersão de uma pluma. Dispersão dos poluentes e alteração do eixo central da pluma.	20
Figura 2: Comparação entre o um modelo estacionário (AERMOD) e não estacionário (CALPUFF).	33
Figura 3: Ilustração esquemática do sistema de coordenadas utilizado em um modelo gaussiano tradicional. Dimensões podem estar fora das proporções corretas.	35
Figura 4: Exemplo de influência de diferentes escalas turbulentas na dispersão dos poluentes. a) dispersão real de uma pluma. b) vórtices turbulentos e seus efeitos na dispersão	40
Figura 5: Dispersão lateral (σ_y) como função de X . Dados extraídos do experimento Prairie Grass. Ajuste entre coeficiente utilizado no AERMOD e dados observados.	44
Figura 6: Comparação entre concentrações médias calculadas por um modelo gaussiano, flutuações instantâneas e Limite de Percepção Olfativa.	49
Figura 7: Boxplot das concentrações em diferentes tempos de média. Desvio igual a 50 representa uma condição atmosférica instável e igual a 5 estável.....	52
Figura 8: Representação da dispersão horizontal da pluma considerando médias horárias, de 10 minutos e da pluma instantânea. Fronteiras das plumas calculadas em média horária e de 10min e pluma instantânea.	53
Figura 9: Fluxograma da etapa metodológica de avaliação de métodos de estimativa de coeficientes de dispersão em diferentes tempos de média.....	59
Figura 10: Localização do experimento de Round Hill II nos EUA. Disposição dos três arcos de receptores considerados (50, 100 e 200 metros) no primeiro experimento conduzido. Exemplo de funcionamento independente dos medidores para cada tempo de amostragem nos arcos.	61
Figura 11: Exemplo de melhor ajuste entre curva gaussiana (Equação 16) e uma das observações em Round Hill II no arco localizado a 50 metros de distância da fonte. Dispersão lateral (σ_y) e concentração máxima no arco (C_{max}) encontradas pelo método de mínimos quadrados não linear. μ é a distância do centro da distribuição da curva gaussiana observada em relação ao eixo da direção do vento.....	64

Figura 12: Representação do funcionamento dos parâmetros/métricas estatísticas. a) Observações e previsões com médias semelhantes, porém com variabilidade distintas; b) médias das observações diferente das previsões, porém com variabilidade idêntica; c) aproximação perfeita entre previsões e observações.	67
Figura 13: Caso real onde plumas modelada e observada possuem eixos centrais distintos e caso considerado onde ocorre a sobreposição entre elas.....	70
Figura 14: Fluxograma da etapa metodológica da avaliação do AERMOD adaptado e original no cálculo da dispersão de odores.	72
Figura 15: Localização do experimento de Uttenweiller na Alemanha. Disposição arcos de receptores considerados (entre 150 e 200 metros) em um dos experimentos conduzidos.....	74
Figura 16: Exemplo entre melhor ajuste entre curva gaussiana e observações em um dos experimentos de Uttenweiller na Alemanha. Dispersão lateral (σ_y) e concentração máxima no arco (C_{max}) encontradas pelo método de mínimos quadrados não linear.	75
Figura 17: Gráfico de contorno das plumas para os tempos de média de 10; 3 e 0,5 minutos. Condições médias encontradas no experimento Round Hill II	80
Figura 18: <i>Fractional Bias (FB)</i> entre observações e estimativas de dispersão lateral a 50, 100 e 200 metros para o experimento de Round Hill II em tempos de média de 0,5; 3 e 10 minutos. Barras indicam o desvio padrão do <i>FB</i> e valores em vermelho o <i>FACT2</i>	83
Figura 19: Dispersão lateral em função da distância adimensional X. Melhor ajuste entre Equação 13 e dados observados no experimento de Round Hill II em tempos de média de 10, 3 e 0,5 minutos. Escala logarítmica.	94
Figura 20: Relação entre tempo de média e valor de α (dados experimentais). Equação que relaciona alfa e tempo de média representada pela linha contínua vermelha. Gráfico em escala logarítmica.....	96
Figura 21: <i>Fractional Bias (FB)</i> entre observações e previsões pelo AERMOD padrão, AERMOD com P-M e o ajuste proposto para 30 segundos de média (AERMOD Adj). Resultados utilizando σ_v medido.....	98

LISTA DE QUADROS E TABELAS

Quadro 1: Modelos de dispersão mais utilizados em avaliações de impactos odorantes.	47
Quadro 2: Fator <i>Peak to Mean</i> (P-M) utilizado na correção das previsões em tempos de média menores que 1 hora nos métodos do AERMOD e de Draxler.	65
Tabela 1: Valor do expoente a para cada condição de estabilidade atmosférica (SMITH, 1973 <i>apud</i> SCHAUBERGER <i>et al.</i> , 2012).	55
Tabela 1: Média e Desvio Padrão (D.P.) da velocidade do vento, desvio padrão da componente horizontal da velocidade do vento (Desv. Vel Hor.) e temperatura do período de amostragem, do experimento de Round Hill II, em 1957.	78
Tabela 2: Média e desvio padrão da dispersão lateral ($\langle\sigma_y\rangle$), concentração máxima ($\langle C_{max}\rangle$) e posição do centro ($\langle\mu\rangle$) das plumas de poluentes durante o experimento de Round Hill II para cada arco de receptor e tempo de média.	79
Tabela 3: Performance dos métodos na estimativa da dispersão lateral (σ_y) da pluma com dados do experimento de Round Hill II para tempos de média de 0,5; 3 e 10 minutos. Estimativas do AERMOD e Draxler com e sem fator <i>Peak to Mean</i> .	82
Tabela 4: Correlações entre dispersão lateral observada a 50 , 100 e 200 metros em tempos de média de 10; 3 e 0,5 minutos versus dispersão lateral modelada. Correlação não paramétrica de Spearman (ρ) entre observações e previsões em cada arco do experimento	86
Tabela 5: Performance dos métodos na estimativa das concentrações máximas no experimento de Round Hill para tempos de média de 0,5; 3 e 10 minutos.	88
Tabela 6: Desvio padrão da velocidade lateral do vento observada no experimento de Round Hill e modelada pelo AERMOD. Bias entre observações e previsões. Velocidade do vento para nos dias do experimento.	90
Tabela 7: Média das métricas estatística entre observações e estimativas de σ_v para o experimento de Round Hill II.	90
Tabela 8: Métricas estatísticas da comparação entre observações em diferentes tempos de média em Round Hill II e simulações com o AERMOD utilizando σ_v estimado e medido no respectivo experimento.	92

Tabela 9: Coeficientes α e p originais do AERMOD e encontrados no experimento de Round Hill II.....	95
Tabela 10: Métricas estatísticas entre valores de σ_{yuvwx} e X observados e curva de melhor ajuste e configuração original do AERMOD com valor de α igual a 78 e p igual a 0,3.....	95
Tabela 11: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Round Hill II e previsões pelo AERMOD original (sem fator P-M) e ajuste proposto AERMOD A30.....	99
Tabela 12: Métricas estatísticas entre observações da concentração máxima em Round Hill II e previsões pelo AERMOD original e ajuste proposto AERMOD A30.....	100
Tabela 13: Condições meteorológicas médias e Desvio Padrão. Dispersão lateral observada de 10 segundos, média de 10 segundos a cada 1 minuto (10 seg média) e média de 1 minuto nos receptores (1 minuto).....	101
Tabela 15: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller a cada 10 segundos e previstas pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj no meander e original (com e sem P-M). Cálculos utilizando σ_v medido.....	102
Tabela 16: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller a cada 10 segundos e previstas pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj no meander e original. Cálculos utilizando σ_v estimado.....	103
Tabela 17: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller a cada 10 segundos e previstas pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj no meander e original. Cálculos utilizando σ_v medido e estimado com a implementação do algoritmo PRIME.....	104
Tabela 18: Métricas estatísticas entre observações a cada 10 segundos em Uttenweiller e previsões da dispersão lateral dos métodos de Högström, P.G., Draxler e o AERMOD original com fator P-M.....	105
Tabela 19: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj no meander e original (com e sem P-M). Cálculos utilizando σ_v medido. Média a cada minutos das observações de 10 segundos.....	106
Tabela 20: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj no meander e original. Cálculos utilizando σ_v estimado. Média a cada minutos das observações de 10 segundos.....	107

Tabela 21: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj <i>no meander</i> e original. Cálculos utilizando σ_v medido e estimado com a implementação do algoritmo PRIME. Média a cada minutos das observações de 10 segundos.	108
Tabela 22: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas nos métodos de Högström, P.G., Draxler e o AERMOD original com fator P-M. Cálculos utilizando σ_v medido, estimado e estimado com implementação do PRIME. Média a cada minuto das observações de 10 segundos.	108
Tabela 23: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj <i>no meander</i> e original. Cálculos utilizando σ_v medido. Média de 1 minuto nos receptores.	110
Tabela 24: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj <i>no meander</i> e original. Cálculos utilizando σ_v estimado. Média de 1 minuto nos receptores.	110
Tabela 25: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj <i>no meander</i> e original. Cálculos utilizando σ_v medido e estimado com a implementação do algoritmo PRIME. Média de 1 minuto nos receptores.	111
Tabela 26: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas nos método de Högström, P.G. e Draxler. Cálculos utilizando σ_v medido, estimado e estimado com implementação do PRIME. Tempo de média de 1 minuto.	112

LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

ADMS	<i>Atmospheric Dispersion Modelling System</i>
AERMOD	<i>American Meteorological Society/Environmental Protection Agency Regulatory Model</i>
AERMOD Adj	AERMOD com o ajuste do termo α
AERMOD Adj <i>no meander</i>	AERMOD com ajuste do termo α e sem tratamento da flutuação do centro da pluma
ARL	<i>Air Resources Laboratory</i>
AODM	<i>Austrian Odour Dispersion Model</i>
AUSPLUME	<i>Australian plume dispersion model</i>
CALPUFF	<i>California Puff Model</i>
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CTDMPLUS	<i>Complex Terrain Dispersion Model</i>
FACT2	Fator de dois
FB	<i>Fractional Bias</i>
HYSPLIT	<i>Hybrid Single-Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model</i>
INPUFF	<i>Gaussian Integrated Puff model</i>
ISC3	<i>Industrial Source Complex</i>
LCQAR	Laboratório de Controle da Qualidade do Ar
MAE	<i>Mean Average Error</i>
NMSE	<i>Normal Mean Square Error</i>
NOAA	<i>National Oceanic and Atmospheric Administration</i>
P-M	Fator Pico-Média ou <i>Peak to Mean</i>
P.G.	<i>Pasquill-Gifford</i>
ρ	Correlação de Spearman
TM	Tempo de Média
SCIPUFF	<i>Second-order Closure Integrated Puff model</i>
STDFB	Desvio padrão do <i>Fraction Bias</i>
USEPA	<i>United States Environmental Protection Agency</i>

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	17
1.1.	JUSTIFICATIVA	19
1.2.	CONTRIBUIÇÕES DA TESE	21
1.3.	HIPÓTESES	23
1.4.	OBJETIVOS	25
1.4.1.	Objetivo Geral	25
1.4.2.	Objetivos Específicos	25
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	27
2.1.	TURBULÊNCIA ATMOSFÉRICA	27
2.2.	MODELAGEM MATEMÁTICA DE DISPERSÃO	30
2.3.	MODELOS ANALÍTICOS	31
2.3.1.	Modelos estacionários	33
2.3.2.	Modelos não estacionários	36
2.4.	COEFICIENTES DE DISPERSÃO	38
2.4.1.	Estimativa dos coeficientes de dispersão no AERMOD. ..	42
2.4.2.	Estimativa dos coeficientes de dispersão em outros modelos	
	46	
2.5.	LIMITAÇÕES DOS MODELOS PARA TEMPOS DE MÉDIA	
	CURTOS	49
3.	MATERIAIS E MÉTODO	57
3.1.	AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE ESTIMATIVA DE	
	COEFICIENTES DE DISPERSÃO EM DIFERENTES TEMPOS DE	
	MÉDIA	58
3.1.1.	Descrição do experimento de Round Hill II	59
3.1.2.	Determinação da dispersão lateral e concentrações máximas	
	observadas	62
3.1.3.	Técnicas estatísticas utilizadas para comparar observações e	
	estimativas	64
3.2.	AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DA PARAMETRIZAÇÃO	
	DO DESVIO PADRÃO DA VELOCIDADE DO VENTO NA	
	ESTIMATIVA DA DISPERSÃO LATERAL PELO AERMOD	70
3.3.	ADAPTAÇÃO DO COEFICIENTE DE DISPERSÃO	
	LATERAL DO AERMOD PARA PREVISÃO EM TEMPOS DE	
	MÉDIA CURTOS	71
3.4.	VALIDAÇÃO DO AERMOD ADAPTADO NO CÁLCULO	
	DA DISPERSÃO DE ODORES	71
3.4.1.	Descrição do experimento de Uttenweiller	72
3.4.2.	Determinação da dispersão lateral observada	75
3.4.3.	Técnicas estatísticas utilizadas para comparar observações e	
	estimativas	76

3.4.4.	Avaliação da presença de obstáculos na estimativa da dispersão lateral pelo AERMOD	77
4.	RESULTADOS	78
4.1.	AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE ESTIMATIVA DE COEFICIENTES DE DISPERSÃO EM DIFERENTES TEMPOS DE MÉDIA	78
4.1.1.	Avaliação dos métodos de estimativa da dispersão lateral	80
4.1.2.	Avaliação das concentrações máximas	87
4.2.	INFLUÊNCIA DA PARAMETRIZAÇÃO DO DESVIO PADRÃO DA VELOCIDADE LATERAL DO VENTO NA ESTIMATIVA DA DISPERSÃO LATERAL	89
4.3.	ADAPTAÇÃO DO COEFICIENTE DE DISPERSÃO LATERAL DO AERMOD PARA PREVISÃO DE CONCENTRAÇÕES EM TEMPOS DE MÉDIA CURTOS	93
4.3.1.	Ajustes dos parâmetros α e p	93
4.3.2.	Comparação entre AERMOD ajustado e padrão com a base da dados de Round Hill II	97
4.4.	VALIDAÇÃO DO AERMOD ADAPTADO NO CÁLCULO DA DISPERSÃO DE ODORES	101
4.4.1.	Dispersão lateral em tempo de média de 10 segundos	102
4.4.2.	Média dos últimos 6 valores da dispersão lateral em tempo de média de 10 segundos	105
4.4.3.	Dispersão lateral em tempo de média de 1 minuto	109
5.	CONCLUSÃO	113
6.	RECOMENDAÇÕES	117
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	119
	APÊNDICE 1 – MÉTRICAS ESTATÍSTICAS	131
A)	Erro Sistemático Médio (<i>Bias</i>)	131
B)	Erro Fracional (<i>Fractional Bias - FB</i>)	131
C)	Erro quadrático médio normalizado (<i>Normalized Mean Square Error - NMSE</i>)	132
D)	Fator de 2 (<i>Factor of 2 - FACT2</i>)	132
E)	Erro Absoluto Médio (<i>Mean Absolute Error - MAE</i>)	132
F)	Coefficiente de correlação de Spearman (ρ)	132
	ANEXO 1 – COEFICIENTES DE DISPERSÃO	135
A)	Coefficiente de dispersão vertical do AERMOD	135
B)	Coefficientes de dispersão de Pasquill-Gifford	136
C)	Coefficientes de dispersão do Högström	137
D)	Coefficientes de dispersão de Draxler	140
	ANEXO 2 – TRATAMENTO DA TURBULÊNCIA NO AERMOD	141

1. INTRODUÇÃO

A modelagem matemática de dispersão surge como uma opção interessante para prever e diagnosticar o impacto ambiental causado pela emissão de poluentes atmosféricos. Em alguns casos, como na avaliação de impacto de atividades ainda não estabelecidas e na proposição de políticas de uso e ocupação do solo, a modelagem de dispersão é uma das únicas metodologias disponíveis para auxiliar na tomada de decisões por órgãos ambientais licenciadores.

Diversos modelos de dispersão de poluentes têm sido empregados em estudos de qualidade do ar, sendo eles analíticos ou numéricos. Devido ao elevado consumo de tempo e memória computacional, métodos numéricos ainda são pouco atrativos para fins regulatórios e, assim, ainda é preciso recorrer aos modelos analíticos para realizar esta tarefa.

Entre as formulações analíticas mais utilizadas estão as Gaussianas tradicionais e as Lagrangeanas de *Puffs* Gaussianos (Modelos de *Puff*). Estas duas representações da dispersão dos poluentes são as bases de cálculo dos modelos AERMOD (Gaussiano) e CALPUFF (Modelo de *Puff*). Ambos os modelos são recomendados pela agência de proteção ambiental dos Estados Unidos da América - US EPA¹.

Apesar de que o nível de sofisticação dos modelos tenha se elevado, é conhecido que os mesmos ainda são ineficientes quando é necessário prever picos de concentrações em eventos de curta duração temporal (curta exposição) (BEAMAN, 1988; WANG *et al.*, 2006; DOURADO *et al.*, 2012) .

O ponto crítico na estimativa das concentrações por modelos analíticos é a determinação dos coeficientes de dispersão lateral e vertical. Tais coeficientes representam o grau de espalhamento dos poluentes em torno do eixo central da pluma. As características não homogêneas e não estacionárias conferem a turbulência uma natureza estocástica que dificulta encontrar uma formulação analítica adequada para estimar estes coeficientes. Para resolver esta problemática é necessário recorrer aos métodos empíricos e semi-empíricos, baseados ou ajustados por observações em campo do espalhamento de plumas.

¹ http://www.epa.gov/scram001/dispersion_prefrec.htm

Na maioria dos modelos, incluindo o AERMOD e o CALPUFF, os coeficientes de dispersão foram ajustados com base em experimentos em escala real. Nestes experimentos, as concentrações de um gás traçador eram medidas à sotavento de sua fonte de emissão, por diversos coletores dispostos em arcos. Assim, o arranjo experimental permitia determinar o espalhamento da pluma em campo para que métodos de estimativa de coeficientes de dispersão fossem ajustados ou desenvolvidos. Na maioria dos experimentos, as amostras eram coletadas durante 10 minutos (tempo de média de 10 minutos) ou período superior para, então, quantificar suas concentrações. Tal fato propiciou desenvolver estimativas apropriadas da dispersão de plumas em tempos de média superiores a 10 minutos. No entanto, sua aplicabilidade é limitada a essas escalas temporais, não permitindo inferir apropriadamente sobre eventos de curta duração temporal, como nos casos de emissões tóxicas e odorantes. Em tempos de média iguais ou superiores a 10 minutos, os efeitos de dispersão e alteração da direção do eixo da pluma, causadas por escalas turbulentas distintas, se somam, sendo que apenas o primeiro é responsável pela diluição efetiva dos poluentes. Consequentemente, modelos como o AERMOD e o CALPUFF superestimam a dispersão vertical e lateral de plumas instantâneas. Portanto, é comum que concentrações instantâneas sejam maiores que as estimadas por estes modelos.

Este trabalho tem como objetivo avaliar e ajustar o método de estimativa da dispersão lateral do AERMOD com o intuito estender a aplicabilidade do mesmo para o cálculo da dispersão de compostos com elevada toxicidade ou odorantes. Para tanto, foram utilizadas as bases de dados dos experimentos de Round Hill II e Uttenweiller, que possuem medições de concentrações em tempos de média inferiores a 10 minutos. Na primeira etapa deste estudo foram realizadas avaliações dos principais métodos de estimativa de coeficientes de dispersão lateral em diferentes tempos de média, comparando-os com observações dos experimentos de Round Hill II (CRAMER *et al.*, 1957). Esta etapa inicial teve o intuito de identificar os métodos de estimativa dos coeficientes de dispersão lateral que mais se correlacionam com as observações. Uma vez identificados os métodos, foram investigadas e avaliadas suas fontes de incertezas. Por fim, ajustes do coeficiente de dispersão lateral do AERMOD foram propostos para incluir o efeito do Tempo de Média (TM) e a performance do modelo antes e após as modificações foi avaliada utilizando o experimento de Uttenweiller (BÄCHLIN; RÜHLING E

LOHMEYER, 2002). Pretende-se com isto chegar a uma nova formulação que possa ser aplicada ao AERMOD.

O Laboratório de Controle da Qualidade do Ar da Universidade Federal de Santa Catarina (LCQAr-UFSC) vem desenvolvendo pesquisas na área de dispersão, tratamento e medições de emissões poluentes atmosféricos. As pesquisas na área de dispersão foram iniciadas pelo pesquisador e Dr. Henrique de Melo Lisboa, que realizou seu doutoramento nesta temática. A partir de 2002, ano de fundação do LCQAr, já foram realizados trabalhos de conclusão de curso e mestrado que tiveram como tema a modelagem de dispersão (DE MELO LISBOA, 1996; KAWANO, 2003; MANDU, 2010; SOUZA, 2014a). Em virtude dos equipamentos existentes e estudos anteriores, atualmente o LCQAr possui estrutura adequada para conduzir trabalhos na área de poluição do ar, mais especificamente para emissões odorantes.

1.1. JUSTIFICATIVA

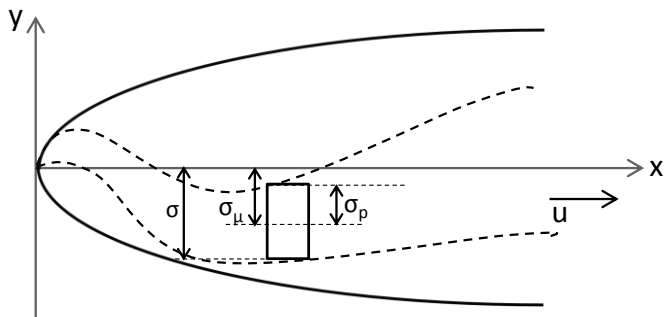
A dispersão de plumas de poluentes ocorre devido à turbulência atmosférica, causada pelas variações espaciais e temporais da direção e velocidade do vento (POPE, 2000). Estas movimentações turbulentas são responsáveis tanto pela dispersão da pluma, quanto pela alteração do eixo central da mesma. As movimentações turbulentas em pequenas escalas (variação da velocidade vento em alta frequência) são os agentes da dispersão, já as escalas turbulentas maiores (variações da velocidade do vento em alta frequência) são responsáveis pelas alterações da posição do eixo da pluma (SEINFELD *et al.*, 2006; IRWIN *et al.*, 2007). Sabendo disso, Gifford (1968) apresenta o conceito que divide a dispersão de uma pluma de poluente em uma parte dispersiva e outra que altera a posição do centro da pluma. Nesta formulação estes efeitos se complementam. A Figura 1 ilustra a concepção idealizada por Gifford (1968) da dispersão de uma pluma instantânea, segundo a relação presente na Equação 1.

$$\sigma^2 = \sigma_p^2 + \sigma_\mu^2 \quad (1)$$

Onde, σ representa a dispersão total, σ_p a dispersão em relação ao eixo da pluma (desvio padrão da posição do fluido em torno da média); e σ_μ a flutuação do centro da pluma em relação a direção do

vento (desvio padrão da posição do centro da pluma em relação a direção média do vento).

Figura 1: Segregação dos movimentos de dispersão de uma pluma. Dispersão dos poluentes e alteração do eixo central da pluma.



Fonte: Adaptado de Mussio *et al.*, (2001).

Em uma pluma instantânea como a da Figura 1, é possível diferenciar os efeitos de dispersão e de alteração do eixo da mesma. No início do trajeto, apenas as escalas turbulentas com dimensão menor ou igual ao tamanho da pluma dispersam os poluentes (σ_p), enquanto as escalas/vórtices turbulentos maiores alteram a posição da mesma (σ_μ), sem dispersá-la. Ao se distanciar da fonte, a pluma se torna maior devido à ação diluidora provocada pela turbulência, permitindo que as escalas turbulentas maiores também participem do processo de dispersão (SEINFELD *et al.*, 2006; IRWIN *et al.*, 2007).

Para que fosse possível realizar previsões da concentrações de poluentes por modelos analíticos, foi necessário desenvolver métodos que estimassem os coeficientes de dispersão lateral (σ_y) e vertical (σ_z). Diversos autores (HÖGSTRÖM, 1964; DRAXLER, 1976; PASQUILL, 1976; IRWIN, 1983; TURNER, 1997) definem os σ_y e σ_z como funções, principalmente, da turbulência atmosférica e distância da pluma em relação à fonte. Na maior parte dos modelos, incluindo o AERMOD, estes coeficientes foram desenvolvidos ou calibrados com base em experimentos que realizavam medições de concentrações a cada 10 minutos, ou períodos mais longos. Algumas limitações emergem ao utilizar medições com tempo de amostragem de 10 minutos. Ao ser realizada a média de diversas realizações instantâneas da dispersão de uma pluma, não é mais possível distinguir as

propriedades σ_p e σ_μ , vistas na Figura 1. A realização de médias faz com que a dispersão da pluma seja vista como a soma de σ_p e σ_μ , (Equação 1). Ao incluir σ_μ nos coeficientes de dispersão, é adicionada às estimativas uma parcela que não dispersa a pluma efetivamente. Por este motivo, os coeficientes de dispersão empregados nos modelos superestimam a dispersão em tempos de média menores do que 10 minutos.

Irwin *et al.* (2007) realizaram uma análise da influência do Tempo de Média nas medições de concentração de plumas a partir do experimento de Round Hill II. De acordo com Irwin *et al.* (2007), as concentrações máximas medidas em tempos de 0,5 e 3 minutos são 1,66 e 1,42 vezes maiores que as concentrações máximas medidas em 10 minutos. Os autores também constataram que a medida que o TM cresce há um acréscimo na dispersão lateral da pluma. Por este motivo, os coeficientes de dispersão são válidos apenas para as escalas temporais as quais os mesmos foram elaborados. Para os casos que o impacto ocorre na ordem de segundos², como a dispersão de poluentes com elevada toxicidade e a percepção de odores, já é conhecido que os coeficientes de dispersão convencionais (válidos para períodos superiores a 10 minutos) não são adequados. Alguns poluentes, como no caso do Formoldeído, causam danos imediatos ao seres humanos quando expostos à concentrações elevadas (NIOSH, 1994).

1.2. CONTRIBUIÇÕES DA TESE

Esta tese visa avaliar coeficientes de dispersão lateral em diferentes tempos de média. Isso possibilitará conhecer a aplicabilidade dos métodos em avaliações de impactos odorantes e poluentes tóxicos. Os métodos avaliados neste trabalho são os de Draxler, Pasquill-Gifford, Höglström e o utilizados no modelo AERMOD.

Entre os modelos, o AERMOD é o software mais utilizado em estudos de impacto na qualidade do ar. É robusto e plenamente difundido na comunidade científica. Esta tese também apresenta uma proposição de ajuste dos coeficientes de dispersão do AERMOD, de forma a estender a aplicação do mesmo em estimativas de concentrações de odores e poluentes tóxicos, em diferentes tempos de média.

² 4 segundos é o tempo de respiração do ser humano.

1.3. HIPÓTESES

- O AERMOD não é adequado para estimar concentrações em intervalos inferiores a 10 minutos nos estudos de dispersão de odores e poluentes tóxicos;
- O tempo de média é uma variável importante que deve ser incluída na estimativa da dispersão dos poluentes;
- O emprego de um coeficiente de dispersão lateral que inclua o efeito da realização de médias pode melhorar o desempenho do AERMOD na determinação de concentrações máximas de odores e poluentes tóxicos.

1.4. OBJETIVOS

1.4.1. Objetivo Geral

Propor uma metodologia de ajuste do coeficiente de dispersão lateral utilizado no AERMOD para cálculo em diferentes tempos de média.

1.4.2. Objetivos Específicos

- Avaliar os principais métodos de estimativa de coeficientes de dispersão lateral em previsões com diferentes tempos de média;
- Avaliar e ajustar o coeficiente de dispersão lateral do AERMOD para previsões em diferentes tempos de média, utilizando a base de dados de Round Hill II;
- Encontrar uma forma empírica para incluir os efeitos do tempo de média na estimativa da dispersão lateral dos poluentes;
- Validar a qualidade das simulações na dispersão lateral de compostos odorantes pelo modelo AERMOD antes e após os ajustes efetuados, utilizando a base de dados de Uttenweiller;
- Avaliar influência da parametrização do desvio padrão da velocidade do vento na estimativa da dispersão lateral pelo AERMOD em diferentes tempos de média;
- Validar o desempenho das estimativas da dispersão lateral do AERMOD antes e após os ajustes efetuados, na presença de obstáculos, em tempos de média menores que 10 minutos.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são apresentados conceitos sobre turbulência, modelagem matemática de dispersão de poluentes atmosféricos e os principais modelos. Em seguida, uma revisão sobre coeficientes de dispersão em modelos analíticos também é apresentada. Por fim, é feita uma discussão sobre as limitações dos modelos na estimativa de concentrações em Tempos de Média (TM) na ordem de segundos. Nos itens e capítulos a seguir o TM representa a média das concentrações em um determinado tempo ou tempo de integração.

2.1. TURBULÊNCIA ATMOSFÉRICA

A turbulência recebe grande atenção da comunidade científica, por se tratar de um processo muito mais eficiente do que a difusão molecular quando o propósito é dissipar calor ou dispersar poluentes (SEINFELD e PANDIS, 2006). O escoamento turbulento na atmosfera é formado por vórtices de tamanhos que variam de alguns milímetros até centenas de metros, originados pelas flutuações da velocidade do vento e temperatura. Em um escoamento turbulento a energia é recebida pelos vórtices maiores e se dissipa nos vórtices menores em um processo de cascata, conforme idealizado por Richardson (1920) (ARYA 1988 *apud* DIAS JUNIOR, 2008). A energia cinética turbulenta é dada pela Equação 2:

$$e = \frac{u^2+v^2+w^2}{2} \quad (2)$$

Onde, u , v e w são as componentes da velocidade do vento.

Segundo Richardson em 1920 e Kolmogorov em 1941, vórtices maiores colapsam em vórtices menores até atingirem as escalas menores, onde atuam as forças de viscosas que absorvem a energia turbulenta. Esta teoria sugere que apenas os vórtices maiores estão ligados às fontes de energia turbulenta (flutuabilidade térmica e cisalhamento do vento) e, portanto, as escalas intermediárias dessa cascata de energia possuem atributos universais em todos os escoamentos. No entanto, está hipótese ainda é objeto de muita discussão na comunidade científica (TENNEKES, 1972 *apud* DIAS JUNIOR, 2008).

Osborne Reynolds desenvolveu uma formulação que relaciona forças de inércia e forças viscosas. Um escoamento é dado como turbulento quando o número de Reynolds, $R_e = u \cdot L / \nu$, é muito grande, sendo u e L as escalas de velocidade e comprimento do escoamento e ν a viscosidade cinemática do fluido. Em escoamentos com elevado número de Reynolds, as forças de inércia se sobressaem às viscosas, fato que prevalece quase sempre na atmosfera (WITTWER, 2006).

Algumas propriedades importantes da turbulência são (TENEKES; LUMLEY, 1972; WITTWER, 2006):

- **Impredicibilidade:** confere a alta sensibilidade do comportamento dinâmico de um sistema, governado por equações determinísticas, às condições iniciais impostas;
- **Difusividade:** Rápida transferência de quantidade de movimento, calor e massa;
- **Vorticidade:** a turbulência é rotacional e tri-dimensional
- **Dissipação:** os tensores aumentam a energia interna do fluido a expensa de uma perda de energia cinética turbulenta. Se o fluido não for alimentado com energia a turbulência decai;
- **É uma propriedade do escoamento:** a turbulência não é uma propriedade do fluido. Maior parte das dinâmicas da turbulência são iguais em qualquer tipo de fluido, sendo ele líquido ou gasoso.

A turbulência é homogênea quando suas propriedades estatísticas não variam no espaço; ela é estacionária quando suas propriedades não variam no tempo, e é isotrópica quando suas propriedades são iguais em todas as direções do espaço (GARRATT, 1992 *apud* FREIRE, 2012).

Na atmosfera, as manifestações irregulares e aleatórias do vento impedem que soluções exatas para o cálculo da dispersão de poluentes sejam encontradas. Por este motivo, este fenômeno deve ser tratado de forma estatística (IRWIN *et al.*, 2007). Do ponto de vista estatístico a turbulência pode ser tratada através de quantidades médias. Para

facilitar o estudo de escoamentos turbulentos de forma estatística é possível utilizar a separação de Reynolds, dada pela Equação 3:

$$u_i(t) = \tilde{u}_i + u_i'(t) \quad (3)$$

Onde, o sub-índice i representa uma componente do vento, \tilde{u}_i a velocidade média e u_i' as flutuações do vento em relação a média da componente i . A propriedade média representa a parte determinística do processo e as flutuações a parte aleatória.

Um marco importante no estudo da turbulência ocorreu em 1954, quando A.S Monin e A. M. Obukhov aplicaram a teoria da similaridade para entender os problemas relacionados ao escoamento na Camada Limite Superficial (CLS)³ da atmosfera (MONIN; OBUKHOV, 1954). Neste estudo, os referidos pesquisadores estudaram a similaridade entre escoamentos com diferentes velocidades, temperaturas, rugosidade, etc. (FREIRE, 2006). Baseada em evidências empíricas resultantes de experimentos em campo, a teoria da similaridade de Monin-Obukhov utiliza variáveis adimensionais para descrever a turbulência na CLS (MONIN; OBUKHOV, 1954; DIAS JUNIOR, 2008). Essa teoria foi o ponto de partida para os estudos de micrometeorologia moderna e base de cálculo para diversos modelos de dispersão de poluentes (FOKEN, 2006).

De acordo com a teoria de Monin-Obukhov, determinadas características da turbulência na CLS dependem apenas da altura (z), velocidade de fricção (u_*), fluxo de calor sensível na superfície (H) e empuxo (g/T_0). Onde, g é a aceleração da gravidade e T_0 a temperatura absoluta. A velocidade de fricção é dada pela Equação 4:

$$u_* = -\overline{\rho \cdot w' \cdot u'} \quad (4)$$

Onde, w' e u' são as flutuações verticais e horizontais da velocidade do vento e ρ a massa específica do ar.

O comprimento de Monin-Obukhov (L) representa a estabilidade atmosférica e assume valores negativos para condições instáveis e positivos para estáveis/neutras. Este parâmetro informa a razão entre geração de turbulência por meios mecânicos (cisalhamento do vento) e convectivos (fluxo de calor). Assim, valor negativo de L indica que as

³ Altura na atmosfera onde existe forte influência da rugosidade e fluxo de calor da terra.

forças de empuxo se sobressaem as mecânicas, sendo isto considerado como uma condição de atmosfera instável. O L é dado pela Equação 5:

$$L = - \frac{u_*^3}{k \frac{g}{T_0} \rho C_p H} \quad (5)$$

Sendo, k a constante de Von Kármán e C_p o calor específico do ar a pressão constante.

Na ausência de medições de w' e u' (parâmetros não mensurados por estações meteorológicas convencionais), os valores de u_* e L podem ser obtidos por métodos iterativos, como proposto por Perry (1992).

2.2. MODELAGEM MATEMÁTICA DE DISPERSÃO

O modelo matemático de dispersão de poluentes atmosféricos se resume, basicamente, a um conjunto de equações programadas em um computador com o propósito de estimar as concentrações causadas por um emissor em um determinado local receptor. Ou seja, em um modelo são simuladas a física e química que governam o transporte, dispersão e transformação dos poluentes na atmosfera (NOVA ZELÂNDIA, 2004). Pode-se, portanto, prever as concentrações de um poluente, num determinado ponto ou região, no período desejado.

De acordo com Seinfeld e Pandis (2006), a dispersão de poluentes no ar pode ser descrita por métodos Eulerianos ou Lagrangeanos. A principal diferença destes métodos reside na mobilidade do sistema de referência, sendo que o Euleriano se encontra fixo no espaço e o Lagrangeano segue o movimento das partículas. As duas abordagens rendem diferentes equações matemáticas, no entanto, estão intimamente relacionadas. Ambas as formulações são representações válidas da difusão turbulenta em fluidos (SEINFELD e PANDIS, 2006).

De um modo geral, os modelos matemáticos de dispersão podem ser analíticos ou numéricos. Ambos objetivam resolver as equações diferenciais que formam o modelo matemático ou representam o problema físico, sendo elas Eulerianas ou Lagrangeanas (MALISKA, 2010). A diferença entre modelos numéricos e analíticos está apenas na abordagem que cada um destes métodos ataca o problema. Os métodos analíticos tentam representar o fenômeno físico através de soluções fechadas (solução exata da equação diferencial), obtidas após assumir algumas hipóteses simplificadoras e condições iniciais e de fronteiras

para solucionar a equação diferencial. Estas equações podem ser resolvidas com bastante rapidez. No entanto, ao assumir simplificações, a solução pode ser desviada demasiadamente do problema físico real, logo estes modelos são geralmente empregados com sucesso em situações pouco complexas (MALISKA, 2010).

Para solucionar equações diferenciais, os modelos numéricos dividem o domínio de interesse em pequenas células e estabelecem algumas condições iniciais e de fronteiras. As equações são resolvidas para cada célula, no período desejado, por intermédio de iterações em um computador, utilizando métodos de solução de sistemas lineares até que os mesmos atinjam o critério de convergência. Ao reduzir o tamanho das células que compõem o domínio, é refinado o resultado do modelo. No entanto, este refinamento está intimamente relacionado com o consumo de memória e tempo computacional, o que torna o método pouco atrativo para fins regulatórios. De acordo com Brown e Fletcher (2005) a utilização dos modelos numéricos não tem o propósito de substituir os modelos de dispersão analíticos, mas sim complementar e dar suporte aos resultados alcançados. Pelos motivos supracitados, nos capítulos seguintes será dada ênfase nos modelos analíticos.

2.3. MODELOS ANALÍTICOS

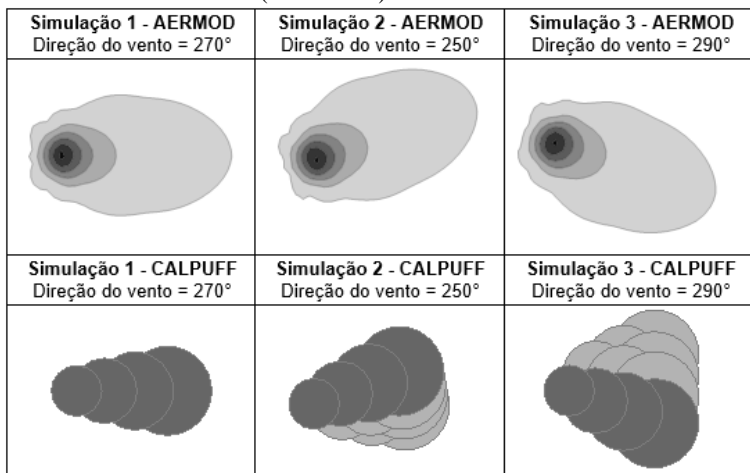
No âmbito da modelagem de dispersão uma segregação importante é feita entre os modelos analíticos, conforme o tratamento que os mesmos oferecem em relação a variabilidade temporal dos dados meteorológicos entre as simulações. Eles podem ser divididos em estacionários e não estacionários. Em modelos estacionários, as condições meteorológicas são assumidas como permanentes no tempo e espaço, durante a dispersão dos poluentes, da fonte até o receptor. É assumido que o poluente se dispersa em todo o domínio de modelagem, mesmo se realisticamente a pluma não tenha tido tempo suficiente para chegar ao final deste domínio (NOVA ZELÂNDIA, 2004). Já em modelos não estacionários é utilizada uma forma mais realística para representar a dispersão dos poluentes. Nesta última abordagem, a trajetória da pluma segue a movimentação do ar e a dispersão em horas subsequentes são dependentes.

A Figura 2 apresenta um exemplo ilustrativo da diferença entre um modelo estacionário AERMOD (*American Meteorological Society/Environmental Protection Agency Regulatory Model*) e não estacionário CALPUFF (*California Puff*) na simulação da dispersão de

uma fonte pontual. Na parte superior da figura são representadas as plumas geradas pelo AERMOD e na inferior os *puffs* gerados pelo CALPUFF. Foram utilizadas as configurações padrão do AERMOD e o CALPUFF foi configurado para gerar 4 *puffs* em cada passo temporal. O CALPUFF possui uma saída específica para visualização dos *puffs* que foi utilizada neste caso. As colorações dos *puffs* não representam o grau de espalhamento dos mesmos, sendo apenas utilizadas para facilitar a visualização dos novos *puffs* e antigos. Em ambos os casos, as condições meteorológicas são consecutivas e idênticas, onde apenas a direção do vento varia entre as três simulações (270, 250 e 290°). A emissão foi estabelecida como constante e o relevo plano.

Nota-se através da Figura 2 que os formatos das plumas de dispersão obtidas com o AERMOD são idênticos nas três simulações, alterando apenas a direção do seu eixo. É possível verificar que o AERMOD não memoriza as condições meteorológicas prévias mesmo quando as simulações possuem passos temporais consecutivos. No caso não estacionário, o efeito da memorização entre simulações pode ser visto nos *puffs* gerados pelo CALPUFF, onde a coloração mais escura representa o *puff* emitido no início da simulação e os mais claros representam os *puffs* da simulação anterior. Pode ser visto que na segunda e terceira simulação ainda existe material dos *puffs* dos passos temporais anteriores.

Figura 2: Comparação entre o um modelo estacionário (AERMOD) e não estacionário (CALPUFF).



Fonte: Autor.

2.3.1. Modelos estacionários

Os métodos estacionários são principalmente representados pelos modelos gaussianos. Nesta abordagem, geralmente, o sistema de coordenadas é fixo no espaço (Euleriano) e o modelo analítico é deduzido através da equação da advecção-difusão (Equação 6). Na Equação 6, o primeiro termo à esquerda representa a variação da concentração no tempo (taxa de acumulação). Os demais termos do lado esquerdo da equação retratam a dispersão por processos advectivos em x , y e z . O lado direito da Equação 6 corresponde a difusão turbulenta do poluente, sendo K o coeficiente de difusão turbulenta. Quanto maior o valor de K , maior será o espalhamento da pluma ou dispersão do contaminante e, conseqüentemente, menores concentrações máximas do poluente. S simboliza as fontes de emissão ou decaimento do contaminante na atmosfera.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial x} \left[\frac{\partial C}{\partial x} K_{xx} \right] + \frac{\partial C}{\partial y} \left[\frac{\partial C}{\partial y} K_{yy} \right] + \frac{\partial C}{\partial z} \left[\frac{\partial C}{\partial z} K_{zz} \right] + S \quad (6)$$

- u , v e w são as componentes do vento nas direções x , y e z ;
- C a concentração do poluente no local;

- K os coeficientes de difusão turbulenta em x , y e z (espaço tridimensional);
- S representa os termos fonte e sumidouro.

Ao assumir algumas simplificações como: vento com direção uniforme, regime permanente, difusão desprezível na direção do vento, turbulência homogênea e estacionária, reflexão total do poluente quando colide no solo e poluente inerte, métodos como a transformada de Laplace são capazes de resolver o problema, sendo a Equação 7 uma das possíveis soluções (SEINFELD e PANDIS, 2006). A Figura 3 apresenta o sistema de coordenadas utilizado na Equação 7.

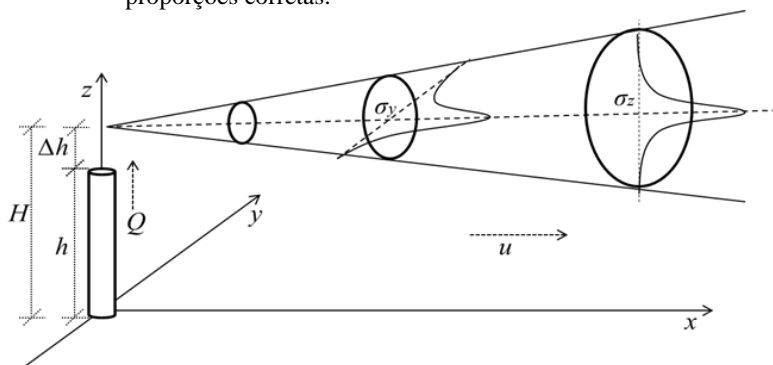
$$C_{(x,y,z,H)} = \frac{Q_s}{2\pi\sigma_y\sigma_z\bar{u}} \cdot \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) \cdot \left(\exp\left(\frac{-(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{-(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right) \quad (7)$$

Onde,

- x , y e z são as distâncias na direção, transversal e vertical em relação a direção do vento entre o local onde se deseja calcular a concentração do poluente e sua respectiva fonte de emissão (m) (Figura 3);
- $C_{(x,y,z)}$ é a concentração esperada do contaminante em (x,y,z) ($g.m^{-3}$);
- Q_s é a quantidade de contaminante lançada pela fonte de emissão ($g.s^{-1}$);
- H é a altura efetiva de lançamento dos poluentes (m);
- \bar{u} é a velocidade média do vento na direção do escoamento (x) na altura da pluma ($m.s^{-1}$);
- σ_y e σ_z são as dispersões lateral e vertical em relação ao eixo central da pluma (m), funções da distância na direção do vento e condições atmosféricas.

Uma interessante dedução didática da Equação 7 também pode ser encontrada no trabalho de Souza (2014 a).

Figura 3: Ilustração esquemática do sistema de coordenadas utilizado em um modelo gaussiano tradicional. Dimensões podem estar fora das proporções corretas.



Fonte: Autor.

Modelos gaussianos, como o representado pela Equação 7, foram amplamente difundidos e bem aceitos pela comunidade científica em virtude da simples utilização e qualidade na previsão de concentrações em médias horárias (SEINFELD e PANDIS, 2006). Por este motivo, a maior parte dos modelos utilizados para a dispersão de poluentes atmosféricos é baseada em um modelo gaussiano estacionário. Entre eles estão o AERMOD, *Australian plume dispersion model* (AUSPLUME), *Atmospheric Dispersion Modelling System* (ADMS), *Austrian odour dispersion model* (AODM), *Industrial Source Complex* (ISC3), *Community Assessment Model* (CAM), *Stink, System for Modelling of Stationary Sources* (SYMOS'97), *Tropos Impact*. O SCREEN3 e COMPLEX I também são modelos gaussianos estacionários, no entanto, são técnicas simplificadas, geralmente utilizadas em avaliações preliminares e exploratórias. O AERMOD é o modelo recomendado pela agência de proteção ambiental dos Estados Unidos (US EPA) para realizar estudos de dispersão de poluentes em distâncias de até 50 quilômetros e, portanto, o mais utilizado no cálculo da dispersão de odores e outros poluentes (USEPA, 2005).

Uma derivação do modelo gaussiano da Equação 7 foi apresentada por Gifford (1959), culminando no modelo de pluma flutuante. A formulação do referido autor foi desenvolvida com o intuito de simular a dispersão de plumas instantâneas. Neste modelo a dispersão de uma pluma de poluente é segregada da parte que altera a posição do seu centro, segundo a relação dada pela Equação 8.

$$C_{(x,y,z)} = \frac{Q_s}{2\pi\sigma_{yp}\sigma_{zp}\bar{u}} \cdot \exp\left(\frac{-(y-\mu_y)^2}{2\sigma_{yp}^2}\right) \cdot \exp\left(\frac{-(z-\mu_z)^2}{2\sigma_{zp}^2}\right) \quad (8)$$

Onde, $\mu_{y,z}$ são as posições do centro da pluma em y e z ; $\sigma_{yp,zp}$ as dispersões em relação ao eixo central da pluma na direção y e em z . O dispersão $\sigma_{yp,zp}$ se relaciona com $\sigma_{y,z}$ de um modelo gaussiano tradicional conforme a Equação 1. Um detalhamento sobre os métodos de obtenção dos coeficientes de dispersão $\sigma_{y,z}$ será apresentado no item 2.4.

Entre os modelos estacionários que não são gaussianos, o AUSTAL2000, desenvolvido pelo *Ingenieurbüro Janicke* em parceria com o Ministério Federal do Meio Ambiente da Alemanha, é um modelo Lagrangeano e recomendado para realizar estudos de dispersão no referido país (YAU *et al.*, 2004; JANICKE *et al.*, 2007).

2.3.2. Modelos não estacionários

Os modelos analíticos não estacionários recebem grande atenção científica há décadas, sendo geralmente deduzido a partir de métodos Lagrangeanos. A representação analítica das formulações Lagrangeanas de modelos de dispersão é conhecida como modelos Lagrangeanos de *puff* gaussianos. Estes modelos são particularmente úteis na obtenção de representações realistas da turbulência em fluidos, sendo esta uma grande vantagem em relação aos modelos estacionários.

Segundo De Andrade (2006), os modelos Lagrangeanos de *puff* gaussianos foram desenvolvidos com o intuito de reduzir o esforço computacional associado ao número excessivo de partículas em modelos Lagrangeanos numéricos. Nestes modelos, a evolução da pluma é representada por uma série de pacotes discretos (nuvens ou *puff*) de material poluente (VICENTINI, 2011). As trajetórias dos *puff* que se movem ao longo do tempo, seguem conforme um modelo Lagrangeano. Entretanto, o crescimento da nuvem (espalhamento da massa de poluente), que representa os efeitos dispersivos segue, na maioria dos modelos, uma função Gaussiana. Ou seja, a concentração de cada *puff* no receptor pode ser calculada utilizando a equação gaussiana básica. Desta forma, os seus deslocamentos são acompanhados ao longo do tempo e as simulações são conduzidas levando em conta as variações no tempo e espaço das condições meteorológicas (SASTRE *et al.*, 2005; DOURADO, 2007; DE MELO *et al.*, 2011). Apesar de ser a forma mais realista na representação da dispersão dos poluentes, as formulações Lagrangeanas possuem sua

aplicabilidade dificultada por necessitar de um campo de velocidades tridimensional do domínio de modelagem. A Equação 9 representa a formulação analítica básica de cálculo de um modelo tipo *puff* (SEINFELD e PANDIS, 2006).

De acordo com Seinfeld e Pandis (2006), se for considerado que a fonte é contínua (emite poluente continuamente com uma mesma taxa de emissão) e se for realizada a integral da Equação 9, assumindo o caso ideal onde o tempo de percurso dos *puffs* tende ao infinito e a turbulência é homogênea e estacionária, obtém-se uma equação idêntica a Equação 7. Ou seja, em condições estacionárias os modelos de *puff* e gaussiano convergem. Um ponto importante pode ser observado na Equação 5, onde a velocidade do vento desaparece do denominador. Assim, ao contrário da Equação 7, é possível utilizar a formulação de *puff* gaussianos em situações com velocidades próximas a zero sem que hajam resultados discrepantes ou indeterminações. Uma dedução detalhada da Equação 9 pode ser encontrada em Seinfeld e Pandis (2006).

$$C_{(x,y,z,t)} = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \cdot \exp\left(-\frac{(x-x'-\bar{u}(t-t'))^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y-y')^2}{2\sigma_y^2}\right) \cdot \left[\exp\left(-\frac{(z-z')^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z-z')^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] \quad (9)$$

Onde, $C_{(x,y,z,t)}$ é a concentração em ($g.m^{-3}$); Q é a taxa de emissão (g/s) de poluente no *puff*; x' , y' e z' representam a posição inicial do *puff*, tendo como referência a direção do vento (m); x , y e z é a posição do receptor tendo como referência a direção do vento (m); σ_x , σ_y , σ_z os coeficientes de dispersão na direção x , y e z (m); \bar{u} é a velocidade média do vento na altura do *puff* ($m.s^{-1}$) e $t-t'$ é o tempo de percurso do *puff*(s).

O espalhamento do *puff* (σ_x , σ_y , σ_z) pode ser obtido de forma similar aos coeficientes de dispersão dos modelos gaussianos tradicionais (σ_y e σ_z). A dispersão no eixo x (σ_x) em modelos lagrangeanos de *puff* é assumida como igual a do eixo y , ou seja, $\sigma_x = \sigma_y$.

O *Gaussian Integrated Puff model* (INPUFF) é um modelo Lagrangeano de *puff* gaussiano que considera variações temporais e espaciais do vento, flutuações das emissões de fontes pontuais, efeito de rebaixamento da pluma no topo da chaminé (*stacktip downwash*). No entanto, esse modelo não inclui efeitos de edificações e terrenos complexos, processos de remoção, entre outros (CHANG *et al.*, 1998).

O CALPUFF é um outro exemplo de modelo Lagrangeano de *puff* gaussiano, desenvolvido e recomendado pela US EPA para estimativas em distâncias superiores a 50 quilômetros. Ele possui diversas vantagens em relação ao INPUFF, pois considera efeito de obstáculos, terrenos complexos, reações na atmosfera, etc.(CHANG *et al.*, 1998).

O modelo Hybrid Single Particle Lagrangian Integrated Trajectory Model (HYSPLIT) também é um exemplo de modelo de Puff, desenvolvido em conjunto pelo ARL - *Air Resources Laboratory*, pertencente ao NOAA (*National Oceanic and Atmospheric Administration*), e pelo Departamento Australiano de Meteorologia (DRAXLER *et al.*, 2012). Apesar de já ser reconhecido para o cálculo de dispersão e trajetória de poluentes em longas distâncias (HOINASKI *et al.*, 2013a; HOINASKI *et al.*, 2013b), o HYSPLIT não inclui efeitos de edificações, terrenos complexos e sua aplicação para fins regulatórios foi pouco testada. Até o momento, poucos estudos em pequena escala espacial, como os de Mariano *et al.* (2006), podem ser encontrados na bibliografia.

2.4. COEFICIENTES DE DISPERSÃO

O ponto chave de modelos Gaussianos e de *Puff* é a determinação dos termos σ_y e σ_z , que representam o espalhamento da pluma no eixo horizontal e vertical em relação a direção média do vento. Diversos autores (HÖGSTRÖM, 1964; DRAXLER, 1976; PASQUILL, 1976; IRWIN, 1983; TURNER, 1997) definem os coeficientes de dispersão (σ_y e σ_z) como uma função, principalmente, da distância e da turbulência atmosférica.

De acordo com Sutton (1932), um dos primeiros pesquisadores que apresentaram teorias sobre a dispersão de poluentes por movimentações turbulentas foi Taylor, em 1915. Este último pesquisador estudou os movimentos aleatórios que causam desvios na trajetória de partículas, em tempos consecutivos. Em uma abordagem puramente estatística, este pesquisador deduziu a Equação 10, que representa a distância percorrida por uma partícula em um fluido.

$$[X^2] = 2[E^2] \int_0^T \int_0^t R_\xi d\xi dt \quad (10)$$

Em que, E é energia média do fluido em movimento; R_ξ é o coeficiente de correlação entre deslocamento de uma partícula em qualquer instante e a movimentação desta mesma partícula após uma parcela ξ do tempo T . Conhecida a distância X , é possível determinar o desvio das partículas em relação a sua posição média, de acordo com a Equação 11.

$$\sigma_{(X)} = \sqrt{\left(2[E^2] \int_0^T \int_0^t R_\xi d\xi dt\right)} \quad (11)$$

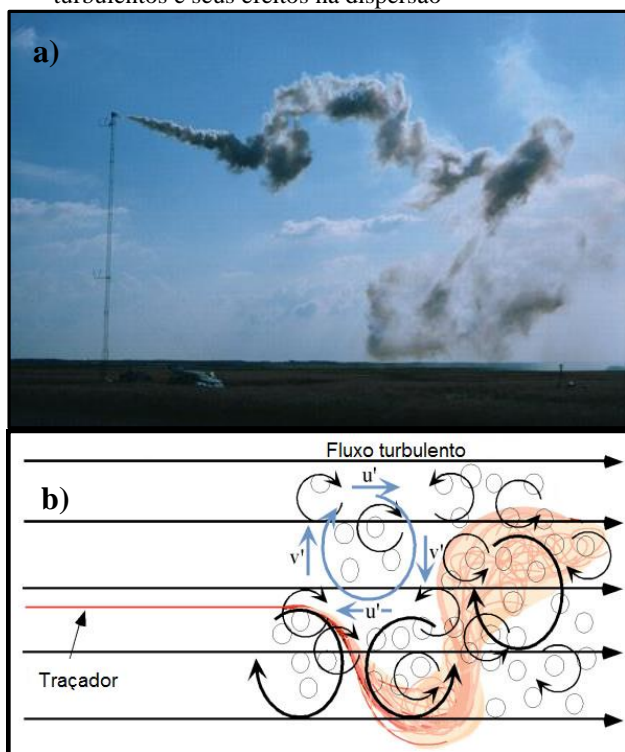
Para que seja possível empregar as equações de Taylor na dispersão de poluentes é necessário assumir uma forma para R_ξ . A hipótese mais real para o caso é assumir $R_\xi \rightarrow 0$ para $\xi \rightarrow \infty$. Estas simplificações significam que após um período prolongado de tempo, o deslocamento das partículas não é influenciada pela sua condição inicial. Por motivos de simplificação, as teorias de Fick (difusão molecular) e Taylor (difusão turbulenta) assumem que R_ξ é uma propriedade constante, onde a diferença entre elas reside na escala do fenômeno. A dispersão em ambos os casos é dada pela Equação 12, sendo K da ordem de $10^{-1} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, em escala molecular e 10^2 a $10^{11} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, no caso da difusão em um fluido turbulento (SUTTON, 1932).

$$\sigma^2 = 2Kt \quad (12)$$

Sutton (1932) explica que o ponto fraco da metodologia de Taylor está na inabilidade de generalizar a dispersão dos poluentes nas diferentes escalas turbulentas da atmosfera. De acordo com Sutton, os valores de K podem variar consideravelmente, dependendo da escala do fenômeno e da distância em relação a sua fonte de emissão. A influência das diferentes escalas turbulentas presentes na atmosfera pode ser verificada na dispersão vertical das partículas emitidas por uma chaminé da Figura 4 a). Em um primeiro instante a dispersão é dominada por escalas turbulentas pequenas. Ao se distanciar da fonte, a pluma toma uma determinada dimensão que passa a sofrer influência de escalas maiores. Assim, é comum que a condição da pluma de dispersão seja de fato diferente da sua forma inicial. Portanto, as teorias de Fick e Taylor (K assumido como constante) são aplicáveis somente para casos específicos de turbulência homogênea, onde os vórtices (escala turbulenta) são do mesmo tamanho. A Figura 4 b) exemplifica a ação dos vórtices turbulentos na dispersão lateral dos poluentes, onde

u' é a componente da velocidade na direção do vento e v' a componente horizontal/lateral. Nota-se que os vórtices maiores que a dimensão da pluma alteram a posição da mesma (para cima e para baixo), enquanto os vórtices menores dispersam os poluentes. Tanto a dispersão lateral quanto a vertical são influenciadas pelas escalas turbulentas maiores, que por sua vez se intensificam com o aumento da energia turbulenta. Conforme comentado no item 2.1, a energia turbulenta advem do fluxo de calor e também do cisalhamento do vento.

Figura 4: Exemplo de influência de diferentes escalas turbulentas na dispersão dos poluentes. a) dispersão real de uma pluma. b) vórtices turbulentos e seus efeitos na dispersão



Fonte://kodu.ut.ee/~olli/eutr/html/htmlBook_14.html

De acordo com Hay e Pasquill (1957), é extremamente complexo, se não impossível, encontrar uma forma matemática para R_{ξ} que se aplique na dispersão de poluentes na atmosfera. Estes

pesquisadores comentam que R_ξ pode ser especificado de forma intuitiva (ex: função exponencial ou potência) ou experimental (através de observações). Por este motivo, as formulações dos coeficientes de dispersão são obtidas de forma empírica ou semi-empírica, com o auxílio de observações do espalhamento das plumas em campo (DRAXLER, 1976; PASQUILL, 1976).

Uma das primeiras metodologias a serem difundidas para a obtenção dos coeficientes de dispersão foi desenvolvida por Pasquill em 1961 (PASQUILL, 1961 *apud* GIFFORD, 1968). Tais formulações, amplamente difundidas, foram derivadas empiricamente a partir de medições do espalhamento da pluma, utilizando uma fonte de emissão localizada ao nível do solo e diversos medidores posicionados formando arcos concêntricos à fonte. As chamadas curvas de Pasquill, originadas deste estudo, ainda são utilizadas por diversos softwares de estimativa de dispersão de poluentes, como o SCREEN3, COMPLEX I, Stink, ISC3 e o *Tropos Impacts*. Um detalhamento sobre o método de Pasquill e adaptações do mesmo por Gifford e Turner pode ser encontrado no Anexo 1.

A utilização de equações totalmente empíricas, como as de Pasquill, se restringiam a algumas condições atmosféricas. De acordo com Draxler (1976), com o refinamento das técnicas de modelagem surgiu a necessidade de possuir um método consistente com a teoria da difusão de Taylor e que se aplicasse a diversas situações. Assim, foram desenvolvidas formulações mais complexas (semi-empíricas) que foram incorporadas pelos modelos mais robustos como o AERMOD, CALPUFF, INPUFF, ADMS, SCIPUFF e HYSPLIT. Estes últimos modelos possuem abordagens mais completas na determinação de tais coeficientes, onde são mescladas contribuições de diversos autores para parametrizar a turbulência e a dispersão na camada limite. Estes métodos são baseados em uma formulação elaborada por Pasquill (1971 *apud* DRAXLER, 1975), dada pela Equação 13. Esta última equação é deduzida a partir da teoria de Taylor, assumindo E igual a variação da velocidade lateral (σ_v) e vertical (σ_w) da velocidade do vento.

$$\sigma_{y,z} = \sigma_{v,w} T f_{1,2} \left(T/t_L \right) \quad (13)$$

Em que os índices $\sigma_{y,z}$ representam os coeficientes de dispersão lateral (y) e vertical (z), $\sigma_{v,w}$ o desvio padrão da velocidade lateral (v) e vertical (w) a direção média do vento, $f_{1,2}$ uma função baseada em T

(tempo de percurso da fonte até o receptor) e a escala de tempo Lagrangeana (*Lagrangian Time Scale* - t_L). t_L é função da autocorrelação R_ξ , introduzida por Taylor (Equação 14).

$$t_L = \int_0^x R_\xi d\xi \quad (14)$$

A integral da Equação 14 é uma medida quantitativa do intervalo de tempo em que a velocidade de uma partícula possui relação com sua condição anterior (CHOI *et al.* 2004). Segundo Venkatran et al. (1984), t_L pode ser escrito como uma função da escala da turbulência e do desvio padrão da velocidade do vento (σ_v), segundo a relação dada pela Equação 15:

$$t_L = l/\sigma_v \quad (15)$$

Onde, l representa a escala da turbulência lateral. Este último parâmetro representa a dimensão da maior escala turbulenta ou vórtice que contém energia em um fluido turbulento.

Hanna (1984) relata que o desenvolvimento de métodos para estimar t_L é importante para que a estimativa da dispersão de plumas seja realizada com eficiência. Este último autor encontrou bons resultados na determinação do espalhamento de pluma ao utilizar t_L como um fator de ajuste nos modelos. Segundo Hanna (1984), em muitos casos t_L possui valores maiores do que o esperado devido a presença de vórtices turbulentos maiores do que a dimensão da pluma. Devido as tecnologias disponíveis, atualmente já é possível estimar t_L com resolução adequada através de métodos computacionais e experimentos em escala laboratorial, como os de Xia *et al.* (2013).

2.4.1. Estimativa dos coeficientes de dispersão no AERMOD.

O AERMOD utiliza uma forma empírica para representar f_1 e f_2 (Equação 13). A dispersão lateral no AERMOD é baseada na Equação 13 e possui representação analítica dada pela Equação 16.

$$\sigma_y = \frac{(\sigma_v x / \tilde{u})}{\left(1 + \frac{x/\tilde{u}}{2t_L}\right)^p} \quad (16)$$

Onde $p = 0,5$; \tilde{u} é a velocidade do vento; σ_v é o desvio padrão da velocidade lateral do vento; e t_L é escala de tempo lagrangeana.

Aplicações preliminares da Equação 16, realizadas durante as avaliações iniciais do AERMOD apresentaram resultados discrepantes quando comparados aos dados observados durante o projeto Prairie Grass (base de dados utilizada para validar o modelo) (CIMORELLI *et al.*, 2005). De acordo com Cimorelli *et al.* (2005) a dispersão lateral não apresentou boa correspondência com os dados medidos. Assim, a expressão da dispersão lateral foi reformulada para que os dados simulados se ajustassem aos dados observados.

Assumindo t_L como l/σ_v permite que a Equação 16 seja reescrita em termos de uma distância X adimensional, resultando na Equação 17, (CIMORELLI *et al.*, 2005).

$$\sigma_y = \frac{(\sigma_v x)}{\tilde{u}(1 + \alpha X)^p} \quad (17)$$

Onde $X = \sigma_v x / \tilde{u} z_i$; $\alpha = z_i / l$. e z_i é a altura da camada limite.

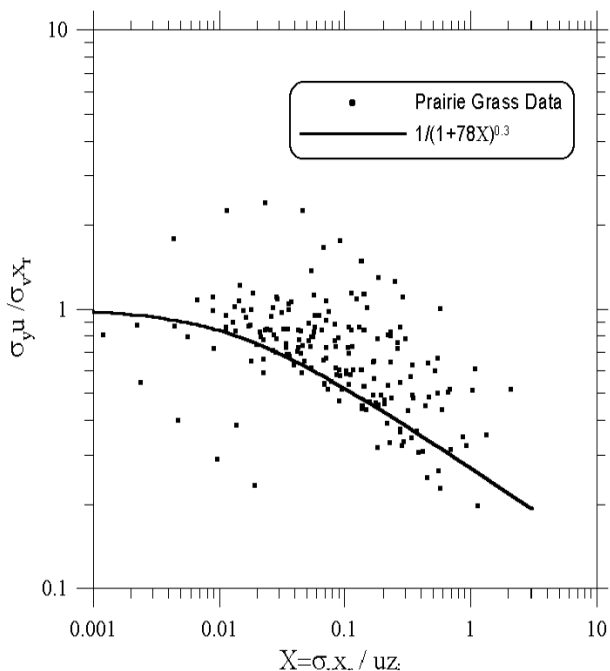
Usando o conjunto de dados fornecidos pelo projeto Prairie Grass com condições atmosféricas estáveis e instáveis, foi alcançado uma maior aproximação entre dados observados e modelados quando os parâmetros α e p foram ajustados em 78 e 0,3, respectivamente (Equação 17 -

Figura 5). O estudo da conformidade entre dados simulados e observados pode ser encontrado no trabalho conduzido por Perry *et al.* (2005).

De acordo com o manual do AERMOD, o coeficiente α é tratado como um parâmetro empírico. O ajuste assumido pelo AERMOD (α e p ajustados em 78 e 0,3, respectivamente) tende a se aproximar da parte inferior da distribuição dos dados observados no experimento Prairie Grass (Figura 5)

O estudo Prairie Grass foi conduzido em área rural, com relevo plano, onde um gás traçador (SO_2) era emitido a 0,46 metros do solo. O experimento contava com duas torres meteorológicas e analisadores de gases, dispostos em raios de 50 a 800 metros da fonte. Durante sua execução, a amostragem era efetuada a cada 10 minutos (BARAD, 1958; PAINE *et al.*, 1998).

Figura 5: Dispersão lateral (σ_y) como função de X . Dados extraídos do experimento Prairie Grass. Ajuste entre coeficiente utilizado no AERMOD e dados observados.



Fonte: USEPA (2004).

Como pode ser visto na Equação 17, o parâmetro σ_v exerce grande influência na determinação da dispersão lateral da pluma (TURNER, 1986; WEBER, 1997, IWIN, *et al.* 2007). Essa propriedade pode ser obtida através de medições ou estimativas. Como σ_v^4 , geralmente, não é mensurado por estações meteorológicas convencionais, é necessário estimá-lo para que σ_y seja determinado. O método de estimativa de σ_v pelo AERMOD pode ser encontrada no Anexo 1.

⁴ Pode ser medido por anemômetros sônicos.

Tratamento da flutuação do eixo central da pluma no AERMOD:

O AERMOD foi desenvolvido com o propósito de estimar concentrações médias em períodos superiores a uma hora, Tempo de Média (TM) que os principais poluentes regulamentados pela legislação norte americana são mensurados. O material particulado, por exemplo, é regulamentado para TM igual a 24 horas. O TM também representa o período em que um indivíduo pode ser exposto sem que haja danos. As concentrações máximas e seus respectivos tempos de média estabelecidos pela US EPA podem ser verificados no site: <http://www.epa.gov/air/criteria.html>.

Como no AERMOD σ_y foi calibrado para estimar a dispersão lateral em tempos de média de 10 minutos, os desenvolvedores do modelo adicionaram um tratamento referente alteração da posição da pluma em relação a direção média do vento que ocorre em 1 hora (CIMORELLI *et al*, 2005). O serpenteamento da pluma causa o aumento da dispersão lateral ao serem realizadas médias em intervalos de tempo maiores. Este incremento é considerado no modelo através da seguinte interpolação presente na Equação 18:

$$C = C_{ch} \left(1 - \frac{\sigma_r^2}{\sigma_h^2}\right) + C_R \left(\frac{\sigma_r^2}{\sigma_h^2}\right) \quad (18)$$

Onde, C_{ch} representa a concentração da pluma estimada por um modelo gaussiano convencional (Equação 19) e C_R a concentração de considerando os efeitos aleatórios da modificação da posição do centro da pluma (Equação 20). Os parâmetros σ_h e σ_r são as componentes horizontais (total) e aleatórias da energia do vento. Estes últimos servem como fatores de ponderação na Equação 18 e são estimados pelas equações 21 e 22.

$$C_{ch} = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_z} \times \left[\frac{1}{\sigma_y} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \right] \times \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\langle \exp\left[-\frac{(z-h_{es}-2mz_{ieff})^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h_{es}+2mz_{ieff})^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\rangle \quad (19)$$

$$C_R = \frac{Q}{2\pi\bar{u}\sigma_z} \times \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_r} \right] \times \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\langle \exp\left[-\frac{(z-h_{es}-2mz_{ieff})^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h_{es}+2mz_{ieff})^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\rangle \quad (20)$$

$$\sigma_h^2 = 2\sigma_v^2 + \bar{u}^2 \quad (21)$$

$$\sigma_r^2 = 2\sigma_v^2 + \bar{u}^2 \cdot \left[1 - \exp\left(-x_r/T_r \bar{u}\right)\right] \quad (22)$$

sendo, h_{es} a altura efetiva da pluma, z_{ieff} a altura da camada de mistura x_r a distância em linha reta entre a fonte e o receptor e T_r é uma escala de tempo estabelecida como igual a 24h. A energia média do vento é dada pela Equação 23:

$$\bar{u}^2 = \tilde{u}^2 - 2\sigma_v^2 \quad (23)$$

Correção das estimativas na presença de obstáculos pelo AERMOD:

Um fator que pode interferir na qualidade das estimativas da dispersão lateral por modelos é a presença de obstáculos, que por sua vez podem alterar a turbulência entre a fonte e os receptores. Para corrigir as estimativas da dispersão em presença de obstáculos, o algoritmo *Plume Rise Model Enhancements* –PRIME pode ser acoplado no AERMOD. O respectivo algoritmo descreve dois aspectos fundamentais causados pela presença de obstáculos: rebaixamento da pluma devido a alteração do fluxo e aumento da dispersão causada pela intensificação da turbulência após o obstáculo (CIMORELLI *et al.*, 2005). Uma descrição detalhada do PRIME pode ser encontrada em Schulman *et al.*(2000) e sua implementação no AERMOD em Cimorelli *et al.* (2005).

2.4.2. Estimativa dos coeficientes de dispersão em outros modelos

Além do AERMOD, o CALPUFF (método de Draxler) também utiliza uma forma empírica para representar f_1 e f_2 , que pode ser encontrada no Anexo 1. Assim como o AERMOD, o CALPUFF também pode ser acoplado ao algoritmo PRIME de forma a incluir os efeitos da presença de obstáculos na dispersão dos poluentes.

Os autores dos principais modelos de dispersão, bem como suas respectivas formulações de σ_y e σ_z estão presentes no Quadro 1. O SCIPUFF, listado como modelo alternativo pela US EPA, adota uma função exponencial para f , desenvolvida por Donaldson (1973) e Lewellen (1977).

Irwin (1983), comparou o desempenho dos métodos de estimativa de coeficientes de dispersão semi-empíricos, como o de

Draxler (1975) (utilizado pelo CALPUFF) e empíricos, como o de Pasquill-Gifford. O autor relata que o método de Draxler apresentou os menores erros quando comparados às observações. Os resultados confirmam a evolução das técnicas de determinação do espalhamento de plumas em modelos de dispersão. No entanto, as mesmas ainda possuem limitações nas estimativas em tempos de média curtos, como a previsão de maus odores e poluentes com elevada toxicidade.

Högström, em 1964, desenvolveu o primeiro experimento tentando encontrar coeficientes de dispersão mais adequados para prever eventos de curta duração temporal. Tendo conhecimento disso, Beaman (1988), Mussio *et al.* (2001) e De Melo Lisboa *et al.* (2006), desenvolveram modelos gaussianos de plumas flutuantes baseados nas teorias da flutuação da pluma de Gifford (1959) e estimativa de coeficientes de dispersão de Högström (1964) para aplicação na dispersão de odores. As formulações elaboradas por Högström podem ser encontradas no Anexo 1.

Alguns modelos, como o AODM e do SYMUS'97 possuem formulações próprias para a determinação dos coeficientes de dispersão.

Quadro 1: Modelos de dispersão mais utilizados em avaliações de impactos odorantes.

Classificação do modelo	Sigla	Desenvolvedor	Coefficiente de dispersão
Gaussiano	ADMS	Cambridge Environmental Research Consultants (CERC)	Baseado em Weil (1985), Deardorff e Willis (1975), Pasquill (1971) e Briggs (1985)
	AERMOD	AMS ⁵ /US EPA	Abordagem semelhante ao ADMS baseada em Taylor (1921), Pasquill (1976), Venkatram <i>et al.</i> (1984), Venkatram (1992) e Weil (1997)
	AODM	Schauberger <i>et al.</i> (2000)	Baseado em Reuther (1970)
	AUSPLUME	Victoria/AUS EPA ⁶	Baseado em Gifford(1968)
	ISC3	US EPA	Baseado emTurner (1967)
	Stink	Smith (1995)	Baseado em Gifford(1968) e Pasquill (1976)
	SCREEN3 e COMPLEX I ⁷	US EPA	Baseado emTurner (1967)
	Tropos <i>Impact</i>	ODOTECH, Canada	Baseado em Gifford(1968) e Pasquill (1976)
	SYMOS'97	<i>Czech Hydrometeorological Institute</i>	Baseado em Bubnik <i>et al.</i> (1998)
Pluma flutuante		Gifford (1959)	Baseado em Högström (1964)
Lagrangeano de partícula	AUSTAL2000	<i>Janicke Consulting</i>	Baseado emTaylor (1921) e na VDI(2000)
<i>Puff</i>	CALPUFF	<i>Earth Tech/ US EPA</i>	Baseado em Draxler (1976), Pasquill (1976), Perry (1992) e Venkatram <i>et al.</i> (1984)
	INPUFF	US EPA	Baseado em Turner (1967), Draxler (1976) e Irwin (1983),
	SCIPUFF	Titan Corporation	Donaldson (1973) e Lewellen (1977)
	HYSPLIT	ARL ⁸ /NOAA ⁹)	Baseado em Troen e Mahrt (1986), Beljaars e Holtslag(1991) e Holtslag e Boville (1993)

* Não foi encontrada referência com a descrição detalhada do modelo.

⁵American Meteorological Society

⁶Australian Environmental Protection Agency

⁷ Modelos simplificados considerados como “Screening models”

⁸Air resources Laboratory

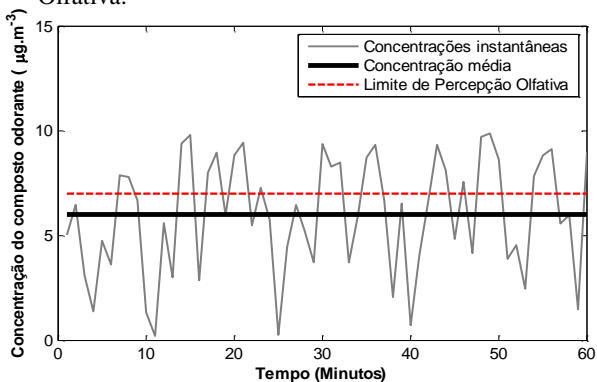
⁹National Oceanic and Atmospheric Administration

2.5. LIMITAÇÕES DOS MODELOS PARA TEMPOS DE MÉDIA CURTOS

Para muitos autores (DE MELO LISBOA, 1996; MUSSIO *et al.*, 2001; DREW *et al.*, 2007) a flutuação da concentração ao longo do tempo é um ponto crítico no cálculo da dispersão de gases odorantes e poluentes tóxicos. Este último fator deve ser considerado, principalmente pelo caráter instantâneo de tais impactos. A percepção dos odores pelos humanos, por exemplo, ocorre em questão de segundos (em torno de 4 segundos).

A maioria dos modelos analíticos calcula concentrações médias para um período de tempo variando entre 10 minutos e 1 hora. Isto implica que as flutuações de curto período (instantâneas) são ignoradas, conforme pode-se observar esquematicamente na Figura 6. A curva irregular representa a concentração instantânea de um gás odorante (ou poluente tóxico) em um local à sotavento de uma chaminé. A concentração referente ao limite de percepção do odor¹⁰ deste mesmo gás odorante, assim como o valor da concentração média calculada pelo modelo gaussiano no período estudado, são igualmente indicadas sobre esta figura. As concentrações instantâneas ultrapassam diversas vezes o limite de percepção do odor em uma hora, apesar da concentração média horária estar abaixo deste.

Figura 6: Comparação entre concentrações médias calculadas por um modelo gaussiano, flutuações instantâneas e Limite de Percepção Olfativa.



Fonte: Autor.

¹⁰ Para poluentes tóxicos este valor poderia ser considerado como o limite de exposição.

Segundo Venkatram (1981) a natureza estocástica da variação das concentrações instantâneas observadas impõe limitações na habilidade de realizar previsões por modelos. Essas flutuações ocorrem devido à extrema sensibilidade da turbulência atmosférica às condições iniciais e de contorno, sendo assim um processo complexo de ser descrito (POPE, 2000). Ou seja, ainda não é possível prever precisamente o valor das concentrações instantâneas através de modelos. O melhor que se pode fazer é determinar tendências médias da dispersão dos poluentes em um determinado local e tempo (IRWIN *et al.*, 2007). Este é um dos motivos para que os problemas de dispersão de poluentes em modelos analíticos sejam comumente abordados como *ensemble averages*. Essa é a denominação dada para um conjunto de vários sistemas que, apesar de terem condições iniciais diferentes, são considerados como idênticos.

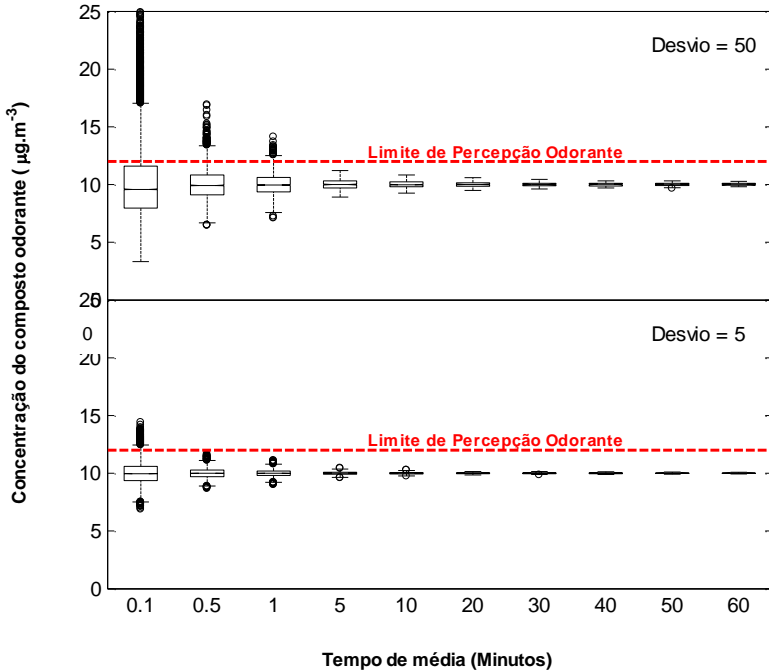
A Figura 7 ilustra a influência dos tempos de média na detecção de concentrações máximas em curto período. Para desenvolvê-la, foram geradas aleatoriamente 10.000 concentrações a cada segundo de um gás odorante através de uma distribuição log-normal idealizada. De acordo com Irwin (2007), as variações das concentrações de poluentes no ar geralmente seguem uma distribuição log-normal. Neste caso, a média da distribuição foi estabelecida como $10\mu\text{g}/\text{m}^3$ e desvios padrões de 5 e $50\mu\text{g}/\text{m}^3$. Concentrações médias foram calculadas para tempos de 0,1; 0,5; 1,5; 10; 20; 30; 40; 50 e 60 minutos. A variação dos desvios na geração dos números aleatórios teve intuito de simular a influência da turbulência atmosférica na variabilidade das concentrações dos poluentes no ar em torno da média. Schauberguer *et al.* (2012) relatam que as concentrações de pico variam de acordo com a estabilidade atmosférica, podendo alcançar valores até 87 vezes maiores que a média horária, em condições instáveis. Em atmosfera estável, concentrações de pico são da mesma ordem ou até 3 vezes maiores que os valores médios horários. Neste exemplo, foi estabelecido que o Limite de Percepção Odorante (LPO) do respectivo gás é de $12\mu\text{g}/\text{m}^3$. Assumindo estas condições, a Figura 7 mostra que em tempos de média superiores a 1 minuto as concentrações não ultrapassam o LPO e, portanto, os odores não causam incômodos. Entretanto, em períodos menores as concentrações médias são superiores e tendem a exceder com maior frequência o LPO à medida que o tempo de média diminui. Também pode ser verificado que existe a probabilidade de serem encontrados eventos que excedem o LPO mesmo quando as condições são mais estáveis (desvio igual a 5). Nesta última situação, somente seriam previstas concentrações que superam o LPO caso as médias fossem

calculadas a cada 6 segundos (0,1 minutos). Verifica-se também que ao ser elevado o tempo de média a probabilidade de serem encontrados valor extremos (*outliers*) se reduz.

No caso dos odores, a frequência de ocorrência de eventos acima do LPO também é um fator importante neste tipo de impacto. Quanto mais frequente é a percepção do odor, maior é o impacto. Em avaliações de impacto odorante, ainda deve ser levado em conta os fatores relativos à percepção e julgamento dos receptores. De Melo Lisboa *et al.* (2006) em seu artigo, sugerem a incorporação de fatores de correção relativos a característica do odor emitido e sua respectiva percepção. Este procedimento deve ser realizado uma vez que a diluição do odor não pode ser considerada como a diluição de um composto químico. Cada emissão odorante possui sua peculiaridade quando diluído no ar, sendo que para odores persistentes a intensidade e incômodo causado pela percepção do odor varia menos à medida em que são dispersados.

Já no caso dos poluentes tóxicos e inflamáveis, uma única excedência do limite de toxicidade ou explosividade pode causar danos irreversíveis (NIOSH, 1994).

Figura 7: Boxplot das concentrações em diferentes tempos de média. Desvio igual a 50 representa uma condição atmosférica instável e igual a 5 estável.

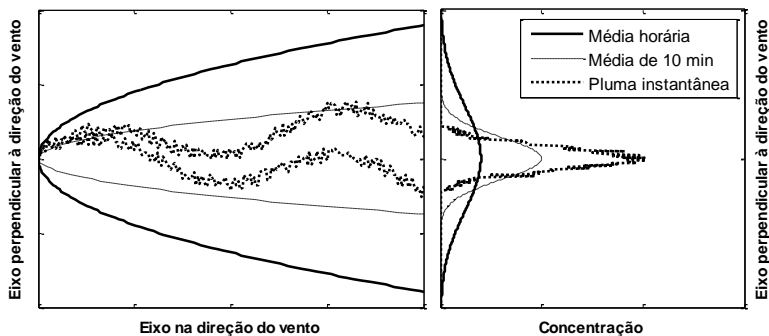


Fonte: Autor.

A Figura 8 mostra um exemplo do efeito da realização de médias de 10 minutos (linha tracejada) e uma hora (linha contínua) no formato das plumas, em contraste com a situação instantânea/real (linha pontilhada) que ocorre em questão de segundos. O lado esquerdo da Figura 8 representa uma vista em planta das plumas e o direito um corte perpendicular à direção do vento, a uma determinada distância à sotavento da chaminé. Pode ser visto nesta mesma figura que tanto a posição do centro, como as concentrações da pluma instantânea flutuam e, frequentemente, os seus valores não coincidem com as médias, dando auxílio a interpretação das informações referentes a Figura 6. Vale lembrar que existem duas movimentações turbulentas distintas, uma responsável pela dispersão da pluma e a outra pela alteração do eixo central da mesma (Figura 4). As movimentações turbulentas em pequenas escalas são os agentes da dispersão, já as escalas turbulentas

maiores são responsáveis pelas alterações da posição do eixo da pluma (SEINFELD e PANDIS, 2006; IRWIN *et al.*, 2007).

Figura 8: Representação da dispersão horizontal da pluma considerando médias horárias, de 10 minutos e da pluma instantânea. Fronteiras das plumas calculadas em média horária e de 10min e pluma instantânea.



Fonte: Adaptado de Seinfeld e Pandis (2006).

Como pode ser verificado na Figura 8, a medida que vai sendo elevado o tempo de média o formato da pluma se torna mais regular e suave, pois os efeitos das oscilações do centro da pluma são incorporados no espalhamento total da mesma e, conseqüentemente, não são mais percebidos. Nota-se que com a inclusão da flutuação do centro da pluma é adicionada uma parcela que não é responsável pela dispersão/diluição dos poluentes. Assim, ao ser elevado o tempo de média, a dispersão da pluma se torna maior e, conseqüentemente, as concentrações máximas são menores. Portanto, é comum que ocorram concentrações instantâneas maiores que as médias. Esta problemática é compartilhada pela maioria dos modelos de dispersão e tem como ponto crítico as estimativas da dispersão lateral e vertical. Hanna (1984) explica que as flutuações podem ocorrer devido a variações da concentração dentro da própria pluma como pela alteração do centro da mesma, sendo que a segunda é responsável pela maior parte da flutuação das concentrações em distâncias curtas.

Até a década de 70 diversas foram as formulações elaboradas para determinar o espalhamento da pluma de poluentes. No entanto, não são propícias para realizar estimativas em tempos de média inferiores a 10 minutos. Atualmente este problema ainda persiste, um vez que maior

parte dos modelos foi ajustado com base em experimentos que efetuaram medições em tempos de média superiores a 10 minutos. Tal tempo de média não permite estimar picos concentrações em intervalos curtos. Além disso, o interesse principal dos órgãos fiscalizadores é validar os modelos para o cálculo da dispersão de poluentes regulamentados em médias horárias, sendo suficiente a utilização de experimentos com medições em taxas de 10 minutos.

Para tentar suprir a deficiência em prever os picos de concentrações (em tempo menor que 10 e 60 minutos), diversos autores sugerem a utilização do fator pico/média (*peak to mean*) (Equações 24 e 25), desenvolvida por Turner (1994) (SCHAUBERGER *et al.*, 2001; SARKAR *et al.*, 2003; CAPELLI *et al.*, 2011; VIEIRA DE MELO *et al.*, 2012). Esta formulação objetiva estimar concentrações em um tempo de média inferior (t_p) em relação a média calculada pelo modelo. (t_m)

$$\frac{C_p}{C_m} = \left(\frac{t_p}{t_m}\right)^{-a} \quad (24)$$

$$\frac{\sigma_p}{\sigma_m} = \left(\frac{t_p}{t_m}\right)^a \quad (25)$$

Onde, C_p é o valor de pico da concentração no tempo t_p ; C_m é o valor médio da concentração no tempo t_m ; t_m é o tempo de amostragem usado no modelo gaussiano (10 minutos a 1 hora); e o expoente a é dependente da estabilidade atmosférica. Nota-se a modificação do sinal de a quando o Peak to Mean (P-M) é utilizado para corrigir a dispersão lateral. Assim, o valor utilizado para corrigir concentrações máximas e a dispersão lateral é o mesmo, entretanto, no primeiro é feita a multiplicação e no segundo a divisão.

Schauburger *et al.*(2012) sugerem em seu artigo valores do expoente a (entre 0 e 0,64) para diversas classes de estabilidade. Neste mesmo artigo é possível verificar que os valores do fator pico/média variam bastante, podendo elevar as concentrações médias entre 1 a aproximadamente 68 vezes o seu valor inicial. Estes mesmos autores ainda citam que os valores do fator P-M podem ser influenciados pela:

- Distância entre receptor e a fonte ou tempo de percurso da pluma;
- Distância horizontal do receptor em relação ao centro da pluma;
- Altura de emissão;

- Geometria da fonte (fonte volumétrica, área ou pontual).

Schauberger *et al.* (2000) desenvolveram uma equação que considera a distância no cálculo do fator P-M. Segundo o referido pesquisador, o valor do P-M desce a medida que a pluma se distancia da fonte. Esta relação é dada pela Equação 26:

$$PM(x) = 1 + (PM - 1) \cdot \exp\left(-0,7317 \cdot \frac{T}{t_L}\right) \quad (26)$$

Sendo, PM o fator calculado pela Equação 24, T o tempo de percurso e t_L o tempo da escala lagrangeana. Nota-se que na Equação 26 o valor do P-M segue uma função exponencial e reduz seu valor ao se distanciar da fonte. A Tabela 1 apresenta os valores do coeficiente a das Equações 24 e 25, para cada condição de estabilidade atmosférica (SMITH, 1973 *apud* SCHAUBERGER *et al.*, 2012)

Tabela 1: Valor do expoente a para cada condição de estabilidade atmosférica (SMITH, 1973 *apud* SCHAUBERGER *et al.*, 2012).

Condição atmosférica	Expoente a
Instável	0,64
Levemente instável	0,51
Neutra	0,38
Levemente estável	0,25
Estável	0,00
Muito estável	0,00

Pesquisadores (WANG *et al.*, 2006; DOURADO *et al.*, 2012) já verificaram a previsão dos picos de concentração, em tempos de média curtos, por modelos como o CALPUFF, ISC3, AERMOD. Em geral, segundo os autores, tanto o ISC3 quanto o CALPUFF e o AERMOD falham na previsão dos picos de concentrações, usando o fator P-M (Equação 24), principalmente devido a sensibilidade à qualidade dos dados de entrada e estimativas da dispersão lateral e vertical.

Uma abordagem diferenciada teve início nos estudos de Gifford, em 1959 e nos testes de Högström, em 1964. Este último conduziu uma série de experimentos, utilizando uma fonte de geração de pequenas plumas visíveis e as fotografou, a cada 30 segundos, para avaliar sua evolução à sotavento da emissão. Högström tinha o intuito de avaliar a

dispersão instantânea das plumas. Os testes deste pesquisador culminaram no desenvolvimento de coeficientes de dispersão adequados para tempos de média de 30 segundos. Assim, o autor determinou o espalhamento da pluma em relação ao seu próprio eixo em períodos menores que 10 minutos, diferentemente de como os demais coeficientes de dispersão foram elaborados. Este estudo possibilitou que modelos fossem aplicados para determinação de concentrações quase instantâneas de poluentes, sem necessidade de utilização do fator pico/média.

Fazendo o uso dos coeficientes de dispersão de Högström, boas aproximações foram obtidas por modelos de pluma flutuante da Equação 8, na previsão de concentrações de poluentes. Os resultados estão relatados nos trabalhos de Dourado (2007), Mussio *et al.* (2001) e De Melo Lisboa *et al.* (2006). De Melo Lisboa *et al.* (2006) também utilizaram tais coeficientes de dispersão em um modelo de *puff*. De acordo com o último pesquisador, este tipo de modelo é capaz de prever, com bastante eficiência, a frequência em que os odores são percebidos no entorno de um empreendimento emissor. No entanto, Högström (1972) relata que não é possível afirmar quanto a validade do seu próprio método, pois existem incertezas associadas ao espalhamento da pluma instantânea. O autor sugere adaptações do modelo de pluma flutuante de forma a sofisticar a descrição do processo (HÖGSTRÖM, 1972). Além disso, poucos foram os trabalhos como os de Dourado *et al.* (2014), que utilizam os coeficientes de Högström, considerando a influência de terrenos complexos ou presença de obstáculos. De Melo Lisboa *et al.* (1997) relata que e as dificuldades técnicas para a obtenção de uma base de dados compatível ao problema da dispersão de poluentes tóxicos e odorantes em muito tem dificultado o desenvolvimento e validação de modelos matemáticos para esta finalidade.

De acordo com Hanna, os modelos gaussiano (Equação 7) e de pluma flutuante (Equação 8) são fundamentalmente os mesmos, sendo diferenciados apenas pelos coeficientes de dispersão empregados em cada um dos métodos.

3. MATERIAIS E MÉTODO

Como o presente trabalho visa melhorar a eficiência do AERMOD no cálculo da dispersão lateral em tempos de média curtos, as seguintes etapas metodológicas foram conduzidas:

- **Avaliação de métodos de estimativa de coeficientes de dispersão em diferentes tempos de média:** Esta etapa teve o intuito de verificar qual dos métodos é mais adequado para prever em tempos de média curtos. Nesta avaliação os dados do experimento de Round Hill II foram utilizados.
- **Avaliação da influência da parametrização do desvio padrão da velocidade lateral do vento (σ_v) na estimativa da dispersão pelo AERMOD:** Essa análise foi realizada para verificar o reflexo dos erros na estimativa de σ_v na determinação da dispersão lateral (σ_y) do AERMOD. Assim como na primeira etapa metodológica, as observações do experimento de Round Hill II foram utilizadas.
- **Adaptação do coeficiente de dispersão lateral do AERMOD para previsão em tempos de média curtos:** Esta etapa foi realizada após ser verificado qual o método de estimativa de dispersão lateral se relacionava melhor com as observações em tempos de média curtos. Além disso, foi utilizado σ_v medido para evitar a propagação de erros que afetam na estimativa de σ_y . Tanto as adaptações propostas como uma posterior avaliação do modelo foram feitas utilizando os dados do experimento de Round Hill II
- **Validação do AERMOD adaptado no cálculo da dispersão de odores:** O resultado das avaliações e adaptações efetuadas nos itens anteriores culminam em uma nova formulação para determinar σ_y no AERMOD. No presente item, essa adaptação do AERMOD é testada/validada para o cálculo da dispersão lateral de odores, em tempo de média de 10 segundos e 1 minuto. A validação foi conduzida com base no experimento de Uttenweiller. Nesta validação as configurações do

AERMOD foram testadas na presença de obstáculo, com a implementação do algoritmo PRIME.

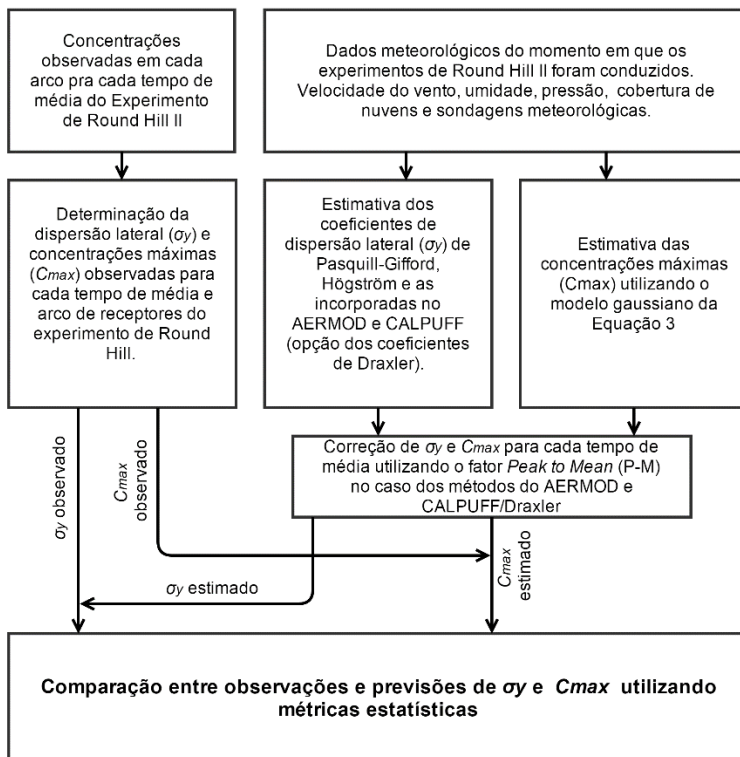
Os itens a seguir apresentam o detalhamento de cada etapa metodológica supracitada. Ressalta-se que deste momento adiante o desvio padrão da velocidade lateral do vento é representado pelo símbolo σ_v e o coeficiente de dispersão lateral por σ_y . O tempo de média (TM) retrata o tempo de integração de uma pluma de dispersão. É importante frisar que nas três primeiras etapas metodológicas são utilizadas as observações de Round Hill II, enquanto a última utiliza os dados de Uttenweiller.

3.1. AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE ESTIMATIVA DE COEFICIENTES DE DISPERSÃO EM DIFERENTES TEMPOS DE MÉDIA

As metodologias de estimativa de dispersão de plumas avaliadas foram as de Pasquill-Gifford, Högström e as incorporadas no AERMOD e CALPUFF (opção dos coeficientes de Draxler). Os modelos AERMOD e CALPUFF foram escolhidos por serem recomendados pela US EPA. Já o método desenvolvido por Pasquill-Gifford foi avaliado por ser amplamente difundido e empregado no ISC3 (modelo substituído pelo AERMOD). Entre as formulações existentes para estimar a dispersão de plumas, a de Högström foi a única desenvolvida com a finalidade de estimar concentrações em tempos de média curtos. A descrição detalhada de cada método pode ser encontrada em Seinfeld e Pandis (2006), Högström (1964), Cimorelli (2005) e Draxler (1976), respectivamente.

A Figura 9 apresenta o fluxograma da respectiva etapa metodológica. A qualidade das estimativas foi testada com base nos dados obtidos pelo experimento Round Hill II (CRAMER *et al.*, 1957). Nos itens a seguir são apresentados um detalhamento da base de dados de Round Hill II, bem como as metodologias utilizadas para determinar o coeficiente de dispersão lateral e concentrações máximas observadas. Também são apresentados os parâmetros estatísticos utilizados para avaliar o desempenho dos métodos de estimativas da dispersão lateral e concentrações máximas.

Figura 9: Fluxograma da etapa metodológica de avaliação de métodos de estimativa de coeficientes de dispersão em diferentes tempos de média.



Fonte: Autor .

3.1.1. Descrição do experimento de Round Hill II

O experimento de Round Hill II foi desenvolvido com o propósito de estudar a dispersão de poluentes na atmosfera em diferentes tempos de média. Um gás traçador (SO_2) era emitido constantemente por uma chaminé de 1,5 metros de altura e com saída horizontal. Medições da concentração de SO_2 à sotavento da chaminé foram realizadas em três arcos concêntricos a fonte, localizados a 50, 100 e 200 metros. Amostras de SO_2 foram coletadas, concomitantemente, nos primeiros 30 segundos, 3 minutos e 10 minutos. Ou seja, em cada ponto de medição existiam três medidores,

onde o primeiro coletava as amostras a cada 30 segundos, o segundo a cada 3 e o terceiro a cada 10 minutos. Foram utilizados de 90 a 150 coletores (de 30 a 50 em cada arco para cada tempo de média). Cada ponto de medição era espaçado de 1,5 a 3 graus (tendo como referência a fonte) e disposto a uma altura de 1,5 metros. Após as amostras serem coletadas por um sistema formado por uma bomba de sucção e impinger (frasco borbulhador), as mesmas foram analisadas em laboratório para determinar a concentração de SO_2 .

Ao todo, em Round Hill II, foram realizados 10 testes - de setembro a dezembro de 1957. Cada teste teve duração de 10 minutos. Assim, diferentemente das demais bases de dados disponíveis na literatura, os dados coletados no experimento de Round Hill II permitem avaliar a diferença entre a dispersão lateral nos tempos de média de 10; 3 e 0,5 minutos. Neste experimento também constavam medições meteorológicas de velocidade e direção do vento e temperatura. Os lançamentos do gás traçador ocorreram em uma variada gama de condições meteorológicas, sendo 4 durante (condições instáveis) o dia e 6 durante a noite (condições estáveis). O desvio padrão da direção do vento foi outro parâmetro meteorológico mensurado. A resolução dos dados meteorológicos foi a mesma da duração dos experimentos, ou seja, 10 minutos. A Figura 10 apresenta a localização do experimento de Round Hill II e a disposição dos arcos de medidores (receptores) em relação a fonte de emissão.

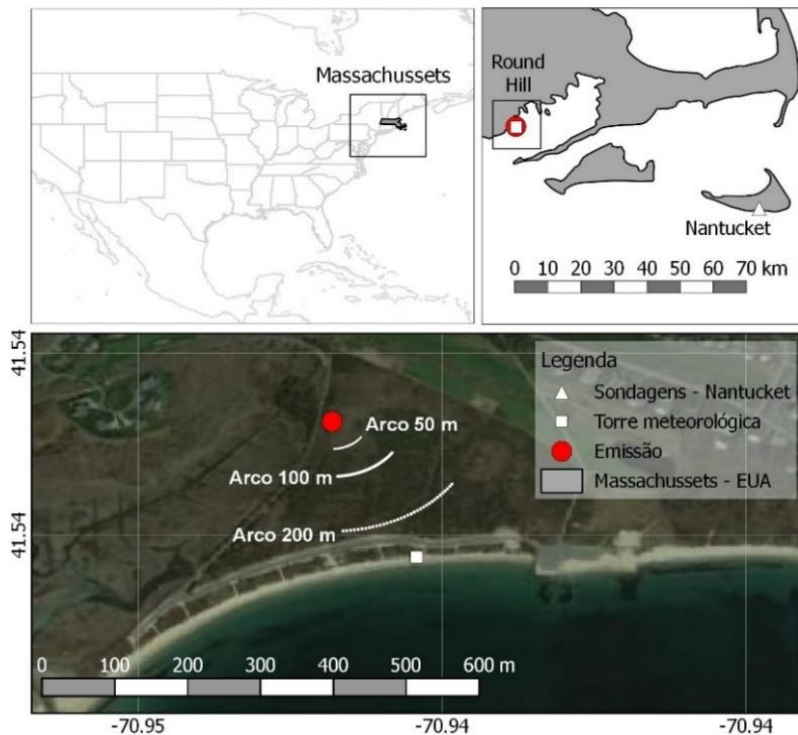
Para que fosse possível caracterizar a camada limite e, assim, estimar a dispersão pelo AERMOD e pelo método Draxler, foi necessário complementar as medições meteorológicas do experimento de Round Hill II com dados fornecidos pela estação meteorológica de superfície de Taunton¹¹, Massachusetts, de domínio do NOAA, localizada a menos de 50 km do local do experimento¹². Dados de sondagens da Ilha de Nantucket¹³, Massachusetts foram empregados para caracterizar a altura da camada limite. Estas medições foram utilizadas devido a inexistência de estações meteorológicas próximas ao local no período em que o experimento foi executado e pela necessidade de medições de perfil de temperatura em altos níveis, umidade, pressão, entre outros. A Figura 10 mostra a distância entre Round Hill e o local das sondagens meteorológicas (Ilha de Nantucket).

¹¹ Disponível em <http://www.ncdc.noaa.gov/most-popular-data#dsi-3505>

¹² Round Hill no estado de Massachusetts.

¹³ Nantucket fica a menos de 130 km do local onde o experimento foi realizado.

Figura 10: Localização do experimento de Round Hill II nos EUA. Disposição dos três arcos de receptores considerados (50, 100 e 200 metros) no primeiro experimento conduzido. Exemplo de funcionamento independente dos medidores para cada tempo de amostragem nos arcos.



Fonte: Autor .

3.1.2. Determinação da dispersão lateral e concentrações máximas observadas

A dispersão lateral observada em cada experimento foi obtida a partir do melhor ajuste entre as medições e uma função gaussiana teórica apresentada na Equação 27. Esta última equação também pode ser obtida a partir da Equação 7 (gaussiana) ao adotar z (altura do medidor de SO_2) e H (altura da pluma) iguais a 1,5 m, conforme o experimento de Round Hill II.

$$C_{(x,y)} = C_{max(x)} \cdot \exp\left(\frac{-(\mu-y)^2}{2\sigma_y^2}\right) \quad (27)$$

Na equação anterior, x e y são as distâncias nas direções longitudinal e transversal em relação a direção média do vento tendo como referência a chaminé; σ_y é a dispersão lateral; C_{max} é a concentração máxima em x na altura do arco de receptores (1,5 metros). Considerando as alturas de emissão e dos medidores em Round Hill iguais a 1,5 metros, C_{max} assume a forma dada pela Equação 28.

$$C_{max} = \frac{Q_s}{2\pi\sigma_y\sigma_z u} \left(\exp\left(\frac{-9}{2\sigma_z^2}\right) \right) \quad (28)$$

O μ na Equação 27 é a distância do centro de massa da curva gaussiana observada em relação ao eixo da direção média do vento. Nas estimativas por modelos gaussianos, o sistema de coordenadas é centrado na fonte e o eixo x coincide com o eixo da direção média do vento. Assim, o centro de massa da pluma estimada por um modelo gaussiano sempre está em $y=0$ e, por este motivo, μ é sempre igual a zero e não aparece na Equação 7.

Diante das considerações acima, assumiu-se, portanto, a hipótese de que as concentrações das plumas observadas em cada arco seguem uma distribuição gaussiana. A Figura 11 mostra um exemplo de melhor ajuste entre a curva gaussiana da Equação 27 e as observações. Pode ser visto na Figura 11 que C_{max} igual a $107,3 \text{ mg}\cdot\text{m}^{-3}$; σ_y igual a 15,8 metros e μ igual a 7,02 metros foram os parâmetros que permitiram o melhor ajuste da curva teórica (Equação 27) e observações de um experimento no arco de 50 metros, com medições feitas em tempo de média de 10 minutos.

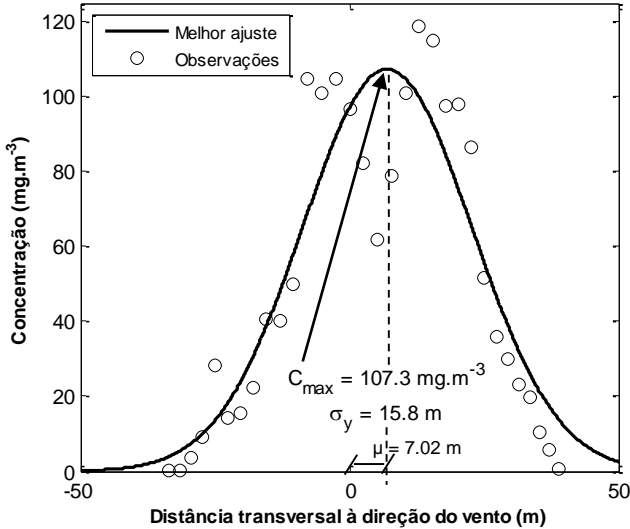
Para encontrar o melhor ajuste entre a curva gaussiana da Equação 27 e as observações, foi utilizado um algoritmo computacional baseado no método de mínimos quadrados não linear do software Matlab®, segundo a Equação 29. O critério de convergência adotado era atingido quando a alteração dos parâmetros fosse menor que 10^{-8} . Foram excluídos da análise os dados de σ_y , C_{max} e μ do experimento que não alcançaram o referido critério. A restrição de valores de μ e σ_y dentro dos limites do arco de receptores, também fez parte do controle de qualidade dos dados.

$$\min \left[\left\{ C_{(r,X,TM)_k} - C_{max(r,x,TM)} \cdot \exp \left(\frac{-(\mu_{(r,X,TM)} - y_k)^2}{2 \sigma_y^2(r,X,TM)} \right) \right\}^2 \right] \quad (29)$$

Onde, C é a concentração de SO_2 , r é o número do teste de Round Hill, X a distância do arco, TM o tempo de média considerado e k a posição do receptor ao longo do arco.

A partir da metodologia supracitada foram obtidos os valores de σ_y , C_{max} e μ para os três arcos de receptores (50, 100 e 200 metros) e para os três tempos de média (10,3 e 0,5 minutos).

Figura 11: Exemplo de melhor ajuste entre curva gaussiana (Equação 27) e uma das observações em Round Hill II no arco localizado a 50 metros de distância da fonte. Dispersão lateral (σ_y) e concentração máxima no arco (C_{max}) encontradas pelo método de mínimos quadrados não linear. μ é a distância do centro da distribuição da curva gaussiana observada em relação ao eixo da direção do vento



Fonte: Autor.

3.1.3. Técnicas estatísticas utilizadas para comparar observações e estimativas

A efetividade na determinação do coeficiente de dispersão lateral e concentrações máximas pelos métodos de Pasquill-Gifford, Högström e as incorporadas no AERMOD e CALPUFF (opção dos coeficientes de Draxler) foi feita pela comparação dos valores observados e modelados.

Os parâmetros estatísticos Bias (*Bias* - Equação 30), *Fractional Bias* (*FB* - Equação 31), *Normalized Mean Square Error* (*NMSE* - Equação 32), coeficiente de correlação de Spearman (ρ) e *Factor of two* (*FACT2* - Equação 33) foram utilizados para verificar a performance dos métodos de determinação dos coeficientes de dispersão na tentativa de estimar as observações em campo. O uso em conjunto destes parâmetros é essencial, pois cada um possui suas vantagens e desvantagens (CHANG *et al.*, 2004). *Bias* e *FB* são medidas úteis na

verificação de erros sistemáticos, no entanto, podem apresentar valores iguais a 0 (aproximação perfeita) também em ocasiões onde os erros se cancelam (equilíbrio entre erros positivos e negativos) (CHANG *et al.*, 2004). O que diferencia o *Bias* e o *FB* é a medição da diferença entre previsões e observações pelo primeiro e a estimativa da porcentagem dessas diferenças pelo segundo. Valores de *Bias* igual a 1 metro entre observações e previsões de σ_y indicam que o modelo superestimou em média em 1 metro as observações. Caso o valor de *Bias* fosse -2 metros, o modelo subestimaria em média em 2 metros. Já um *FB* de 0,2 ou 20%, revela uma superestimativa de em média 20% do valor das observações.

O *NMSE* abrange tanto erros sistemáticos quanto aleatórios, mas pode ser influenciado pela presença de valores extremos, mesmo quando ocorrem poucas vezes. Uma aproximação perfeita entre observações e previsões apresenta *NMSE* igual a 0 (CHANG *et al.*, 2004). O ρ reflete a relação entre variabilidades das observações e previsões, entretanto, é insensível a erros sistemáticos. Portanto, r pode apresentar valor ótimo e igual a 1 mesmo que exista *Bias* entre previsões e observações.

De acordo com Chang & Hanna (2004), o *FACT2* é provavelmente a medida mais robusta de performance, devido a sua pequena insensibilidade a valores discrepantes. Valores de *FACT2* iguais a 100% (ou 1) indicam que todos as estimativas estão entre a metade e duas vezes o valor dos dados observados. Ou seja, o *FACT2* representa a porcentagem de acerto das estimativas, dentro de um limite aceitável.

Willmott e Matsuura (2005) sugerem também a utilização do *Mean Absolute Error (MAE)* como um indicador do erro médio entre observações e previsões (Equação 34). O valor ótimo de *MAE* é igual a 0, onde as previsões são iguais as observações. Similarmente ao *NMSE*, o *MAE* é uma métrica importante na estimativa de erros absolutos.

Os procedimentos de comparação entre observações e previsões correspondem as recomendações do guia de avaliação de modelos de dispersão "*Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance*" (ASTM, 2010).

$$BIAS = \overline{C_p - C_o} \quad (30)$$

$$FB = \frac{2 \cdot (\overline{C_p} - \overline{C_o})}{(\overline{C_p} + \overline{C_o})} \quad (31)$$

$$NMSE = \frac{\overline{(C_p - C_o)^2}}{C_p \cdot C_o} \quad (32)$$

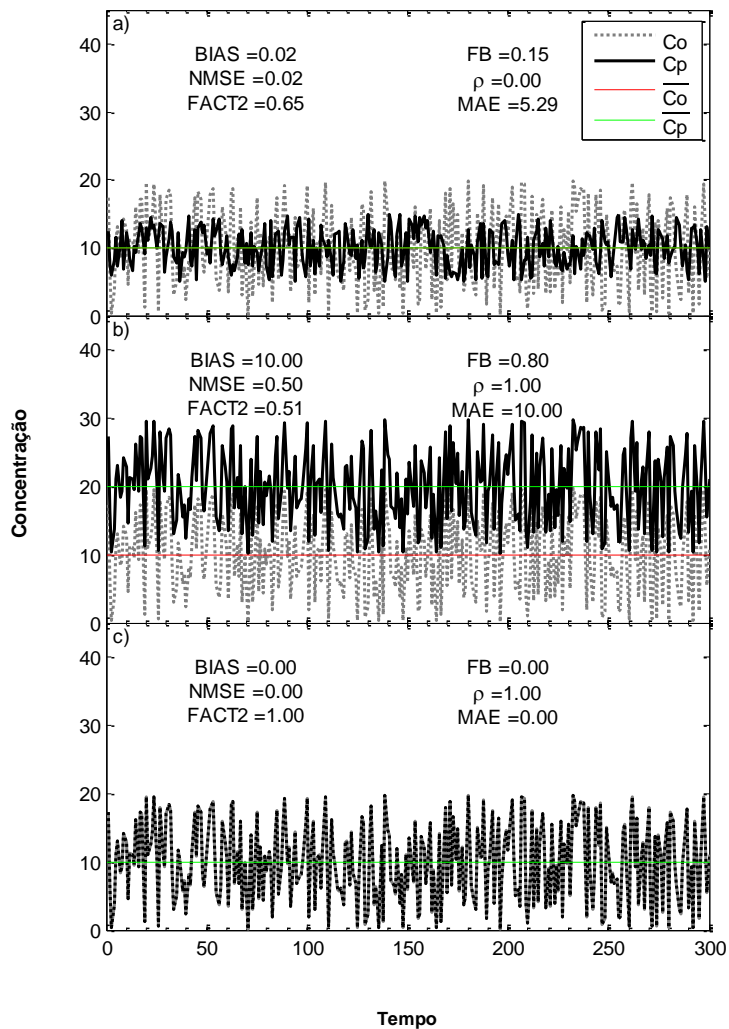
$$FAC2 = 0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2 \quad (33)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |C_p - C_o| \quad (34)$$

Nas equações acima, C_p são os valores previstos, C_o os observados e n o número de amostras. Uma descrição mais detalhada sobre parâmetros estatísticos utilizados pode ser encontrada no Apêndice 1.

A Figura 12 apresenta um exemplo didático do funcionamento das métricas estatísticas. No caso a) a média das previsões ($\overline{C_p}$) e observações ($\overline{C_o}$) são praticamente idênticas e por este motivo os valores de *Bias* e *FB* são baixos. No entanto, nota-se que previsões (C_p) e observações (C_o) variam de forma diferente, culminando em valores altos de MAE e NMSE, e baixo valor do coeficiente de correlação de Spearman (ρ). Assim, apesar de que em média os valores de observações e previsões sejam semelhantes (erros sistemáticos pequenos), os dados não se correlacionam devido a presença de erros aleatórios. O contrário ocorre no segundo caso (b), onde previsões e observações variam da mesma forma e apresentam ρ igual a 1. Entretanto, existem erros sistemáticos, indicados pelos valores elevados de *Bias* e *FB*. Como o NMSE e o MAE medem o erro absoluto (aleatórios + sistemáticos), os mesmos também apresentam valores altos quando as médias das observações e previsões são diferentes. O último caso (Figura 12 c) apresenta o caso ideal em que o modelo acerta tanto a variabilidade das observações quanto sua média (sobreposição das linhas), apresentando valores ótimos para todas as métricas. Nota-se que o FACT2, porcentagem de previsões dentro de um limite aceitável, pode apresentar valores adequados mesmo quando não há simetria entre os dados observados e modelados.

Figura 12: Representação do funcionamento dos parâmetros/métricas estatísticas. a) Observações e previsões com médias semelhantes, porém com variabilidade distintas; b) médias das observações diferente das previsões, porém com variabilidade idêntica; c) aproximação perfeita entre previsões e observações.



Fonte: Autor.

As comparações entre a dispersão lateral observada e estimada foram feitas para todos os tempos de média avaliados em Round Hill (10, 3 e 0,5 minutos). Este procedimento não foi incluído nos coeficientes de dispersão de Högström e Pasquill-Gifford, por já serem válidos para os tempos de média de 30 segundos e 10 minutos, respectivamente.

Baseado nos valores propostos por Smith (1973 *apud* SCHAUBERGER *et al.* 2012), foi assumido um valor de 0,4 para o expoente a nas Equações 24 e 25 (do fator P-M), pois as condições meteorológicas do experimento de Round Hill II variaram entre estáveis e levemente instáveis. Assim, os valores de σ_y estimados pelo AERMOD e Draxler (válidos para médias horárias – 60 minutos) foram ajustados para os tempos de média de 30 segundos e 3 e 10 minutos. O Quadro 2 apresenta os valores de Peak to Mean (P-M) utilizados na correção das previsões em tempo de média menores que uma hora. Para corrigir os valores de σ_y utilizando o fator P-M é feita a divisão entre σ_y e o referido fator.

Quadro 2: Fator *Peak to Mean* (P-M) utilizado na correção das previsões em tempos de média menores que 1 hora nos métodos do AERMOD e de Draxler.

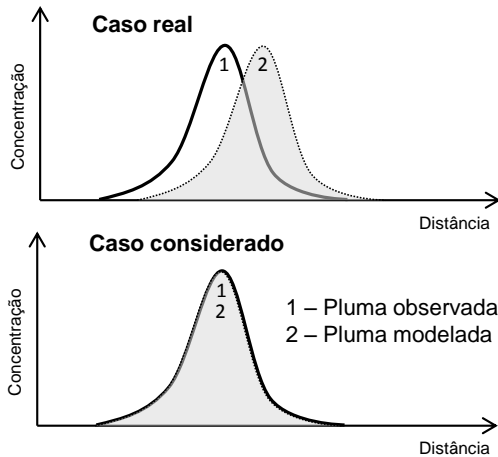
Tempo de média	Fator <i>Peak to Mean</i> (P-M)
10 minutos	2,04
3 minutos	3,31
30 segundos	6,79

Além das avaliações do desempenho na estimativa da dispersão lateral pelos métodos, foram realizadas comparações entre concentrações máximas modeladas e observadas em cada arco. Isso foi feito para avaliar a qualidade das estimativas dos coeficientes de dispersão e seu reflexo na determinação das concentrações máximas por um modelo gaussiano (Equação 7). Para tanto, os seguintes procedimentos foram efetuados:

1. Estimativa de σ_y e σ_z pelos métodos de Pasquill-Gifford, Högström e os incorporados no AERMOD e CALPUFF para cada um dos 10 experimento de Round Hill II;
2. Cálculo das concentrações máximas no arco utilizando o modelo gaussiano da Equação 7, alimentado com os coeficientes do passo anterior. Taxas de emissão e velocidade do vento seguiram conforme cada experimento de Round Hill II;
3. Correção dos valores estimados pela equação gaussiana utilizado o fator P-M (apenas para os coeficientes de Draxler e AERMOD). O ajuste foi feito pela multiplicação da concentração estimada pelo fator P-M;
4. Comparação entre concentrações máximas observadas em cada arco e estimadas pelo modelo gaussiano, para cada estimativa de σ_y e σ_z , para cada um dos testes de Round Hill II.

Em todos os casos foi considerado que os eixos centrais das concentrações observadas e modeladas coincidiam, ou seja, o modelo acerta na posição do centro da pluma. A Figura 13 mostra um exemplo da premissa assumida, onde as concentrações máximas modeladas e observadas em cada arco se sobrepõem. Esta hipótese foi assumida, pois o objetivo do presente trabalho é verificar a efetividade das estimativas na determinação do espalhamento lateral e concentrações máximas nos arcos. Não faz parte do escopo do trabalho investigar a precisão dos modelos na previsão das posições dos eixos centrais das plumas de dispersão.

Figura 13: Caso real onde plumas modelada e observada possuem eixos centrais distintos e caso considerado onde ocorre a sobreposição entre elas



Fonte: Autor

3.2. AVALIAÇÃO DA INFLUÊNCIA DA PARAMETRIZAÇÃO DO DESVIO PADRÃO DA VELOCIDADE DO VENTO NA ESTIMATIVA DA DISPERSÃO LATERAL PELO AERMOD

O experimento de Round Hill II fornece os dados de desvio padrão da direção do vento a cada 10 minutos. Com isso, foi possível obter o desvio padrão da velocidade horizontal do vento através da aplicação da Equação 35 (DRAXLER, 1975).

$$\sigma_v = \tilde{u} \cdot \text{seno}(\sigma_\theta) \quad (35)$$

Onde, σ_v é o desvio padrão da velocidade horizontal do vento, \tilde{u} a velocidade do vento e σ_θ o desvio padrão da direção do vento.

O desvio padrão da velocidade do vento é parâmetro que pode ser incluído como dado de entrada no AERMOD. Ao ser implementado os valores medidos de σ_v no AERMOD, é evitada a utilização das equações para estimar o mesmo e, conseqüentemente, é reduzida as incertezas na determinação de σ_v . Para executar esta etapa foi utilizada a versão 13350 do AERMOD e AERMET (processador meteorológico do AERMOD).

3.3. ADAPTAÇÃO DO COEFICIENTE DE DISPERSÃO LATERAL DO AERMOD PARA PREVISÃO EM TEMPOS DE MÉDIA CURTOS

Relembrando a Equação 17 do cálculo da dispersão lateral no AERMOD.

$$\sigma_y = (\sigma_v x) / \tilde{u}(1 + \alpha X)^p \quad (17)$$

$$\text{Onde } X = \sigma_v x / \tilde{u} z_i \text{ e } \alpha = z_i / l.$$

Tendo conhecimento de que o coeficiente σ_y pode ser alterado através dos parâmetros p e α , foram efetuados ajustes para que o cálculo com AERMOD possa estimar concentrações em tempos de média menores. Utilizou-se a base de dados de Round Hill II para encontrar os valores de p e α adequados para tempos de média de 0,5; 3 e 10 minutos. Em seguida, as adaptações foram implementadas na versão 13350 do AERMOD e testadas utilizando esta mesma base de dados.

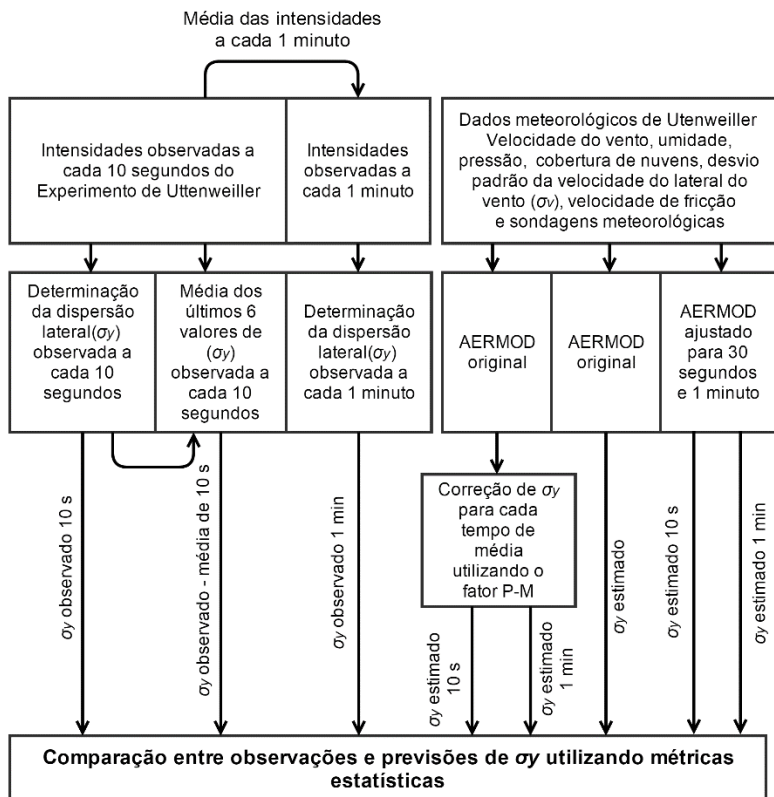
Em suma, a etapa metodológica aqui apresentada tem como propósito otimizar as estimativas do AERMOD para aplicações em tempos de média curtos. O AERMOD foi escolhido levando em consideração os resultados da primeira etapa e também por ser o modelo mais utilizado para fins regulatórios.

3.4. VALIDAÇÃO DO AERMOD ADAPTADO NO CÁLCULO DA DISPERSÃO DE ODORES

Esta etapa tem o objetivo de comparar o AERMOD padrão e as adaptações realizadas na segunda etapa deste trabalho utilizando uma outra base de dados disponível na bibliografia, no caso, a de Uttenweiller, na Alemanha. A respectiva avaliação teve o intuito de validar as adaptações realizadas no AERMOD da dispersão lateral em diferentes tempos de média.

A Figura 14 apresenta o fluxograma utilizado na presente etapa metodológica. Nos itens a seguir são apresentados detalhes de cada um dos itens deste fluxograma.

Figura 14: Fluxograma da etapa metodológica da avaliação do AERMOD adaptado e original no cálculo da dispersão de odores.



Fonte: Autor

3.4.1. Descrição do experimento de Uttenweiller

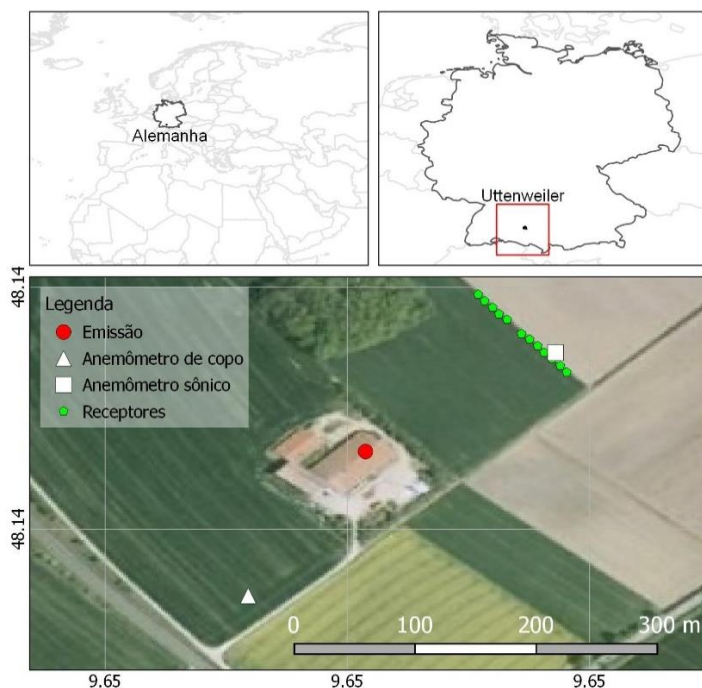
O local do estudo situa-se na parte rural do município de Uttenweiller. A fazenda e seu entorno constituem-se, basicamente, de campos cultivados (BÄCHLIN; RÜHLING E LOHMEYER, 2002; SOUZA, 2014b). A base de dados de Uttenweiller foi desenvolvida por meio de medições da intensidade dos odores emitidos por um criadouro de porcos. O referido criadouro 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(BÄCHLIN; RÜHLING E LOHMEYER, 2002). Apenas uma das chaminés foi utilizada no experimento. A chaminé utilizada apresentava três compartimentos, que totalizavam 3,6 m² de área, conforme já realizado por Souza (2014a).

O conjunto de 15 ensaios foi conduzido em dois períodos: de 12 a 13 de outubro de 2000 e em 31 de outubro de 2001. Em geral, as condições da atmosfera foram estáveis durante a coleta de dados. Outra característica importante foi a ausência de calmarias no período de avaliação. Foram selecionados apenas dois experimentos (I e L) devido as suas maiores resoluções espaciais dos arcos de receptores.

Os odores foram mensurados por 11 jurados treinados, posicionados em linha à sotavento da chaminé, conforme a Figura 15. Neste caso, foi medida a intensidade dos odores em uma escala que varia entre 0 (neutra/inodora) a 5 (muito forte). Os jurados respondiam sobre a intensidade dos odores percebidos a cada 10 segundos, durante os 10 minutos de experimento. Ao todo foram contabilizados nos experimentos I e L, aproximadamente, 120 testes de 10 segundos de medição. O experimento também era provido de duas estações meteorológicas, uma com anemômetro de copo e outra com anemômetro sônico. As disposições destas estações em relação ao experimento estão presentes na Figura 15.

Figura 15: Localização do experimento de Uttenweiller na Alemanha. Disposição arcos de receptores considerados (entre 150 e 200 metros) em um dos experimentos conduzidos.



Fonte: Autor.

As medições de camada superior (*upper air*) foram obtidas pelas sondagens do aeroporto de Schnarrenberg, a cerca de 84 km a Noroeste do local do experimento. Dados de pressão atmosférica e cobertura de nuvens da estação meteorológica de Laupheima, a 22 km Nordeste de Uttenweiller, também foram utilizados.

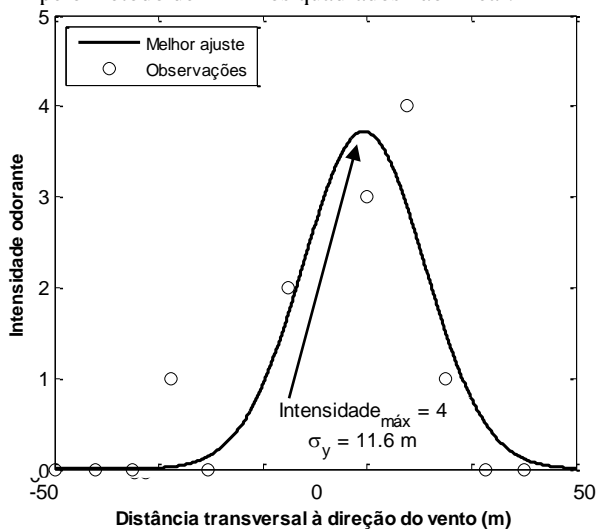
No trabalho aqui apresentado foram utilizados os dados de velocidade e direção do vento medidos pelo anemômetro sônico instalado no local, com resolução inferior a 10 segundos. Este medidor também forneceu dados de desvio padrão da velocidade vertical e horizontal do vento e velocidade de fricção¹⁴ que foram utilizados como dados de entrada no AERMOD.

¹⁴ Medida da intensidade do cisalhamento vertical do vento

3.4.2. Determinação da dispersão lateral observada

A determinação do espalhamento das plumas de odores seguiu a metodologia apresentada no Item 3.1.2. A diferença entre as bases de dados de Round Hill II e Uttenweiller está na medição de concentrações na primeira e intensidades odorantes na segunda. Foi assumida a hipótese de que a intensidade odorante sentida pelos jurados é proporcional a concentração dos odores. Além dos critérios de convergência adotados em Round Hill II, foram estabelecidos limites máximos para σ_y , C_{max} e μ de 200 metros, 5 (intensidade máxima) e 200 metros, respectivamente. Esse procedimento foi necessário pois as observações de Uttenweiller foram realizadas em escala temporal e resolução espacial de receptores inferiores a de Round Hill, portanto, conseqüentemente menos comportadas que as obtidas pelo experimento de Round Hill II. A Figura 16 apresenta um exemplo do ajuste entre curva gaussiana e observações em Uttenweiller.

Figura 16: Exemplo entre melhor ajuste entre curva gaussiana e observações em um dos experimentos de Uttenweiller na Alemanha. Dispersão lateral (σ_y) e concentração máxima no arco (C_{max}) encontradas pelo método de mínimos quadrados não linear.



Fonte: Autor.

A resolução em Uttenweiller permitiu obter dados da dispersão lateral da pluma a cada 10 segundos (tempo de resposta dos jurados). Além disso, foram feitas médias dos valores de σ_y (das medições de 10 segundos) a cada minuto para remoção de discrepâncias. Os valores de σ_y das observações também foram calculados para tempos de média de 1 minuto. Desta forma, foi feita a média das medidas das intensidades pelos jurados a cada minuto, para posterior determinação da dispersão lateral. Portanto, foram avaliadas duas escalas temporais (10 segundo e 1 minutos) segundo os valores de σ_y :

- σ_y das observações realizadas a cada 10 segundos (tempo de média de 10 segundos);
- Média a cada 1 minuto dos valores de σ_y das observações a cada 10 segundos (tempo de média de 10 segundos);
- σ_y da média das observações realizadas a cada 1 minuto (tempo de média de 1 minuto).

3.4.3. Técnicas estatísticas utilizadas para comparar observações e estimativas

As comparações entre dispersão lateral (σ_y) observada e simulada pelo AERMOD seguiu de forma similar as apresentadas no Item 3.1.3. Nas simulações com o AERMOD foi adotado uma taxa de emissão unitária. Isso foi feito pois somente foi avaliada a efetividade na estimativa da dispersão lateral. Devido a ausência de medições de concentrações de odores no ambiente, não foi possível avaliar os desempenhos do AERMOD padrão e ajustado na determinação de concentrações máximas. Vale frisar que em Uttenweiller foram medidas as intensidades dos odores no ambiente, sendo esta uma medida diferente da concentração. A conversão da intensidade em concentração odorante requer uma equação empírica que acarretaria em um aumento significativo no grau de incerteza da avaliação.

Os parâmetros estatísticos utilizados na comparação entre previsões e observações de σ_y são os mesmos apresentados no Item 3.1.3.

3.4.4. Avaliação da presença de obstáculos na estimativa da dispersão lateral pelo AERMOD

Devido a disponibilidade de observações dos desvios padrões da velocidade horizontal e vertical do vento, foi possível avaliar o desempenho do AERMOD sem e com a implementação destas medições. O AERMOD possui equações próprias para estimar estes desvios da velocidade do vento, sendo estas sujeitas a erros.

Em Uttenweiller existiam três obstáculos: dois celeiros, um deles contendo a chaminé utilizada nos experimentos, e um pequeno bosque de aproximadamente 20 metros de altura. Desta forma, foi necessário simular o efeito de *building downwash* ocasionado por estes obstáculos na alteração da turbulência e formato da pluma. O AERMOD realiza o tratamento do escoamento com presença de anteparos através do algoritmo *Plume Rise Model Enhancements - PRIME*. Este último modelo foi desenvolvido de modo a incorporar aspectos fundamentais associados ao efeito de obstáculos. Entre os efeitos estão o aumento nos coeficientes de dispersão da pluma causado pela esteira de turbulência e uma redução na elevação da pluma. Esta última ocorre devido à combinação dos efeitos das linhas de correntes descendentes na região posterior do obstáculo e à captura da pluma pela esteira de turbulência. Para tanto, o modelo leva em conta a posição da fonte em relação ao prédio, calcula a intensidade da velocidade do escoamento, intensidades turbulentas do vento e inclinação das linhas de corrente, como função do formato projetado do obstáculo. Uma descrição detalhada do PRIME pode ser encontrada no manual do AERMOD (USEPA, 2004).

Foram avaliadas as configurações do AERMOD padrão, AERMOD-PRIME e AERMOD com a implementação das medições dos desvios da velocidade do vento. Estas mesmas configurações também foram avaliadas após a inclusão dos ajustes no AERMOD propostos neste trabalho.

4. RESULTADOS

4.1. AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE ESTIMATIVA DE COEFICIENTES DE DISPERSÃO EM DIFERENTES TEMPOS DE MÉDIA

Neste item são apresentados os resultados dos desempenhos dos métodos de Högström, Pasquill-Gifford, AERMOD e Draxler na determinação da dispersão lateral e concentrações máximas, utilizando a base de dados do experimento de Round Hill II. Na Tabela 2 constam informações sobre as condições meteorológicas médias durante o referido experimento. As condições atmosféricas variaram entre levemente instáveis e estáveis. Os valores do comprimento de Monin-Obukhov nas condições instáveis variaram entre -771 e -3762 metros e de 93 a 580 metros nas condições estáveis.

Tabela 2: Média e Desvio Padrão (D.P.) da velocidade do vento, desvio padrão da componente horizontal da velocidade do vento (Desv. Vel Hor.) e temperatura do período de amostragem, do experimento de Round Hill II, em 1957.

Parâmetro	Média ± D.P.
Vel. Vento (m/s)	3,4 ± 1,1
Desvio Padrão da Velocidade Horizontal do vento (σ_v) (m/s)	0,9 ± 0,4
Temperatura (°C)	9,5 ± 5,8

A média e o desvio padrão (D.P.) da dispersão lateral ($\langle \sigma_y \rangle$) e concentrações máximas ($\langle C_{max} \rangle$) em cada arco de receptor e para cada tempo de média estão contidos na Tabela 3. O símbolo $\langle \rangle$ denota que os valores são tratados como *Ensembles*, ou seja, conjunto de vários sistemas que, apesar de terem condições iniciais diferentes, são considerados como equivalentes. Conforme esperado, o espalhamento das plumas é maior em tempos de média maiores. O inverso ocorre com $\langle C_{max} \rangle$, pois possuem valores mais baixos em tempos de média maiores. $\langle C_{max} \rangle$ e $\langle \sigma_y \rangle$ são propriedades inversamente proporcionais: quanto maior a dispersão, menores são as concentrações máximas. Os valores do desvio padrão de $\langle \sigma_y \rangle$ são incrementados ao ser elevado o tempo de média, devido a maior influência das oscilações do centro da

pluma quando o tempo de amostragem é maior. Ao se distanciar da fonte também há um acréscimo nos desvios de $\langle\sigma_y\rangle$, pois o tempo de percurso é maior, o que aumenta a influência das escalas turbulentas maiores que são incorporadas na dispersão da pluma.

Na Tabela 3 também podem ser vistas as médias e os desvios padrões da distância do centro da pluma ($\langle\mu\rangle$) em relação ao eixo da direção do vento. Nesta tabela pode ser visto que os valores de μ nos diferentes tempos de média não são iguais. Isto evidencia a influência das oscilações do centro da pluma, que alteram a posição da mesma, pois caso este fator não influenciasse, as posições coincidiriam nos diferentes tempo de média. Nota-se também que o desvio padrão da posição do centro da pluma é menor quando o tempo de média é maior, uma vez esta flutuação é incorporada no valor de $\langle\sigma_y\rangle$ (possui valores maiores em tempo de média maiores). Foram utilizadas 10 repetições para o cálculo das médias para cada distância e tempo de média.

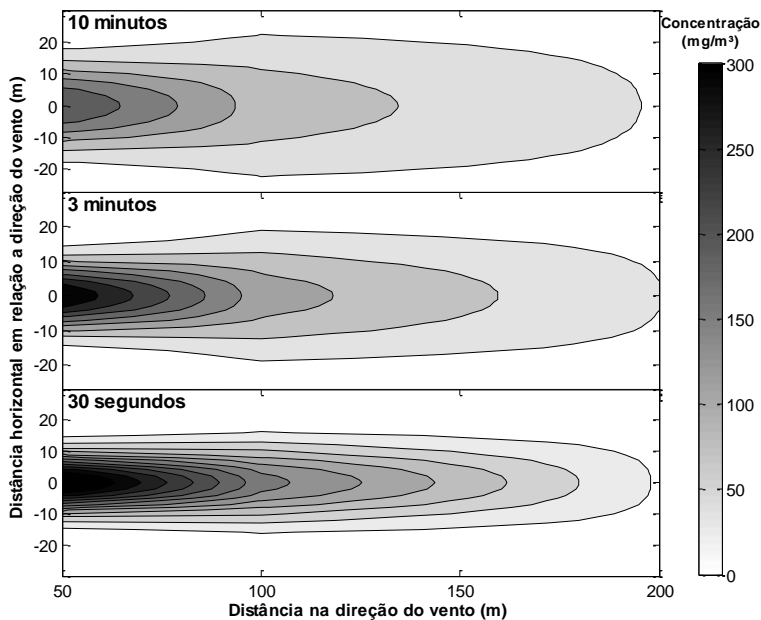
Tabela 3: Média e desvio padrão da dispersão lateral ($\langle\sigma_y\rangle$), concentração máxima ($\langle C_{max}\rangle$) e posição do centro ($\langle\mu\rangle$) das plumas de poluentes durante o experimento de Round Hill II para cada arco de receptor e tempo de média.

Parâmetro	Distância	Média			Desvio Padrão		
		10 min	3 min	30 seg	10 min	3 min	30 seg
$\langle\sigma_y\rangle$ (m)	50 m	9,5	6,8	6,3	3,5	2,3	2,5
	100 m	16,4	11,9	8,4	8,0	4,4	2,9
	200 m	28,4	20,2	15,8	19,4	9,8	8,4
$\langle C_{max}\rangle$ (mg.m ⁻³)	50 m	229,9	327,1	364,5	148,7	193,4	259,5
	100 m	99,1	125,1	166,6	108,9	114,3	162,8
	200 m	36,8	37,1	23,2	48,7	40,5	9,9
$\langle\mu\rangle$ (m)	50 m	1,8	2,7	3,3	4,8	8,6	9,4
	100 m	2,3	5,1	7,9	9,3	17,3	23,9
	200 m	2,9	10,1	17,7	19,6	37,1	39,9

Para auxiliar na interpretação da Tabela 2, a Figura 17 mostra os contornos das plumas para os tempos de média do experimento de Round Hill, baseados na dispersão lateral e concentrações máximas médias da Tabela 3. Como o propósito da Figura 17 é mostrar a diferença entre as concentrações máximas e dispersão lateral nos

diferentes tempos de média, foi adotado $\langle \mu \rangle$ igual a 0. Pode ser visto que o formato da pluma de 10 minutos é mais largo no eixo horizontal (y) em relação a pluma dos demais tempos de média da Figura 17. Nota-se também que as concentrações máximas são maiores na pluma de média de 30 segundos devido a menor dispersão em tempos de média menores.

Figura 17: Gráfico de contorno das plumas para os tempos de média de 10; 3 e 0,5 minutos. Condições médias encontradas no experimento Round Hill II



Fonte: Autor

4.1.1. Avaliação dos métodos de estimativa da dispersão lateral

A Tabela 4 apresenta as performances dos métodos de estimativa da dispersão lateral tendo como base o experimento de Round Hill II. Entre os métodos, Högström e Pasquill-Gifford (P.G.) melhoram suas performances com a redução do tempo de média para distâncias de até 200 metros (distância em que foi executado o experimento). De acordo com os valores de *Fractional Bias (FB)*, Högström reduz a proporção em que subestima as observações, de 90% (0,9), em amostragens de 10

minutos, para 50% (0,5), em tempos de média de 30 segundos. Já P.G. subestima de 60% para 10% nesta mesma situação. O oposto ocorre com os métodos de Draxler e o empregado no AERMOD. Estes últimos métodos foram concebidos para o cálculo de médias horárias e suas performances são deterioradas a medida que o tempo de amostragem decresce. Sem a utilização do fator Pico-Média (P-M), os métodos do AERMOD e de Draxler superestimam as observações em até 110% a 120%, respectivamente.

Entre os métodos de estimativa da dispersão lateral, P.G. apresentou o melhor desempenho em tempo de amostragem de 30 segundos. Observa-se que 83% das previsões deste último estão dentro da faixa do Fator de 2 – *FACT2* (entre a metade e duas vezes o valor das observações). O *Bias* indica a subestimativa de 0,6 metros, sendo que em média o método de P.G. erra em 10% as observações. Os valores do *MAE* e *NMSE* também apontam que P.G. obteve a melhor performance para 30 segundos de média, seguido por Draxler, Högström e AERMOD.

Após o emprego do fator P-M, os métodos AERMOD e Draxler subestimam ao invés de superestimarem, entretanto, em geral os erros são menores. Considerando todos os tempos de amostragem avaliados, em média, os métodos de Draxler e o AERMOD alcançaram os melhores desempenhos (Tabela 4). Verifica-se que o *Bias* passa de 15,5 metros para -1,3 metros e o *FB* de 70% para 0%, utilizando tal fator no AERMOD em tempos de média de 10 minutos. Este fator também reflete na otimização da métrica estatística *NMSE* (somatório entre erros sistemáticos e aleatórios), que passa de 0,4 para aproximadamente 0 no AERMOD e de 0,6 para aproximadamente 0 no método de Draxler, em tempos de média de 10 minutos (Tabela 4). O *FACT2* é aprimorado de 3% para 53% no AERMOD e de 0% para 67% no método de Draxler, em tempos de média de 30 segundos. Isso indica a predominância de erros sistemáticos (*Bias* elevado) em ambos os métodos, que são amenizados com o emprego do fator P-M. Os valores de *NMSE* também mostram que com o emprego do fator P-M, os métodos de Draxler e AERMOD, em geral, apresentam os menores erros (Tabela 4). Apesar de terem suas performances deterioradas a medida que o tempo de média diminui, é provável que com a utilização de valores ótimos de P-M sejam corrigidos os valores de *Bias*, *NMSE*, *MAE* e *FACT2* nos métodos supracitados

As correlações entre observações e previsões, indicadas pelo valores de ρ na Tabela 4, são mais fortes nos métodos empregados no

AERMOD e Draxler, em todos os tempos de média. Högrström apresentou as correlações mais fracas com as observações.

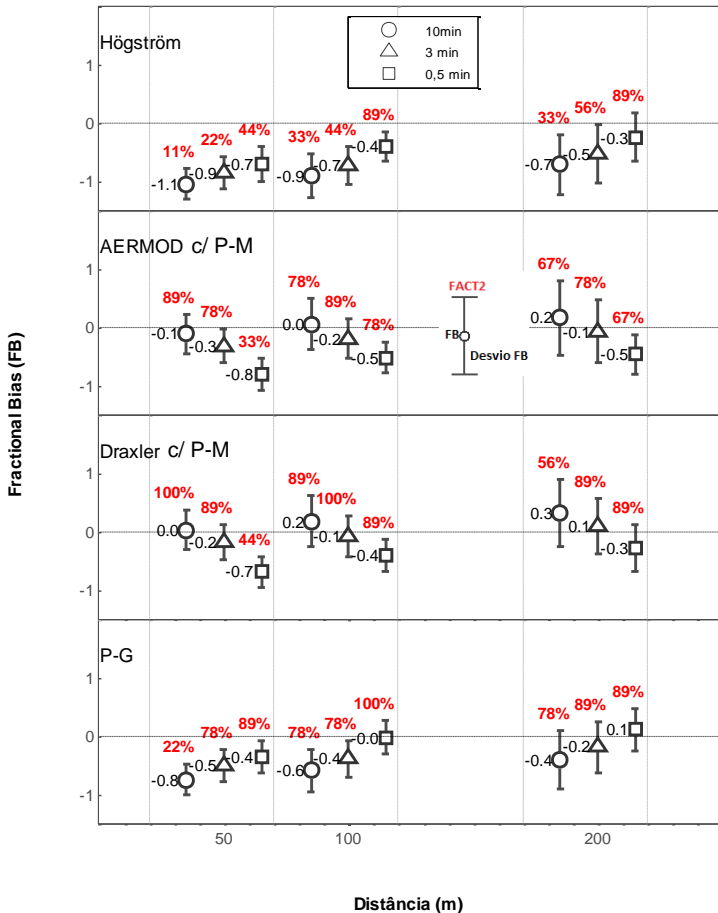
Tabela 4: Performance dos métodos na estimativa σ_y no experimento de Round Hill II para tempos de média de 0,5; 3 e 10 minutos. Estimativas do AERMOD e Draxler com e sem fator *Peak to Mean*.

Métrica	Tempo de média	Högrström	AERMOD		CALPUFF/ Draxler		P.G.
			s/ P-M	c/ P-M	s/ P-M	c/ P-M	
<i>BIAS</i> (m)	10 min	-11,6	15,5	-1,3	21,3	1,6	-8,8
	3 min	-7,1	20,0	-3,0	25,8	-1,2	-4,3
	0,5 min	-3,3	23,7	-4,3	29,5	-3,5	-0,6
<i>FB</i>	10 min	-0,9	0,7	0,0	0,8	0,2	-0,6
	3 min	-0,7	0,9	-0,2	1,0	-0,1	-0,4
	0,5 min	-0,5	1,1	-0,6	1,2	-0,5	-0,1
<i>NMSE</i>	10 min	1,3	0,4	0,0	0,6	0,0	0,5
	3 min	0,7	0,9	0,1	1,3	0,0	0,2
	0,5 min	0,2	1,7	0,4	2,2	0,2	0,0
ρ	10 min	0,56	0,69	0,69	0,75	0,75	0,63
	3 min	0,61	0,79	0,79	0,82	0,82	0,68
	0,5 min	0,63	0,78	0,78	0,76	0,76	0,75
<i>FACT2</i>	10 min	0,23	0,40	0,70	0,27	0,73	0,53
	3 min	0,37	0,20	0,73	0,13	0,83	0,73
	0,5 min	0,67	0,03	0,53	0,00	0,67	0,83
<i>MAE</i>	10 min	11,7	17,4	7,2	21,7	7,9	9,1
	3 min	7,3	20,0	4,7	25,8	3,9	5,1
	0,5 min	3,8	23,7	4,3	29,5	3,8	2,5

As correlações da Tabela 4 foram calculadas considerando todo o conjunto de dados, sem distingui-los pela distância da fonte. A distância explica grande parte da variabilidade das concentrações na direção do vento e a influência desta variável é bem descrita pelos métodos avaliados. Este é um dos motivos pelos quais as abordagens avaliadas se correlacionam bem aos dados observados em Round Hill II. Caso as correlações fossem segregadas pela distância da fonte (para cada arco de receptores), apenas as variáveis meteorológicas

influenciariam na variação das concentrações dos poluentes, sendo este um processo mais complexo de ser descrito por formulações matemáticas. Na Figura 18 é contemplada uma análise das médias e desvios do *FB* em função da distância (50, 100 e 200 metros) e tempo de média (0,5; 3 e 10 minutos). Nesta mesma figura também é determinado o *FACT2*.

Figura 18: *Fractional Bias (FB)* entre observações e estimativas de dispersão lateral a 50, 100 e 200 metros para o experimento de Round Hill II em tempos de média de 0,5; 3 e 10 minutos. Barras indicam o desvio padrão do *FB* e valores em vermelho o *FACT2*.



Fonte: Autor

A partir da Figura 18 pode ser visto que o método de Draxler e o AERMOD apresentam comportamentos similares, onde a dispersão lateral, em distâncias menores, tende a ser subestimada. Outra similaridade entre estes últimos métodos está na melhor qualidade de suas estimativas em tempos de média maiores (10 e 3 minutos). A dispersão lateral do AERMOD e Draxler (com o emprego do fator P-M) subestima as observações em distâncias menores que 200 metros e tempos de média de 30 segundos. É possível verificar através dos índices *FB* e *FACT2* que, em média, as estimativas por Draxler alcançou resultados mais próximos às observações em relação ao AERMOD. Os bons ajustes entre estes últimos métodos e as medições de Round Hill II também estão atribuídos ao emprego do *peak to mean*, que reduziu a magnitude dos erros sistemáticos (evidenciados através do *Bias* e *FB*). Draxler (1976) já havia constatado que suas formulações alcançavam melhores resultados que P.G., em tempos amostragem maiores. Já Irwin (1983) relata que parametrizações de Draxler obtêm baixos valores de *FB* em relação às observações em campo quando comparados com as estimativas de P.G.

Nota-se que as correções proporcionadas pelo emprego do fator P-M convencional não são as mesmas em todas as distâncias. No AERMOD, por exemplo, a dispersão lateral é subestimada em 80% a 50 metros e em 50% a 200 metros, utilizando o mesmo fator P-M. Isso mostra que o fator de correção utilizado deveria ser menor em locais próximos e incrementado suavemente ao ser distanciado da fonte. A partir de 100 metros, o *FB* tende a se estabilizar, apontando uma possível redução da sensibilidade do fator P-M à distância da fonte. Schauburger *et al.* (2012) já havia mencionado que o valor adequado do P-M varia em função da distância e entre outros fatores.

As formulações de Högström subestimam as observações do experimento de Round Hill II. Os resultados deste método apresentaram-se mais próximos aos dados coletados no experimento à 200 metros da fonte emissora. Em tempos de média reduzidos, verifica-se que tal método alcança melhores ajustes. Provavelmente, isso deve-se ao fato de que Högström desenvolveu os coeficientes de dispersão tendo como base experimentos com tempos de média de 30 segundos. Tendências similares a de Högström foram obtidas pelo método de P.G., entretanto, com índices *FB* e *FACT2* melhores.

Observações importantes podem ser feitas a partir da Figura 18 tendo como base o aumento dos desvios do *FB* em função da distância e tempo de média. Isso ocorre de forma similar para todos os métodos,

pois a medida que a distância aumenta também é acrescida a influência das escalas turbulentas maiores que culminam na modificação do centro de massa da pluma observada, conforme já apresentado na Tabela 3. Os métodos são insensíveis a estas flutuações uma vez que não consideram a influência do tempo de média em suas formulações. Nas abordagens do AERMOD, de Draxler e de P.G., tais flutuações são incorporadas nos coeficientes dispersão, por meio do incremento dos seus valores. Já Högström faz o tratamento discriminado da dispersão e alteração do centro da pluma, entretanto, não foi considerado neste trabalho a alteração do centro de massa da pluma. Assim, mesmo que os métodos, em média, acertem em suas estimativa, nenhum deles é sensível às flutuações do centro da pluma.

As correlações (ρ) entre observações e previsões pelos métodos de estimativa da dispersão lateral, nos diferentes arcos de receptores e tempos de média, são apresentadas na Tabela 5. Através desta tabela pode ser visto que os métodos são insensíveis as flutuações turbulentas em escalas temporais reduzidas. Este efeito pode ser visto comparando as valores de ρ para tempos de média de 10 e 0,5 minutos, onde as correlações, em geral, tendem a se reduzir com a redução do tempo de média das observações. Os métodos foram concebidos assumindo a hipótese de estacionaridade e, por este motivo, são insensíveis as flutuações turbulentas das observações em tempos de média curtos. Conforme a Tabela 3, com o decréscimo do tempo de média (de 10 minutos para 30 segundos), maior é a flutuação do centro da pluma das observações (desvio padrão da posição do centro na Tabela 3), sendo esta uma componente é dificilmente explicada por um modelo matemático. Em tempos de média maiores, os métodos incorporam a flutuação do centro da pluma nos valores de σ_y , suavizando a influência da componente aleatória. Por isso, as correlações são melhores em tempos de média de 10 minutos.

Verifica-se também através da Tabela 5 que as correlações não paramétricas de Spearman, em média, são menores em distâncias maiores devido a insensibilidade dos métodos avaliados à modificação da trajetória da pluma. A hipótese estacionária assumida pelos métodos estabelece que a direção do vento não varia em uma simulação, fato que realisticamente não ocorre nas observações da dispersão de uma pluma na atmosfera.

Ao comparar os métodos, nota-se que o AERMOD se relaciona melhor com as observações, mesmo que errem na magnitude (erros sistemáticos - *Bias*) de suas aproximações (Tabelas 3 e 4). O AERMOD

possue parametrizações mais realísticas da camada limite e da dispersão dos poluentes quando comparados ao método de P.G., que é empírico por natureza (DRAXLER, 1976; CIMORELLI *et al.*, 2005). Entre os métodos, o de Högström apresenta relações mais fracas com as observações. É possível que os resultados de Högström tenham sido deteriorados ao desconsiderar a flutuação do centro da pluma.

Tabela 5: Correlações entre dispersão lateral observada a 50 , 100 e 200 metros em tempos de média de 10; 3 e 0,5 minutos versus dispersão lateral modelada. Correlação não paramétrica de Spearman (ρ) entre observações e previsões em cada arco do experimento

Método	Tempo de média	ρ			P		
		50 m	100 m	200 m	50 m	100 m	200 m
Hogstrom	10 min	-0,12	0,02	0,08	0,78	0,98	0,84
	3 min	-0,17	-0,18	-0,27	0,68	0,64	0,49
	0,5 min	-0,27	0,35	-0,67	0,49	0,36	0,06
AERMOD	10 min	0,80	0,85	-0,35	0,01	0,01	0,36
	3 min	0,87	0,88	-0,13	0,00	0,00	0,74
	0,5 min	0,55	0,22	0,78	0,13	0,58	0,02
Draxler	10 min	0,63	0,80	0,63	0,08	0,01	0,08
	3 min	0,63	0,55	0,72	0,08	0,13	0,04
	0,5 min	0,62	0,38	0,17	0,09	0,31	0,68
P.G.	10 min	0,07	0,17	0,23	0,88	0,68	0,55
	3 min	-0,13	-0,10	0,12	0,74	0,81	0,78
	0,5 min	0,57	0,27	0,43	0,12	0,49	0,25

Em resumo, a metodologia de estimativa de σ_y do AERMOD se correlacionou melhor às observações de Round Hill II do que os demais métodos avaliados. Apesar de apresentar erros de tendência elevados, indicados pelos altos valores de *Bias* e *FB*, a partir dos resultados alcançados é possível vislumbrar uma possível correção da estimativa σ_y pelo AERMO de forma a reduzir este erros.

4.1.2. Avaliação das concentrações máximas

O desempenho dos métodos de estimativa dos coeficientes de dispersão, na previsão das concentrações máximas, pode ser visto na Tabela 6. Os métodos de Högström e P.G. superestimam as concentrações máximas. As metodologias de Draxler e a incorporada pelo AERMOD subestimam, mesmo após o emprego do fator *Peak to Mean*. Erros na dispersão vertical dos poluentes podem explicar o mal desempenho na detecção de concentrações máximas.

Nota-se, a partir dos valores de *Bias*, que o modelo gaussiano da Equação 7 apresenta erros sistemáticos extremamente elevados quando utiliza os coeficientes de dispersão de Högström. Para esta última conjuntura, o *FB* também indica que existem erros sistemáticos, no entanto, a magnitude destes erros é menor. Esta divergência entre as métricas na detecção de erros sistemáticos pode estar atribuída a presença de valores extremos ou discrepantes nas observações ou previsões que afetam diretamente nos valores de *Bias*.

Os métodos incorporados no AERMOD e de Draxler melhoram suas performances com a implementação do fator P-M, sendo estas as metodologias que apresentaram os melhores resultados na detecção de concentrações máximas. Há uma melhoria de até 120% nos seus desempenhos com o P-M (vide *FB* na Tabela 6). As demais métricas estatísticas corroboram tal afirmação. Para o AERMOD, por exemplo, de 10 a 70% das previsões estão dentro da faixa do *FACT2*. O coeficiente de correlação varia entre 0,8 e 0,9 para este último método, após o emprego do P-M.

Tabela 6: Performance dos métodos na estimativa das concentrações máximas no experimento de Round Hill para tempos de média de 0,5; 3 e 10 minutos.

Métrica	Tempo de média	Högström	AERMOD		CALPUFF/ Draxler		P.G.
			s/ P-M	c/ P-M	s/ P-M	c/ P-M	
<i>BIAS</i> (m)	10 min	669,9	-114,3	-100,5	-112,8	-97,5	184,5
	3 min	692,6	-147,3	-114,7	-145,7	-109,4	169,3
	0,5 min	658,0	-169,0	-88,5	-167,4	-77,6	141,9
<i>FB</i>	10 min	1,5	-1,5	-1,1	-1,5	-1,1	0,9
	3 min	1,4	-1,6	-0,9	-1,5	-0,8	0,7
	0,5 min	1,3	-1,6	-0,4	-1,5	-0,3	0,7
<i>NMSE</i>	10 min	4,6	8,1	3,1	7,1	2,6	0,9
	3 min	3,4	9,4	1,7	8,3	1,4	0,5
	0,5 min	2,8	11,1	0,4	9,8	0,3	0,3
ρ	10 min	0,86	0,86	0,9	0,87	0,9	0,83
	3 min	0,89	0,89	0,9	0,89	0,9	0,84
	0,5 min	0,77	0,85	0,8	0,83	0,8	0,85
<i>FACT2</i>	10 min	0,00	0,03	0,1	0,03	0,2	0,20
	3 min	0,00	0,00	0,2	0,00	0,3	0,33
	0,5 min	0,10	0,00	0,7	0,03	0,6	0,33
<i>MAE</i>	10 min	669,9	114,3	100,6	112,8	97,6	188,7
	3 min	692,6	147,3	114,7	145,7	109,4	177,3
	0,5 min	658,0	169,0	98,1	167,4	92,4	161,2

Apesar da melhoria no desempenho do AERMOD e Draxler, os erros ainda são elevados, mesmo após o uso do fator P-M. Além disso, a utilização de tal fator é abstrata, pois pode assumir valores diferentes em função das condições atmosféricas. De acordo com Schaubberger *et al.*(2012), os valores do expoente a na equação do P-M podem variar de 0 a 0,64. A subjetividade na definição destes valores permite que o P-M seja utilizado de forma diferente pelos usuários dos modelos, dificultando na consolidação da técnica.

4.2. INFLUÊNCIA DA PARAMETRIZAÇÃO DO DESVIO PADRÃO DA VELOCIDADE LATERAL DO VENTO NA ESTIMATIVA DA DISPERSÃO LATERAL

Os subitens 4.1.1 e 4.1.2 mostram que o método incorporado no AERMOD e o de Draxler podem ser corrigidos de forma a alcançarem os melhores resultados entre os métodos avaliados. Desta forma, foram investigadas as fontes de incerteza destes métodos.

Para entender o funcionamento destes métodos de estimativa dos coeficientes de dispersão lateral é retomada a Equação 13.

$$\sigma_y = \sigma_v T f_1 \left(T/t_L \right) \quad (13)$$

Nota-se, a partir da Equação 13, que o desvio da velocidade horizontal do vento (σ_v) exerce influência direta na qualidade das estimativas da dispersão lateral.

Existem duas formas de obter σ_v : por estimativa ou por medições. As medições deste parâmetro são onerosas e necessitam de equipamento sofisticados, tais como anemômetros sônicos. Por este motivo foram elaboradas formulações empíricas para determinar σ_v . Tanto o AERMOD, quanto o CALPUFF, podem ser executados com a utilização de σ_v medido, ou estimado, por equações inclusas nos referidos modelos. Portanto, procurou-se avaliar a interferência dos erros na estimativa de σ_v na dispersão lateral (σ_y). O AERMOD foi escolhido para a condução das avaliações por ser o modelo recomendado pela US EPA, simples e amplamente utilizado em estudos de dispersão de poluentes.

A Tabela 7 apresenta a comparação de σ_v medido no experimento de Round Hill II, e estimada pelas parametrizações utilizadas no AERMOD (σ_v Estimado). Nesta mesma tabela também pode ser visto que o experimento de Round Hill II foi conduzido em condições de vento acima de 2 m/s, não contemplando calmarias durante a sua execução. Nota-se através do índice *Bias* que o modelo superestima a σ_v medida. A Tabela 8 apresenta as médias das métricas estatísticas utilizadas para comparar σ_v medida e modelada. Em média, o erro sistemático evidenciado por *Bias* é positivo e da ordem de 0,53 m/s com desvio padrão de 0,19 m/s. O coeficiente de correlação de Spearman (ρ) mostra que a variabilidade das previsões é bem representada pelas parametrizações. Apesar de o *FACT2* mostrar que 70% (0,7) dos dados

está dentro da faixa de 0,5 e 2 vezes o valor das observações, o valor do *FB* evidencia a presença de erros sistemáticos.

Tabela 7: Desvio padrão da velocidade lateral do vento observada no experimento de Round Hill e modelada pelo AERMOD. Bias entre observações e previsões. Velocidade do vento para nos dias do experimento.

Data do Experimento	Velocidade do vento (m/s)	σ_v Medido (m/s)	σ_v Estimado (m/s)	Bias (m/s)
09/24/1957	2,14	0,31	0,81	0,50
10/02/1957	5,15	1,46	2,06	0,60
10/10/1957	3,00	0,67	1,22	0,55
11/04/1957	3,98	1,14	¹⁵	-
11/06/1957	1,65	0,26	0,57	0,30
11/17/1957	2,61	0,53	1,03	0,50
11/20/1957	3,86	0,90	1,63	0,73
11/22/1957	3,31	0,73	1,22	0,49
11/26/1957	4,39	0,99	1,85	0,86
12/03/1957	4,07	1,44	1,65	0,21

Tabela 8: Média das métricas estatística entre observações e estimativas de σ_v para o experimento de Round Hill II

Métrica estatística	Valor
<i>BIAS</i> ($m.s^{-1}$)	0,53
<i>FB</i>	0,56
<i>NMSE</i>	0,25
<i>MAE</i>	0,53
<i>FACT2</i>	0,70
ρ	0,98

A Tabela 9 mostra a influência dos erros na parametrização de σ_v nos resultados do modelo. Nesta Tabela, é apresentada a comparação

¹⁵ Valor não calculado devido a ausência de dados

da eficiência do AERMOD utilizando σ_v medido e estimado. Pode-se verificar que todas as métricas estatísticas são otimizadas quando o modelo usa as observações de σ_v . Através dos valores médios do *Fractional Bias* (*FB*) é possível afirmar que a implementação destas últimas observações no AERMOD pode culminar em uma melhoria de em torno de 40% (de 67% para 22% em tempo de média de 10 minutos) nas estimativas dos coeficientes laterais e de 30% das concentrações máximas, conforme valores de *FB*. Também há uma melhoria de 30% na porcentagem dos valores que se encontram dentro da faixa estabelecida no *FACT2*. Os valores de *NMSE* também mostram uma redução nos erros aleatórios e sistemáticos de σ_y e C_{max} quando o modelo emprega os referidos dados observados.

Apesar da implementação das observações de σ_v no AERMOD causarem reflexo importante na dispersão lateral da pluma de poluentes, ainda é possível verificar uma grande margem de erro na determinação das concentrações máximas, principalmente devido aos erros na parametrização da dispersão vertical. Isso pode ser visto através dos valores de *FACT2*, onde não há diferença significativa nas estimativas de C_{max} pelo AERMOD.

É possível afirmar que com a utilização de medições de σ_v a pluma simulada pelo AERMOD se dispersa menos e se aproxima mais da realidade. No entanto, mesmo após a implementação das observações de σ_v , o modelo superestima, em uma ordem crescente, o espalhamento lateral da pluma à medida que é reduzido o tempo de média e, conseqüentemente, são subestimadas as concentrações máximas. Nota-se através do *FB* que o erro na estimativa de σ_y passa de 22% para 71% quando o tempo de média é reduzido de 10 minutos para 30 segundos. Os erros após a utilização de observações de σ_v ainda apresentam valores elevados quando o tempo de média é de 30 segundos. Através da métrica *NMSE* verifica-se que o somatório de erros sistemáticos e aleatórios cresce para σ_y e C_{max} com a redução do tempo de média.

O coeficiente ρ aponta que a redução do tempo de média também reduz a correlação entre as simulações do AERMOD e as observações em campo. Em escalas de tempo reduzidas, os processos turbulentos considerados como estocásticos se sobressaem aos que podem ser descritos com facilidade pelos modelos matemáticos. O desvio padrão da posição do centro da pluma, observado em Round Hill II, por exemplo, tende a crescer com a redução o tempo de média, conforme já visto na Tabela 2. Além disso, as medições de σ_v foram efetuadas a cada

10 minutos, não correspondendo com os tempos de média das medições das concentrações de 3 minutos e 30 segundos. Essa é uma possível razão para a deterioração dos resultados em tempos de média menores que 10 minutos.

Tabela 9: Métricas estatísticas da comparação entre observações em diferentes tempos de média em Round Hill II e simulações com o AERMOD utilizando σ_y estimado e medido no respectivo experimento.

Métrica estatística	Tempo de Média	AERMOD σ_y		AERMOD C_{max}	
		σ_y medida	σ_y modelada	σ_y medida	σ_y modelada
<i>BIAS</i> (m)	10 min	2,7	15,5	-96,9	-114,3
	3 min	7,2	20,0	-129,0	-147,3
	0,5 min	11,0	23,7	-151,1	-169,0
<i>FB</i>	10 min	0,22	0,67	-1,15	-1,51
	3 min	0,45	0,88	-1,26	-1,59
	0,5 min	0,71	1,10	-1,26	-1,59
<i>NMSE</i>	10 min	0,02	0,40	2,52	8,08
	3 min	0,20	0,94	3,14	9,42
	0,5 min	0,59	1,68	3,88	11,11
ρ	10 min	0,81	0,69	0,93	0,86
	3 min	0,84	0,79	0,94	0,89
	0,5 min	0,74	0,78	0,90	0,85
<i>FACT2</i>	10 min	0,77	0,40	0,07	0,03
	3 min	0,70	0,20	0,03	0,00
	0,5 min	0,40	0,03	0,10	0,00
<i>MAE</i>	10 min	6,8	17,4	96,95	114,31
	3 min	7,7	20,0	128,99	147,33
	0,5 min	11,0	23,7	151,12	169,04

Conforme esperado, ao serem implementada medições de σ_y no AERMOD é reduzido o erro absoluto na estimativa da σ_y .

4.3. ADAPTAÇÃO DO COEFICIENTE DE DISPERSÃO LATERAL DO AERMOD PARA PREVISÃO DE CONCENTRAÇÕES EM TEMPOS DE MÉDIA CURTOS

O Item 4.1 mostrou que a estimativa da dispersão lateral do AERMOD possui erros sistemáticos e que a magnitude dos mesmos cresce a medida em que é decrescido o tempo de média em que se deseja calcular as concentrações. Mesmo após a implementação de σ_v observada, estes erros persistem, evidenciando os erros de tendências, que podem ser corrigidos (Item 4.2).

Os subitens a seguir apresentam os ajustes propostos por este trabalho com o intuito adequar os coeficientes de dispersão lateral do AERMOD para o cálculo de concentrações em diversos tempos de média. O sucesso destes ajustes podem representar novas aplicações para o software AERMOD em especial para os casos onde se investigam impactos ambiental decorrentes de concentrações em curto espaço de tempo, o que é o caso dos odores e contaminantes altamente tóxicos. Este ponto representa a maior contribuição acadêmica para esta tese na área da poluição atmosférica.

4.3.1. Ajustes dos parâmetros α e p

Reapresentando a Equação 17, tem-se:

$$\sigma_y = (\sigma_v x) / \tilde{u}(1 + \alpha X)^p \quad (17)$$

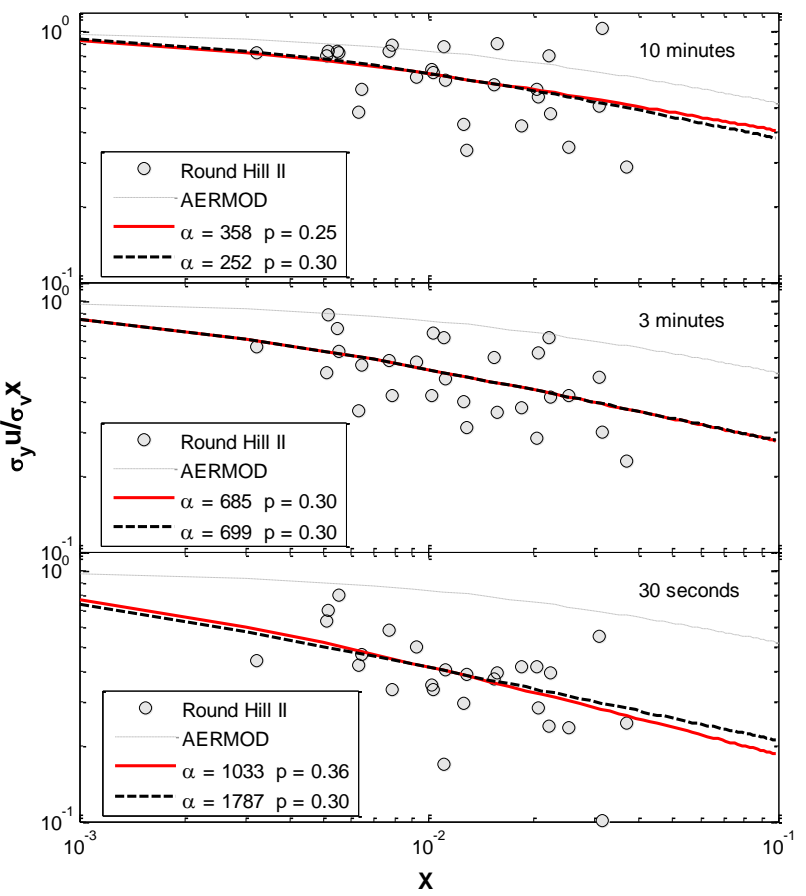
Onde, $X = \sigma_v x / \tilde{u} z_i$ e $\alpha = z_i / l$.

Sabendo que os coeficientes α e p podem ser determinados de forma empírica, a Figura 19 mostra o arranjo realizado para encontrar tais coeficientes utilizando o experimento de Round Hill II. O procedimento efetuado é análogo ao contido no manual do AERMOD. A respectiva figura apresenta o melhor ajuste entre os dados determinados pela Equação 17 e os dados observados (linha vermelha), bem como a formulação padrão do AERMOD (linha pontilhada). No AERMOD α é igual a 78 e p 0,3. Nota-se a partir da Figura 19 que as observações se distanciam bastante das formulações originais do AERMOD, para todos os tempos de média. Os coeficientes dos

melhores ajustes estão presentes na Tabela 10. As métricas estatísticas dos ajustes estão presentes na Tabela 11.

Através da Figura 19 é possível inferir que p exerce pouca influência no ajuste da Equação 17, uma vez que se for fixado seu valor em 0,3 a curva tracejada praticamente se sobrepõe ao melhor ajuste encontrado. Nesta situação apenas o valor de α foi ajustado.

Figura 19: Dispersão lateral em função da distância adimensional X. Melhor ajuste entre Equação 17 e dados observados no experimento de Round Hill II em tempos de média de 10, 3 e 0,5 minutos. Escala logarítmica.



Fonte: Autor

Tabela 10: Coeficientes α e p originais do AERMOD e encontrados no experimento de Round Hill II.

Ajustes	α	p
AERMOD (original)	78	0,30
Round Hill II – 10min	358	0,25
Round Hill II – 3min	685	0,30
Round Hill II – 30sec	1033	0,36

Conforme esperado, todas as métricas estatísticas da Tabela 11 mostram que a curva de melhor ajuste (linhas vermelhas e tracejada) se adequa melhor às observações do que a formulação original do AERMOD.

Tabela 11: Métricas estatísticas entre valores de $\sigma_{y^u}/\sigma_{v^x}$ e X observados e curva de melhor ajuste e configuração original do AERMOD com valor de α igual a 78 e p igual a 0,3.

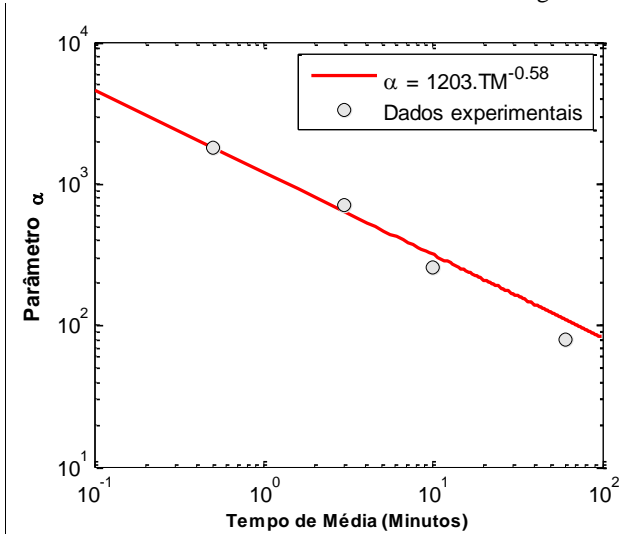
Métrica	AERMOD			Melhor ajuste		
	10 min	3 min	30 seg	10 min	3 min	30 seg
<i>BIAS</i>	-0,15	-0,30	-0,41	0,00	0,00	0,00
<i>FB</i>	-0,25	-0,48	-0,73	-0,04	-0,04	-0,06
<i>NMSE</i>	0,04	0,21	0,53	0,00	0,00	0,00
ρ	0,44	0,53	0,55	0,44	0,53	0,55
<i>FACT2</i>	0,89	0,67	0,37	1,00	1,00	0,93
<i>MAE</i>	0,20	0,30	0,41	0,13	0,12	0,10

A Figura 20 apresenta o gráfico de correspondência entre valores de α e seu tempo de média. Foi assumido que o valor de α igual a 78 corresponde ao tempo de média de 60 minutos, conforme formulação original do AERMOD. Verifica-se que a relação entre estas duas variáveis segue uma função de potência, analogamente à Equações 24 e 25, do fator P-M proposta por Turner. Através do melhor ajuste entre observações e uma curva teórica obteve-se a equação de correspondência entre tempo de média e valor de α :

$$\alpha = 1203 \cdot TM^{-0,58} \tag{36}$$

Onde, TM é o tempo de média.

Figura 20: Relação entre tempo de média e valor de α (dados experimentais). Equação que relaciona alfa e tempo de média representada pela linha contínua vermelha. Gráfico em escala logarítmica.



Fonte: Autor

De acordo com o gráfico da Figura 20, há um incremento nos valores de α ao ser reduzido o tempo de média. Isso ocorre pois α é inversamente proporcional à escala da turbulência lateral (l) (Equação 17). A escala da turbulência lateral (l) é uma propriedade física relacionada a maior escala turbulenta ou vórtice que contém energia em um fluido turbulento. Ao ser reduzido o tempo de média, é limitado o número de escalas de turbulências que participam da dispersão efetiva da pluma. Em valores baixos de l , são encontrados valores altos de α que por sua vez resulta em valores baixos de σ_y , calculado através da Equação 17. Isso pode ser explicado fisicamente quando visualiza-se uma pluma instantânea, onde apenas as escalas turbulentas do tamanho da pluma participam do processo de dispersão (vide Figura 8). Nesta última situação, as escalas turbulentas maiores apenas modificam a posição do centro da pluma sem dispersá-la. Por isso, ao adotar α com valores altos (encontrados com baixos valores de l), não são incluídas

os vortex turbulentos com dimensões maiores do que a pluma na dispersão da mesma. Por outro lado, ao adotar valores de α reduzidos, as influências das escalas turbulentas mais amplas (valores elevados de l), que alteram o eixo da pluma, são incluídas nos efeitos dispersivos. Nesta situação há um incremento no valor de σ_y , devido a inclusão da alteração do eixo da pluma na dispersão da mesma.

Hanna (1984) já havia comentado que os modelos de dispersão como os gaussianos poderiam ser ajustados através do parâmetro t_L (escala de tempo lagrangeana). Este último parâmetro está intimamente relacionado a α , de acordo com a Equação 37

$$t_L = z_i / \alpha \sigma_v \quad (37)$$

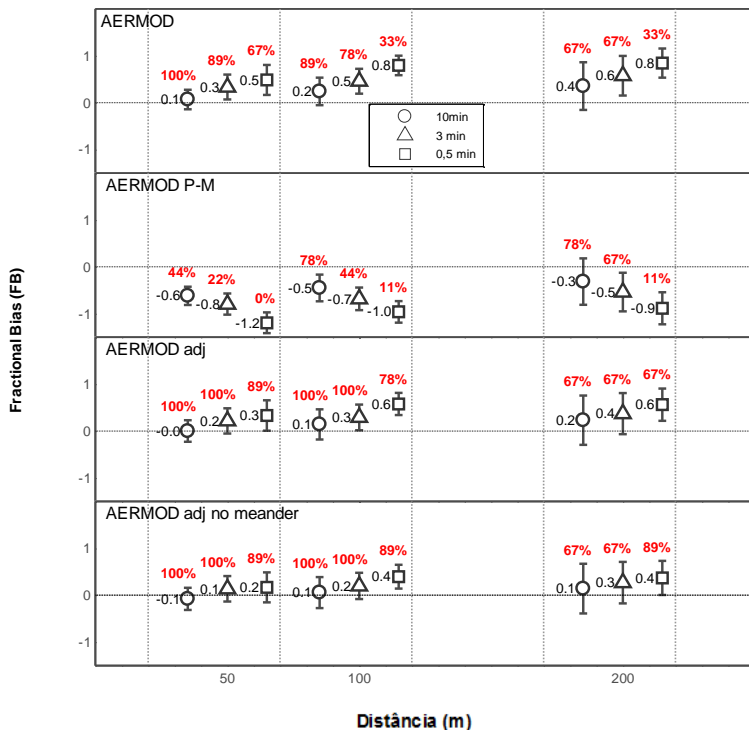
Onde, z_i é a altura da camada limite e σ_v o desvio padrão da velocidade lateral do vento.

4.3.2. Comparação entre AERMOD ajustado e padrão com a base da dados de Round Hill II

A Figura 21 compara o *FB* do AERMOD original, AERMOD com P-M e com o ajuste (AERMOD Adj) proposto no Item 4.3.1, para cada TM (10, 3 e 0,5 minutos). A configuração sem considerar o tratamento da flutuação do centro da pluma também foi avaliada no modelo ajustado (AERMOD adj *no meander*). Os modelos foram comparados utilizando valor de σ_v medido. Na Figura 21, o *FB* é apresentado em função da distância entre a fonte e o arco de receptores. Pode ser visto que o *FB* e o *FACT2* são aprimorados quando compara-se AERMOD original e Adj. Comparando o AERMOD P-M e AERMOD Adj para tempos de média de 30 segundos, há diferenças significativas nas estimativas da dispersão lateral, onde o ajuste proposto obteve o melhor desempenho. Em tempos de média superiores a 30 segundos, o ajuste alcançou resultados superiores ao AERMOD P-M, conforme verificado nos valores de *FB* e *FACT2*.

Quando testada a configuração AERMOD Adj *no meander*, os resultados foram ainda melhores, onde o *FB* é reduzido em até 40% em relação ao modelo original e, em até 20% comparado com a versão já ajustada. Nota-se que o ajuste é coerente em todas as distâncias e TM avaliados. É possível verificar também uma leve superestimativa dos valores de σ_y ao ser reduzido o tempo de média e incrementada a distância em relação à fonte.

Figura 21: *Fractional Bias* (FB) entre observações e previsões pelo AERMOD padrão, AERMOD com P-M e o ajuste proposto para 30 segundos de média (AERMOD Adj e AERMOD Adj *no meander*). Resultados utilizando σ_v medido.



Fonte: Autor

O detalhamento das métricas estatísticas, considerando todo o conjunto de dados, está presente na Tabela 12. Nessa tabela, pode ser visto o aprimoramento da dispersão lateral do AERMOD, após o ajuste proposto, utilizando σ_v medido. A partir da Tabela 12 é possível afirmar que houve uma melhoria em torno de 20% nas métricas estatísticas, com o ajuste proposto. Apenas as correlações se mantiveram semelhantes. A configuração sem o tratamento da flutuação do centro da pluma (AERMOD adj *no meander*) apresentou os melhores índices estatísticos.

Tabela 12: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Round Hill II e previsões pelo AERMOD original (sem fator P-M) e ajustes propostos (AERMOD Adj e AERMOD Adj *no meander*).

Métrica	Tempo de média	σ_y Medido		
		AERMOD σ_y	AERMOD Adj σ_y	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	10 min	2,7	0,57	-1,03
	3 min	7,2	3,63	2,03
	0,5 min	11,0	6,05	3,27
<i>FB</i>	10 min	0,22	0,12	0,04
	3 min	0,45	0,29	0,20
	0,5 min	0,71	0,49	0,31
<i>NMSE</i>	10 min	0,02	0,00	0,00
	3 min	0,20	0,06	0,02
	0,5 min	0,59	0,24	0,08
ρ	10 min	0,81	0,80	0,79
	3 min	0,84	0,83	0,82
	0,5 min	0,74	0,72	0,72
<i>FACT2</i>	10 min	0,77	0,89	0,89
	3 min	0,70	0,89	0,89
	0,5 min	0,40	0,78	0,89
<i>MAE</i>	10 min	6,8	6,27	5,95
	3 min	7,7	5,49	4,60
	0,5 min	11,0	6,18	6,18

O reflexo da implementação do ajuste proposto na determinação de concentrações máximas pode ser visto na Tabela 13. Através desta tabela, verifica-se que há uma melhoria significativa nas métricas estatísticas. No entanto, o AERMOD Adj e AERMOD Adj *no meander* também subestima na ordem de 88 a 101% as observações, utilizando σ_y medido. Supõe-se que os erros na dispersão vertical dos poluentes prejudicam na previsão das concentrações máximas neste caso.

Tabela 13: Métricas estatísticas entre observações da concentração máxima em Round Hill II e previsões pelo AERMOD original e ajustes propostos (AERMOD Adj e AERMOD Adj *no meander*).

Métrica	Tempo de média	σ_v Medido		
		AERMOD C_{max}	AERMOD Adj C_{max}	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	10 min	-96,9	-93,64	-90,97
	3 min	-129,0	-122,02	-119,13
	0,5 min	-151,1	-140,32	-133,06
<i>FB</i>	10 min	-1,15	-1,05	-0,98
	3 min	-1,26	-1,09	-1,03
	0,5 min	-1,26	-1,01	-0,89
<i>NMSE</i>	10 min	2,52	2,12	1,85
	3 min	3,14	2,31	2,06
	0,5 min	3,88	2,50	1,92
ρ	10 min	0,93	0,93	0,91
	3 min	0,94	0,93	0,92
	0,5 min	0,90	0,90	0,88
<i>FACT2</i>	10 min	0,07	0,11	0,15
	3 min	0,03	0,11	0,15
	0,5 min	0,10	0,19	0,22
<i>MAE</i>	10 min	96,95	93,70	91,07
	3 min	128,99	122,02	119,13
	0,5 min	151,12	140,34	133,55

Ao sintetizar os resultados do presente item, é possível afirmar que as modificações propostas neste trabalho melhoram o desempenho do AERMOD para a previsão da dispersão lateral em TM menores que 10 minutos. Com isso, para que estas informações sejam consistentes é necessário que o método aqui proposto seja testado em outra base de dados para sua validação.

4.4. VALIDAÇÃO DO AERMOD ADAPTADO NO CÁLCULO DA DISPERSÃO DE ODORES

No Item 4.3 o AERMOD foi ajustado e testado utilizando a base de dados de Round Hill II. No presente item, AERMOD original, AERMOD Adj e AERMOD Adj *no meander* são avaliados utilizando uma outra base de dados independente da primeira aqui utilizada, neste caso, a base de dados de Uttenweiller, da Alemanha. A Tabela 14 apresenta as condições meteorológicas médias do experimento, bem como a dispersão lateral observada. Os dados meteorológicos são referentes aos dias em que o experimento foi executado, durante os dias 13 de outubro de 2000 e 31 de outubro de 2001. As condições meteorológicas do experimento variaram entre levemente instáveis e estáveis.

Para testar o modelo foram calculadas as dispersões laterais observadas a cada 10 segundos e 1 minuto nos receptores. Também foi realizada a média da dispersão lateral de 10 segundos a cada 1 minuto de amostragem (10 seg média) para remover as discrepâncias das observações. Como pode ser visto na Tabela 14, a dispersão lateral de 10 seg média possui valor semelhante a média a cada 10 segundos (10 seg), entretanto, com D.P. inferior. Médias de 1 minuto nos receptores (1 minuto), representam amostragem mais longas em que o efeito da flutuação do centro da pluma começa a ser somado ao valor de σ_y .

Tabela 14: Condições meteorológicas médias e Desvio Padrão. Dispersão lateral observada de 10 segundos, média de 10 segundos a cada 1 minuto (10 seg média) e média de 1 minuto nos receptores (1 minuto).

Variável		Média \pm D.P.
σ_y	10 seg	14,6 \pm 6,9
	10 seg média	14,3 \pm 4,6
	1 minuto	17,1 \pm 6,7
Temperatura (°C)		11,7 \pm 4,1
Vel. Vento (m/s)		4,3 \pm 1,6
σ_v (m/s)		0,7 \pm 0,2
σ_w (m/s)		0,4 \pm 0,1

4.4.1. Dispersão lateral em tempo de média de 10 segundos

Na Tabela 15, estão contidas as métricas estatísticas entre observações e previsões pelo AERMOD original (com e sem P-M), AERMOD Adj e AERMOD Adj *no meander*. Os modelos foram testados utilizando σ_v medido (a cada 10 segundos). Foi considerado um TM de 30 segundos para calcular os ajustes do modelo pela Equação 36. Este TM foi adotado por ser o menor tempo de média em que a Equação 36 é válida. Para TM menores que 30 segundos aumenta a incerteza da referida equação. O fator P-M utilizado foi de 6,79 (para tempo de média de 30 segundos).

Os resultados alcançados indicam que o ajuste realizado aprimora o AERMOD utilizando σ_v medido. O modelo ajustado obtém valores de *FB* de 3%, *Bias* de 1,67 metros e o *FACT2* passa de 68% para 72%. No entanto, ao ser removido o tratamento da flutuação do centro da pluma (AERMOD Adj *no meander*), o modelo ajustado tem seu desempenho deteriorado, pois o *FB* decresce de 3% para -21%. Apesar disso, o AERMOD Adj *no meander*, apresenta *Bias*, *FB* e *MAE* com índices melhores do que a versão original do modelo. Nota-se que o emprego do fator P-M deteriora o funcionamento do AERMOD para tempos de média de 10 segundos, quando o mesmo é testado na base de dados de Uttenweiller.

Tabela 15: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller a cada 10 segundos e previstas pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original (com e sem P-M). Cálculos utilizando σ_v medido.

Previsões x Observações - σ_v 10seg - σ_v Medido				
Métrica	AERMOD	AERMOD P-M	AERMOD Adj	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	6,68	-11,88	1,67	-3,41
<i>FB</i>	0,42	-1,38	0,03	-0,21
<i>NMSE</i>	0,15	4,93	0,01	0,66
ρ	-0,17	-0,17	0,09	-0,09
<i>FACT2</i>	0,61	0,07	0,62	0,57
<i>MAE</i>	9,49	11,91	8,96	7,06

A comparação das configurações do AERMOD utilizando σ_v estimado (a cada 10 segundos) para TM de 10 segundos está presente na Tabela 19.

Comparando as Tabelas 15 e 16, nota-se que o AERMOD melhorou sem desempenho ao não empregar medições de σ_v , diferentemente do ocorrido quando o modelo foi testado na base de dados de Round Hill II. A provável subestimativa de σ_v pode ter compensado os erros na estimativa de σ_y pelo AERMOD, culminando em menores valores *Bias* das estimativas de σ_y . Verifica-se uma menor correlação entre observações e estimativas de σ_y , conforme o valores do coeficiente de correlação (ρ) nas Tabela 15 e 16. As comparações foram efetuadas utilizando médias de 10 segundos em Uttenweiller, sendo estas menos comportadas e, conseqüentemente, mais complexas de serem descritas quando comparadas as médias em Round Hill II.

Ao comparar a configuração do AERMOD original e as propostas neste trabalho, verifica-se que o modelo ajustado alcançou melhores índices estatísticos na situação onde não há medições de σ_v . Nesta mesma ocasião, o modelo AERMOD Adj *no meander* obteve resultados um pouco superiores a configuração original deste mesmo modelo, onde o *Bias* e os erros absolutos (*MAE*) são reduzidos.

Tabela 16: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller a cada 10 segundos e previstas pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original. Cálculos utilizando σ_v estimado.

Previsões x Observações - σ_y 10seg - σ_v Estimado			
Métrica	AERMOD	AERMOD Adj	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	5,92	1,76	-3,98
<i>FB</i>	0,30	0,06	-0,30
<i>NMSE</i>	0,12	0,01	0,11
ρ	-0,04	0,06	0,02
<i>FACT2</i>	0,54	0,63	0,51
<i>MAE</i>	10,59	8,89	7,35

A implementação do algoritmo PRIME também foi testada com o intuito de incluir o efeito da edificação localizada abaixo da chaminé, que emite os compostos odorantes. A configuração com o PRIME foi

avaliada com utilização de σ_v medido e estimado (σ_v Estimada + PRIME). Vale frisar que o PRIME é um algoritmo que corrige as estimativas de σ_v pelo AERMOD e calcula o rebaixamento da pluma em presença de obstáculos. Os resultados desta avaliação estão presentes na Tabela 17.

Ao ser implementado o PRIME há uma melhoria importante no desempenho do AERMOD em algumas configurações testadas. O modelo com o ajustes proposto neste trabalho e sem o tratamento da flutuação do centro da pluma (AERMOD Adj *no meander*) alcançou o melhor desempenho, reduzindo os valores de *Bias*, *FB*, *NMSE* e *MAE*. Também é acrescida a faixa de valores dentro do *FACT2* nesta configuração. A versão original também acusou melhorias com a implementação do PRIME, entretanto, piores que o AERMOD Adj *no meander*. Já a configuração AERMOD Adj não foi otimizada com o emprego do PRIME.

Tabela 17: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller a cada 10 segundos e previstas pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original. Cálculos utilizando σ_v medido e estimado com a implementação do algoritmo PRIME.

Previsões x Observações - σ_v 10seg - σ_v Medido e Estimado com PRIME						
Métrica	AERMOD + PRIME		AERMOD Adj +PRIME		AERMOD Adj no meander +PRIME	
	σ_v Medido	σ_v Estimado	σ_v Medido	σ_v Estimado	σ_v Medido	σ_v Estimado
<i>BIAS (m)</i>	6,43	5,31	-3,47	-2,36	0,71	-0,90
<i>FB</i>	0,34	0,24	-0,25	-0,14	0,14	0,00
<i>NMSE</i>	0,14	0,11	0,05	0,02	0,00	0,00
ρ	0,01	0,07	-0,09	0,06	-0,14	0,03
<i>FACT2</i>	0,60	0,60	0,63	0,63	0,66	0,63
<i>MAE</i>	10,06	10,64	8,55	8,89	6,70	6,81

Os métodos de estimativa da dispersão lateral de Höglström, P.G. e Draxler também foram testados nesta condição. Os resultados desta avaliação estão presentes na Tabela 18.

Tabela 18: Métricas estatísticas entre observações a cada 10 segundos em Uttenweiller e previsões da dispersão lateral dos métodos de Högström, P.G., Draxler e o AERMOD original com fator P-M.

Previsões x Observações - σ_y 10seg			
Métrica	Högström	P.G.	CALPUFF/ Draxler s/ P-M
<i>BIAS (m)</i>	-6,27	-4,27	3,76
<i>FB</i>	-0,42	-0,32	0,22
<i>NMSE</i>	0,36	0,12	0,05
ρ	-0,17	-0,10	0,15
<i>FACT2</i>	0,51	0,51	0,71
<i>MAE</i>	7,22	8,76	8,48

Entre os outros métodos testados, Draxler obteve o melhor desempenho na base de dados de Uttenweiller. No entanto, as métricas estatísticas indicam que a configuração AERMOD Adj *no meander* com a implementação do PRIME alcançou o melhor desempenho entre todos os modelos na previsão das observações de σ_y em tempo de média de 10 segundos.

4.4.2. Média dos últimos 6 valores da dispersão lateral em tempo de média de 10 segundos

Conforme supracitado, os modelos foram avaliados comparando-os com as médias das observações da dispersão lateral das plumas obtidas em tempos de amostragem de 10 segundos. A cada minuto foi realizada uma média, ou seja, foi extraída a média de cada 6 eventos de 10 segundos (σ_y 10seg média).

Os resultados do desempenho das diferentes configurações do AERMOD utilizando σ_y medido são sumarizados na Tabela 19. A proximidade entre observações e previsões é ainda maior nesta situação. O AERMOD Adj obteve *FB* na faixa de 3%. Além disso, 100 % dos dados, modelados pelo AERMOD Adj, estão na faixa do *FACT2*, sendo que o *Bias* não ultrapassou -0,61 metros. Outra métrica que apresentou melhoria em todas as conjunturas testadas foi a correlação de Spearman (ρ).

Tabela 19: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original (com e sem P-M). Cálculos utilizando σ_y medido. Média a cada minutos das observações de 10 segundos.

A Previsões x Observações $-\sigma_y$ 10seg média σ_y Medido				
Métrica	AERMOD	AERMOD P-M	AERMOD Adj	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	5,63	-11,61	0,61	-3,25
<i>FB</i>	0,38	-1,48	0,03	-0,25
<i>NMSE</i>	0,12	5,17	0,00	0,07
ρ	0,23	0,23	0,66	0,41
<i>FACT2</i>	0,85	0,00	1,00	0,85
<i>MAE</i>	6,86	11,61	3,68	4,04

A Tabela 20 apresenta o desempenho do AERMOD original e com os ajustes propostos neste trabalho, utilizando σ_y estimado. Assim como para as médias de 10 segundos, o AERMOD original obteve melhores resultados ao não serem utilizados valores medidos de σ_y . Novamente, a propagação de erros na estimativa de σ_y pode ter causado reflexo positivo na estimativa de σ_y . Nota-se que a utilização de σ_y estimado deteriora o desempenho do AERMOD Adj e AERMOD Adj *no meander*. Entre as conjunturas testadas, o AERMOD Adj apresentou os menores erros sistemáticos, evidenciados pelos valores de *Bias* e *FB*, enquanto o modelo original obteve o maior número de valores dentro do *FACT2* e menor *MAE*. Nesta situação, a remoção do tratamento da flutuação do centro da pluma fez com que o modelo ajustado subestimasse as observações de σ_y . A conjuntura testada que gerou o pior desempenho no AERMOD foi a original com correção P-M.

Tabela 20: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original. Cálculos utilizando σ_y estimado. Média a cada minutos das observações de 10 segundos.

A Previsões x Observações – σ_y 10seg média			
σ_y Estimado			
Métrica	AERMOD	AERMOD Adj	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	2,67	-0,57	-4,64
<i>FB</i>	0,20	0,08	-0,41
<i>NMSE</i>	0,03	0,00	0,17
ρ	0,77	0,79	0,71
<i>FACT2</i>	1,00	0,92	0,92
<i>MAE</i>	3,25	5,25	4,83

Os resultados do emprego do PRIME nas diferentes configurações do AERMOD testadas para prever σ_y 10seg média são apresentados na Tabela 21. Verifica-se que a conjuntura AERMOD Adj *no meander* + PRIME apresentou menores valores de Bias e FB comparado esta mesma configuração sem utilizar o PRIME (Tabelas 20 e 21). A conjuntura AERMOD Adj *no meander* + PRIME também foi a que apresentou, em geral, a melhor performance, reduzindo ambos erros sistemáticos e aleatórios em relação a versão original do modelo. Vale frisar que o AERMOD Adj *no meander* subestimou as observações de σ_y de Uttenweiller sem a implementação do PRIME. A correção do rebaixamento da pluma e turbulência oferecida pelo PRIME provavelmente otimizou o desempenho do AERMOD Adj *no meander*.

Tabela 21: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original. Cálculos utilizando σ_v medido e estimado com a implementação do algoritmo PRIME. Média a cada minutos das observações de 10 segundos.

A Previsões x Observações - σ_y 10seg média						
σ_v Medido e Estimado com PRIME						
Métrica	AERMOD + PRIME		AERMOD Adj +PRIME		AERMOD Adj <i>no meander</i> +PRIME	
	σ_v Medido	σ_v Estimado	σ_v Medido	σ_v Estimado	σ_v Medido	σ_v Estimado
<i>BIAS (m)</i>	-8,10	-4,62	-1,53	0,66	-0,18	-0,82
<i>FB</i>	-0,36	-0,20	-0,15	0,01	-0,01	-0,06
<i>NMSE</i>	0,21	0,08	0,01	0,00	0,00	0,00
ρ	0,55	0,83	0,40	0,80	0,01	0,59
<i>FACT2</i>	0,85	0,85	1,00	1,00	0,85	0,95
<i>MAE</i>	8,84	5,73	3,58	2,39	4,32	3,66

A Tabela 22 mostra que, em relação aos outros métodos, Draxler alcançou o melhor ajuste com as observações. Mesmo sem o emprego do fator P-M, este último apresentou *FACT2* igual a 100%. Draxler também apresentou coeficiente de correlação de 0,8 e *FB* de 21%.

Tabela 22: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas nos métodos de Högström, P.G., Draxler e o AERMOD original com fator P-M. Cálculos utilizando σ_v medido, estimado e estimado com implementação do PRIME. Média a cada minuto das observações de 10 segundos.

Previsões x Observações - σ_y 10seg média			
Métrica	Högström	P.G.	CALPUFF/ Draxler s/ P-M
<i>BIAS (m)</i>	-5,64	-4,90	3,13
<i>FB</i>	-0,47	-0,38	0,21
<i>NMSE</i>	0,29	0,18	0,04
ρ	-0,34	-0,10	0,80
<i>FACT2</i>	0,62	0,65	1,00
<i>MAE</i>	6,45	5,89	3,46

A partir dos resultados pode ser afirmado que a configuração mais adequada para prever σ_y 10seg média é a AERMOD Adj *no meander* + PRIME. Teóricamente a configuração com o PRIME é a mais indicada para Uttenweiller, visto que existem edificações que podem afetar a dispersão dos poluentes. Os ajustes propostos neste trabalho otimizam o funcionamento do modelo para previsões em tempos de média de 10 segundos.

4.4.3. Dispersão lateral em tempo de média de 1 minuto

Para avaliar o ajuste proposto no Item 4.3.1 e a Equação 36, que relaciona o parâmetro α e o tempo de média em que se deseja calcular as concentrações, foram realizadas médias de 1 minuto nos receptores do experimento de Uttenweiller (σ_y 1minuto). O ajuste do AERMOD para cálculos em média de 1 minuto foi feito utilizando a Equação 36, estabelecendo TM igual a 1 (AERMOD Adj). Também foram testados o AERMOD original (com e sem P-M) e o AERMOD Adj *no meander*. As métricas estatísticas desta avaliação empregando a σ_v medido estão presentes na Tabela 23.

Ao utilizar medições da σ_v (desvios da velocidade horizontal), o AERMOD Adj e original alcançaram os melhores resultados para o cálculo em média de 1 minuto. O *FB* do AERMOD Adj foi de -14%, contra 17% do original. Isso indica que o ajuste ótimo de α (*Bias* e *FB* iguais a 0) está entre a formulação original e a ajustada (entre 98 e 1203). Apesar de apresentar algumas melhorias nas métricas estatísticas, o AERMOD Adj subestima as observações. A configuração AERMOD Adj *no meander* subestima as observações de σ_y 1minuto.

Tabela 23: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original. Cálculos utilizando σ_v medido. Média de 1 minuto nos receptores.

A Previsões x Observações $-\sigma_y$ 1minuto - σ_v Medido				
Métrica	AERMOD	AERMOD P-M	AERMOD Adj	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	1,63	-13,72	-3,26	-6,27
<i>FB</i>	0,17	-1,21	-0,14	-0,37
<i>NMSE</i>	0,01	2,97	0,04	0,21
ρ	0,08	0,08	0,19	0,16
<i>FACT2</i>	0,85	0,08	0,85	0,69
<i>MAE</i>	6,34	13,72	6,30	7,60

Na Tabela 24 estão contidas as métricas entre observações de σ_y 1minuto e previsões utilizando σ_v estimado. Neste caso, o modelo original obteve os melhores índices estatísticos. Assim como ocorrido na previsão de σ_y 10seg e σ_y 10seg média, a subestimativa de σ_v pode ter compensado a superestimativa natural da determinação de σ_y da versão original do AERMOD, reduzindo os erros sistemáticos. Nota-se que o *Bias* é menor utilizando σ_v estimado (1,34 metros – Tabela 24) quando comparado a esta mesma configuração utilizando σ_v medido (1,63 metros – Tabela 23).

Tabela 24: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original. Cálculos utilizando σ_v estimado. Média de 1 minuto nos receptores.

A Previsões x Observações $-\sigma_y$ 1minuto - σ_v Estimado			
Métrica	AERMOD	AERMOD Adj	AERMOD Adj <i>no meander</i>
<i>BIAS (m)</i>	1,34	-4,65	-7,87
<i>FB</i>	0,01	-0,21	-0,52
<i>NMSE</i>	0,01	0,10	0,38
ρ	0,13	0,12	0,32
<i>FACT2</i>	0,85	0,92	0,69
<i>MAE</i>	5,67	6,53	8,50

A Tabela 25 sumariza os índices estatísticos da avaliação das diferentes conjunturas do AERMOD testadas na previsão de σ_v 1minuto com a implementação do PRIME. Os resultados alcançados pelos modelos ajustados utilizando a σ_v medido e estimado, nas Tabelas 23 e 24, mostram que os mesmos tendem a subestimar as observações. Fazendo o uso do PRIME (configuração mais realística para a situação), foi alcançada uma melhoria importante nos modelos ajustados, onde reduziram-se os erros sistemáticos (*Bias* e *FB*). No entanto, a versão original do AERMOD alcançou a melhor performance quando abdicado o uso de σ_v medido. Conforme supracitado, a compensação de erros pode ter auxiliado o modelo original a alcançar tal resultado. Utilizando o PRIME e σ_v medido, o AERMOD Adj obteve o melhor desempenho, seguido pelo AERMOD Adj *no meander*, o que mostra a consistência dos ajustes propostos neste trabalho.

Tabela 25: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas pelo pelo AERMOD Adj, AERMOD Adj *no meander* e original. Cálculos utilizando σ_v medido e estimado com a implementação do algoritmo PRIME. Média de 1 minuto nos receptores.

A Previsões x Observações $-\sigma_v$ 1minuto						
σ_v Medido e Estimado com PRIME						
Métrica	AERMOD + PRIME		AERMOD Adj +PRIME		AERMOD Adj +PRIME	
	σ_v Medido	σ_v Estimado	σ_v Medido	σ_v Estimado	σ_v Medido	σ_v Estimado
<i>BIAS (m)</i>	4,09	0,62	-2,48	-4,66	-3,62	-3,64
<i>FB</i>	0,15	-0,01	-0,06	-0,21	-0,14	-0,20
<i>NMSE</i>	0,05	0,00	0,02	0,10	0,06	0,06
ρ	0,16	0,27	-0,01	0,12	-0,07	0,15
<i>FACT2</i>	0,69	0,85	0,85	0,92	0,77	0,85
<i>MAE</i>	10,31	8,80	6,27	6,54	6,52	6,45

Os resultados da avaliação dos métodos de Högström, P.G. e Draxler na base de dados de Uttenweiller, considerando tempo de média nos receptores de 1 minuto, está presente na Tabela 26. Similarmente ao ocorrido nos outros tempos de média, o método de Draxler alcançou os melhores ajustes entre previsões e observações. Para este último, o

FB foi de 7%, *MAE* igual a 4,81. Autores como Irwin (1983) já haviam relatado que o método proposto por Draxler se ajustava bem às diversas observações do espalhamento lateral de plumas de dispersão.

Tabela 26: Métricas estatísticas entre observações da dispersão lateral em Uttenweiller e previstas nos método de Högström, P.G. e Draxler. Cálculos utilizando σ_v medido, estimado e estimado com implementação do PRIME. Tempo de média de 1 minuto.

A Previsões x Observações $-\sigma_y$ 1minuto - σ_v Medido			
Métrica	Högström	P.G.	CALPUFF/ Draxler s/ P-M
<i>BIAS (m)</i>	-9,64	-7,75	0,28
<i>FB</i>	-0,65	-0,52	0,07
<i>NMSE</i>	0,70	0,37	0,00
ρ	0,05	0,00	0,37
<i>FACT2</i>	0,38	0,50	0,85
<i>MAE</i>	10,53	8,85	4,81

Os resultados permitem afirmar que a configuração AERMOD Adj *no meander* + PRIME obteve a melhor performance nas estimativas de σ_y 10seg e σ_y 10seg média. O AERMOD Adj + PRIME obteve os resultados mais consistentes na previsão de σ_y 1minuto, ao utilizar σ_v medido. A versão original do referido modelo alcançou melhores resultados quando utilizou σ_v medido, o que indica uma possível compensação de erros nas estimativas de σ_v e σ_y . Em Uttenweiller o emprego do PRIME é indicado devido a existência de obstáculos que influenciam na dispersão. Por este motivo, a utilização de tal algoritmo já era previamente indicada. A não inclusão deste efeito pode apresentar resultados inconsistentes, mesmo se os índices estatísticos apresentarem valores adequados.

5. CONCLUSÃO

Através dos resultados encontrados neste trabalho, as seguintes conclusões podem ser feitas:

A avaliação dos métodos de determinação dos coeficientes de dispersão, utilizando a base de dados de Round Hill II, mostrou que os métodos de Draxler e o empregado no AERMOD se correlacionam melhor às observações quando comparados a P.G. e Högström. Apesar disso, tanto Draxler como o AERMOD apresentam erros sistemáticos significativos sem o emprego do fator P-M. Tais erros se intensificam com a redução do tempo de média.

Com a utilização do fator P-M, há uma melhoria nos desempenhos do AERMOD e Draxler, entretanto, os erros ainda são elevados. Os resultados também mostram que a magnitude dos erros também aumenta em função da distância em relação a fonte. Estes últimos métodos tendem a subestimar o espalhamento da pluma em locais próximos e superestimar ao se distanciar da fonte. Além disso, a utilização do P-M é abstrata, pois pode assumir valores diferentes em função das condições atmosféricas. De acordo com Schauburger *et al.*(2012) os valores do expoente a na equação do P-M podem variar de 0 a 0,64. A subjetividade na definição destes valores permite que o P-M seja utilizado de forma diferente pelos usuários dos modelos, dificultando sua consolidação técnica.

A utilização das medições do desvio padrão da velocidade horizontal do vento (σ_v) do experimento de Round Hill II melhorou o desempenho do AERMOD, quando comparado sem o emprego destas medidas. Isso mostra que os erros da estimativa de σ_v podem acarretar em erros importantes na determinação de σ_y .

Com a implementação dos ajustes propostos neste trabalho, há uma melhoria importante no desempenho do AERMOD nos diferentes tempos de média, ao comparar suas previsões às observações de Round Hill II. Foi obtida uma redução significativa nos erros sistemáticos do modelo (maior que 20%), em relação a formulação original do AERMOD. Os ajustes também alcançaram melhores resultados que o a versão original do modelo, mesmo após a implementação do fator P-M. As mudanças também causam efeito positivo na determinação de concentrações máximas, uma vez que são reduzidos os erros de tendência entre dados observados e modelados, apesar de que ainda existam erros na determinação de parâmetro. As melhorias são mais evidentes ao remover o tratamento da flutuação do centro pluma

(*meandering*) realizado pelo AERMOD. Neste caso, a configuração AERMOD Adj *no meandering*, obteve a melhor performance entre as conjunturas testadas. O *Bias* e *FB* são reduzidos em até 40% em relação a versão original, quando o AERMOD Adj *no meandering* foi testado em Round Hill II para prever em TM de 30 segundos.

Ao comparar as previsões do AERMOD original e ajustado com as observações de Uttenweiller é possível afirmar que os ajustes surtem efeitos positivos no modelo. Os erros sistemáticos em tempos de média de 10 segundos se reduzem significativamente no modelo ajustado, conforme valores de *Bias* e *FB*. Caso sejam feitas médias das observações, os resultados podem ser ainda melhores, pois é também otimizada a correlação entre observações e previsões.

Com a realização de médias nos receptores do experimento de Uttenweiller, os ajustes não surtiram efeitos significativos (sem o emprego do algoritmo PRIME). Nesta situação, os modelos alcançaram resultados equivalentes. Enquanto o AERMOD original superestima as observações neste caso, o modelo ajustado subestima. Isso evidencia a necessidade de um ajuste fino da equação que determina o valor ótimo do parâmetro α . No entanto, o ajuste proposto neste trabalho não compromete o funcionamento do AERMOD.

A implementação das medições de σ_v (desvio padrão da velocidade horizontal do vento) também proporciona melhorias no desempenho do AERMOD quando testado no experimento de Uttenweiller. O acoplamento do algoritmo PRIME no AERMOD (AERMOD + PRIME) gerou bons resultados quando avaliado na base de dados de Uttenweiller, obtendo erros inferiores quando comparado ao AERMOD padrão. Entre as conjunturas testadas, o AERMOD Adj *no meander* + PRIME obteve a melhor performance na estimativa da dispersão lateral em todos os tempos de média avaliados.

Em relação aos outros métodos, Högström tem seu funcionamento otimizado com a redução do tempo de média. No entanto, apresenta erros sistemáticos significativos e não se correlaciona bem às observações. Já P.G. alcançou bons resultados ao ser testado na base de dados de Round Hill. Entretanto, apesar de apresentar erros sistemáticos pequenos (baixos valores de *Bias* e *FB*), este método apresenta coeficientes de correlação, entre suas estimativas e as observações, inferiores aos alcançados pelo AERMOD e Draxler. Ao ser avaliado na base de dados de Uttenweiller, o método de P.G. não apresentou bons resultados. Por outro lado, o método de Draxler apresentou resultados interessantes e se correlaciona bem as observações de Uttenweiller.

Em sumo, neste trabalho são apresentadas formas de melhorar o desempenho do AERMOD em tempos de média menores que 10 minutos. Através de assimilação de dados do desvio padrão da velocidade lateral do vento e correção da formulação da estimativa da dispersão alteral, o modelo apresentou melhoria significativa em relação a sua formulação original.

Por fim, os resultados alcançados mostram que a aplicabilidade do AERMOD pode ser estendida para utilização em diferentes tempos de média. No entanto, ainda é necessária uma base de dados mais robusta para obter uma equação que determine α de forma mais consistente.

6. RECOMENDAÇÕES

Após a finalização deste estudo recomenda-se

- Utilizar uma base de dados mais completa, com medições em diversos tempos de média para elaborar uma formulação mais consistente de α ;
- Utilizar outras bases de dados para avaliar o método proposto;
- Adaptar método de Draxler para realizar previsões em diversos tempo de média, visto que este método é utilizado no CALPUFF;
- Adaptar os coeficientes de dispersão vertical de forma similar ao método proposto neste trabalho;
- Após realizar os ajustes dos coeficientes de dispersão vertical, avaliar os modelos para previsão de concentrações máximas;
- Testar os modelos ajustados para previsão em terrenos complexos e em presença de obstáculos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS (ASTM). Standard Guide for Statistical Evaluation of Atmospheric Dispersion Model Performance. D6589 – 05: 17 p. 2010.
- BARAD, M. L. Project Prairie Grass: A field program in diffusion. Geophysical Research Papers v. 1, p. 275, 1958.
- BÄCHLIN, W.; RÜHLING, A.; LOHMEYER, A. 2002. Bereitstellung von validierungs-daten für geruchsausbreitungsmodelle-naturmessungen. (Baden-Württemberg, Germany).
- BEAMAN, A. L. A novel approach to estimating the odour concentration distribution in the community. Atmospheric Environment (1967), v. 22, n. 3, p. 561-567, 1988.
- BELJAARS, A. C. M.; HOLTSLAG, A. A. M. Flux Parameterization over Land Surfaces for Atmospheric Models. Journal of Applied Meteorology, v. 30, n. 3, p. 327-341, 1991/03/01 1991.
- BRIGGS, G. A. Analytical Parameterizations of Diffusion: The Convective Boundary Layer. Journal of Climate and Applied Meteorology, v. 24, n. 11, p. 1167-1186, 1985/11/01 1985.
- BUBNIK J, K. J., MACOUN J., MANAK J. SYMOS'97 Model Description. CHMI. Prague: 60 p. 1998.
- CAPELLI, L.; SIRONI, S.; DEL ROSSO, R.; CÉNTOLA, P.; ROSSI, A.; AUSTERI, C. Odour impact assessment in urban areas: case study of the city of Terni. Procedia Environmental Sciences, v. 4, n. 0, p. 151-157, 2011.
- CHANG, J. C.; FERNAU, M. E.; SCIRE, J. S.; STRIMAITIS, D. G. A Critical Review of Four Types of Air Quality Models Pertinent to MMS Regulatory and Environmental Assessment missions U.S . DEPARTMENT OF THE INTERIOR MINERALS MANAGEMENT SERVICE GULF OF MEXICO OCS REGION. New Orleans, LA: 180 p. 1998.

CHANG, J. C.; HANNA, S. R. Air quality model performance evaluation. *Meteorol Atmos Phys* 87, 167–196 2004.

CHOI, J. I.; YEO, K.; LEE, C. Lagrangian statistics in turbulent channel flow. *Physics of Fluids*, v. 16, p. 779–793, 2004.

CIMORELLI, A. J.; PERRY, S. G.; VENKATRAM, A.; WEIL, J. C.; PAINE, R. J.; WILSON, R. B.; LEE, R. F.; PETERS, W. D.; BRODE, R. W. AERMOD: A Dispersion Model for Industrial Source Applications. Part I: General Model Formulation and Boundary Layer Characterization. *Journal of Applied Meteorology*, v. 44, n. 5, p. 682–693, 2005/05/01 2005.

CORREIA, Ana Rita Filipe. Avaliação de desempenho de modelos de qualidade do ar. 2012. 139 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Ambiental, Departamento de Departamento de Ambiente e Ordenamento, Universidade de Aveiro, Aveiro, 2012.

CRAMER, H. E.; RECORD, F. A. Field Studies of Atmospheric Diffusion and the Structure of Turbulence. *American Industrial Hygiene Association Quarterly*, v. 18, n. 2, p. 126-131, 1957/06/01 1957.

DE ANDRADE, R. C. Uma nova abordagem para solução numérica de problemas de advecção e difusão multidimensional em corpos de águas naturais. (Tese de Doutorado). Programa de Pós Graduação em Engenharia Oceânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro 176 p., Rio de Janeiro.2006.

DE MELO, A. M. V.; SANTOS, J. M.; REIS JUNIOR, N. C.; MAVROIDIS, I. Modelling of atmospheric dispersion around buildings using AERMOD and CALPUFF. Comparison with wind tunnel results and applications for odour dispersion prediction. 4th IWA Conference on Odour and VOC Vitória - ES: IWA: 11 p. 2011.

DE MELO LISBOA, H. Contribution à la mise en oeuvre et à la validation de modèles de dispersion atmosphérique applicables aux composés odorants. . (Doutor). Université de Pau et des Pays de l'Adour- Ecole des Mines d'Alès. 196 p., Alès- França.1996.

DEARDORFF, J. W.; WILLIS, G. E. A Parameterization of Diffusion into the Mixed Layer. *Journal of Applied Meteorology*, v. 14, n. 8, p. 1451-1458, 1975/12/01 1975.

DIAS JÚNIOR, C. Q., Estudo comparativo da estrutura da turbulência atmosférica na camada limite superficial acima da floresta primária e região desmatada da Amazônia: Análise de ondeletas aplicada à detecção de estruturas coerentes. Dissertação de mestrado. Programa de Pós graduação em Ciências Ambientais. Universidade Federal do Pará. 94 p., Belém- Pará .2008.

DONALDSON, C. D. P., "Atmospheric turbulence and the dispersal of atmospheric pollutants", *AMS Workshop on Micrometeorology*, ed. D. A. Haugen, Science Press, Boston, pp313-390. 1973.

DOURADO, H.; SANTOS, J.; REIS JR, N.; VIEIRA DE MELO, A. M. The Effects of Atmospheric Turbulence on Peak-to-Mean Concentration Ratio and its Consequence on the Odour Impact Assessment Using Dispersion Models. *Chemical Engineering Transactions*, v. 30, p. 163-168, 2012.

DOURADO, H.; SANTOS, J. M.; REIS JR, N. C.; MAVROIDIS, I. Development of a fluctuating plume model for odour dispersion around buildings. *Atmospheric Environment*, v. 89, n. 0, p. 148-157, 6// 2014.

DOURADO, H. O. Estudo da dispersão de gases odorantes ao redor de obstáculos através do modelo de pluma flutuante. (Dissertação de Mestrado). Programa de Pós Graduação em Engenharia Ambiental Universidade Federal do Espírito Santo. 105 p., Vitória - ES.2007.

DRAHLER, R.; STUNDER, B.; ROLPH, G.; STEIN, A.; TAYLOR, A. *HYSPLIT4 User's Guide*. 4 2012.

DRAHLER, R. R. Determination of atmospheric diffusion parameters. *Atmospheric Environment* (1967), v. 10, n. 2, p. 99-105, 1975.

DREW, G. H.; SMITH, R.; GERARD, V.; BURGE, C.; LOWE, M.; KINNERSLEY, R.; SNEATH, R.; LONGHURST, P. J. Appropriateness of selecting different averaging times for modelling

chronic and acute exposure to environmental odours. *Atmospheric Environment*, v. 41, n. 13, p. 2870-2880, 2007.

FOKEN, T. 50 years of the Monin-Obukhov similarity theory. *Boundary-Layer Meteorology*, 2006.

FREIRE, L. S., Teorias de Camada Limite Atmosférica: modelo de crescimento, fluxo de entranhamento e análise espectral. Dissertação de mestrado. Programa de Pós graduação em Métodos Numéricos em Engenharia. Universidade Federal do Parana. 64 p., Curitiba- Parana .2012.

GIFFORD, F. A. Statistical properties of fluctuating plume dispersion model *Adv Geophys.*, v. 6, p. 117 - 137, 1959.

GIFFORD, F. A. J. AN OUTLINE OF THEORIES OF DIFFUSION IN THE LOWER LAYERS OF THE ATMOSPHERE. p.Medium: ED; Size: P.G.s 65 - 116. 1968. (TID--24190 Country unknown/Code not available10.2172/4501607Thu Jun 30 07:18:20 EDT 2011DTIE; NSA-22-045193English)

HANNA, S. R. Concentration fluctuations in a smoke plume. *Atmospheric Environment* (1967), v. 18, n. 6, p. 1091–1106, 1984.

HAY J. S. AND PASQUILL F. Diffusion from a fixed source at a height of a few hundred feet in the atmosphere. *J. Fluid Mech.* 2. 299-310. 1957.

HÖGSTRÖM, U. An experimental study on atmospheric diffusion. *Tellus* v. XVI, n. 2, p. 47, 1964.

HÖGSTRÖM, U. A method for predicting odour frequencies from a point source. *Atmospheric Environment* (1967), v. 6, n. 2, p. 103-121, 1972.

HOINASKI, L.; FRANCO, D.; HAAS, R.; MARTINS, R. F.; LISBOA, H. D. M. Investigation of rainwater contamination sources in the southern part of Brazil. *Environmental Technology*, v. 35, n. 7, p. 868-881, 2014/04/03 2013a.

HOINASKI, L.; FRANCO, D.; STUETZ, R. M.; SIVRET, E. C.; DE MELO LISBOA, H. Investigation of PM10 sources in Santa Catarina, Brazil through graphical interpretation analysis combined with receptor modelling. *Environmental Technology*, v. 34, n. 17, p. 2453-2463, 2013/09/01 2013b.

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

IRWIN, J. S. Estimating Plume Dispersion-A Comparison of Several Sigma Schemes. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, v. 22, n. 1, p. 92-114, 1983/01/01 1983.

IRWIN, J. S.; PETERSEN, W. B.; HOWARD, S. C. Probabilistic Characterization of Atmospheric Transport and Diffusion. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, v. 46, n. 7, p. 980-993, 2007/07/01 2007.

JANICKE, U.; JANICKE, L. Lagrangian Particle Modelling for regulatory purposes a survey of recent developments in Germany. 11th conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes, 2007. Cambridge, UK. p.109-113.

KOLMOGOROV, A. N. Dissipation of Energy in Locally Isotropic Turbulence, 32, 22-24. 1941.

LEWELLEN, W. S., "Use of invariant modeling", *Handbook of Turbulence*, ed. W. Frost and T. H. Moulden, Plenum Press, pp237-280. 1977.

MALISKA, C. R. TRANSFERENCIA DE CALOR E MECANICA DOS FLUIDOS: COMPUTACIONAL. Rio de Janeiro -RJ: LTC, p. 2010.

MARIANO, G. L.; MOURA, M. A. L.; QUERINO, C. A. D. S.; CHAGAS, E. V.; JORGE, M. P. P. M. Comparação da dispersão dos poluentes H₂S e NH₃ do lixão de Maceió/AL simulada pelo modelo HYSPLIT e por um modelo Gaussiano - Estudo de caso. XIV Congresso Brasileiro de Meteorologia. Florianópolis/SC: 6 p. 2006.

MONIN, A. S; OBUKHOV, A. M.: Basic Laws of Turbulent Mixing in the Atmosphere Near the Ground, *Trudy geofiz. inst.* 24(151), 163–187. 1954.

MUSSIO, P.; GNYP, A. W.; HENSHAW, P. F. A fluctuating plume dispersion model for the prediction of odour-impact frequencies from continuous stationary sources. *Atmospheric Environment*, v. 35, n. 16, p. 2955-2962, 2001.

NEW ZELAND NATIONAL INSTITUTE OF WATER AND ATMOSPHERIC RESEARCH. Good Practice Guide for Atmospheric Dispersion Modelling. MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT MANATŪ MŌ TE TAIAO. Wellington, New Zealand: 152 p. 2004.

NATIONAL INSTITUTE FOR OCCUPATIONAL SAFETY AND HEALTH (NIOSH). Immediately Dangerous to Life or Health Concentrations (IDLH). 1994. Disponível em: <http://www.cdc.gov/niosh/idlh/50000.html>

NOVA ZELÂNDIA - NATIONAL INSTITUTE OF WATER AND ATMOSPHERIC RESEARCH. Good Practice Guide for Atmospheric Dispersion Modelling. MINISTRY FOR THE ENVIRONMENT MANATŪ MŌ TE TAIAO. Wellington, New Zealand: 152 p. 2004.

PAINE, R. J.; LEE, R. F.; BRODE, R. W.; WILSON, R. B.; CIMORELLI, A. J.; PERRY, S. G.; WEIL, J. C.; VENKATRAM, A.; PETERS, W. D. Model evaluation results for AERMOD. United States Environmental Protection Agency (USEPA),, p.25. 1998

PASQUILL, F. Atmospheric dispersion of pollution. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, v. 97, n. 414, p. 369-395, 1971.

PASQUILL, F. Atmospheric dispersion parameters in Gaussian plume modeling. Part II. Possible requirements for change in the Turner workbook values. AGENCY, E. P. Research Triangle Park, North Caroline. EPA - 600/4 - 76 - 030b: 53 p. 1976.

PERRY, S. G. CTDMPLUS: A Dispersion Model for Sources near Complex Topography. Part I: Technical Formulations. *Journal of Applied Meteorology*, v. 31, n. 7, p. 633-645, 1992/07/01 1992.

PERRY, S. G.; CIMORELLI, A. J.; PAINE, R. J.; BRODE, R. W.; WEIL, J. C.; VENKATRAM, A.; WILSON, R. B.; LEE, R. F.; PETERS, W. D. AERMOD: A Dispersion Model for Industrial Source Applications. Part II: Model Performance against 17 Field Study Databases. *Journal of Applied Meteorology*, v. 44, n. 5, p. 694-708, 2005/05/01 2005.

POPE, S. B. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, p. 2000.

REUTHER, H. Die Ausbreitungsbedingungen von Luftverunreinigungen in Abhängigkeit von meteorologischen Parametern (Dispersion conditions of airborne pollutants in dependence on meteorological parameters). *Archiv für Meteorologie und Geophysik. Bioklimatol*, v. A 19 p. 173-186, 1970.

RICHARDSON, L. F.: The Supply of Energy from and to Atmospheric Eddies, *Proc. Roy. Soc. A* 97, 354–373.1920.

SARKAR, U.; HOBBS, S. E.; LONGHURST, P. Dispersion of odour: a case study with a municipal solid waste landfill site in North London, United Kingdom. *Journal of Environmental Management*, v. 68, n. 2, p. 153-160, 2003.

SASTRE, F. A. U.; CAMPOS, C. R. J. D.; DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M. Simulação da dispersão de contaminantes em condições de forte convecção. *Revista Brasileira de Meteorologia* v. 20, p. 165-174, 2005.

SCHAUBERGER, G.; PIRINGER, M.; PETZ, E. Diurnal and annual variation of the sensation distance of odour emitted by livestock buildings calculated by the Austrian odour dispersion model (AODM). *Atmospheric Environment*, v. 34, n. 28, p. 4839-4851, 2000.

SCHAUBERGER, G.; PIRINGER, M.; PETZ, E. Separation distance to avoid odour nuisance due to livestock calculated by the Austrian

odour dispersion model (AODM). *Agriculture, Ecosystems & Environment*, v. 87, n. 1, p. 13-28, 2001.

SCHAUBERGER, G. et al. Concept to assess the human perception of odour by estimating short-time peak concentrations from one-hour mean values. Reply to a comment by Janicke et al. *Atmospheric Environment*, v. 54, n. 0, p. 624-628, 2012.

SCHULMAN, L. L.; STRIMAITIS, D. G.; SCIRE, J. S. Development and evaluation of the PRIME plume rise and building downwash model. *Journal of the Air & Waste Management Association* (1995), v. 50, p. 378–390, 2000.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. *Atmospheric Chemistry and Physics From Air Pollution to Climate Change*. New York: 1326 p. 2006.

SMITH, R. J. A Gaussian model for estimating odour emissions from area sources. *Mathematical and Computer Modelling*, v. 21, n. 9, p. 23-29, 1995.

SOUZA, F. F. C., *Comparação dos modelos Aermód e Symos'97 para o cálculo da dispersão de odores: um estudo de caso em Uttenweiller*. Dissertação de Mestrado apresentada no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Florianópolis, SC, 2014.

SOUZA, F. F. C., HOINASKI, L., DE MELO LISBOA, H. Comparison of AERMOD and SYMOS'97 models for calculating odor dispersion: A study case in Uttenweiller. *Ist International Seminar of Odours in the Environment*, Santiago, Chile. 7 p. 2014.

SUTTON, O. G.. A Theory of Eddy Diffusion in the Atmosphere. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, Vol. 135, No. 826, pp. 143-165. 1932.

TAYLOR, G.I. Eddy motion in the atmosphere. *Phil Trans R. Soc., Ser.A*, 215. 1915

TAYLOR, G. Diffusion by continuous movements. *Proc. London Math. Soc. Ser.*, v. 2, n. 20, p. 196-211, 1921.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. . A First Course in Turbulence. Livro, 972. 1972.

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

TURNER, D. B. Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates. U.S. DEPARTMENT OF HEALTH, E. A. W., NATIONAL AIR POLLUTION CONTROL ADMINISTRATION,. Cincinnati, Ohio. PHS Publication No. 999-AP-26: 90 p. 1967.

TURNER, D. B. Comparison of Three Methods for Calculating the Standard Deviation of the Wind Direction. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, v. 25, n. 5, p. 703–707, 1986.

TURNER, D. B. Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates: An introduction to atmospheric dispersion modelling. .90 p. 1994.

TURNER, D. B. The Long Lifetime of the Dispersion Methods of Pasquill in U.S. Regulatory Air Modeling. *Journal of Applied Meteorology*, v. 36, n. 8, p. 1016-1020, 1997/08/01 1997.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (USEPA). AERMOD: Description of model formulation. Office of Air Quality Planning and Standards. Research Triangle Park, North Carolina. EPA-454/R-03-004: 91 p. 2004.

VENKATRAM, A. Model predictability with reference to concentrations associated with point sources. *Atmospheric Environment* (1967), v. 15, n. 9, p. 1517-1522, 1981.

VENKATRAM, A.; STRIMAITIS, D.; DICRISTOFARO, D. A semiempirical model to estimate vertical dispersion of elevated releases in the stable boundary layer. *Atmospheric Environment - Part A General Topics*, 1984.

VENKATRAM, A. Vertical dispersion of ground-level releases in the surface boundary layer. *Atmospheric Environment. Part A. General Topics*, v. 26, n. 5, p. 947-949, 1992.

VENKATRAM, A.; STRIMAITIS, D.; DICRISTOFARO, D. A semiempirical model to estimate vertical dispersion of elevated releases in the stable boundary layer. *Atmospheric Environment* (1967), v. 18, n. 5, p. 923-928, 1984.

VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE (VDI). Environmental meteorology. Atmospheric dispersion models. Particle model. Part 3. Berlin, Germany. ICS 07.060;13.040.01: 60 p. 2000.

VICENTINI, P. C. Uso de modelos de qualidade do ar para a avaliação do efeito do PROCONVE entre 2008 e 2020 na região metropolitana do Rio de Janeiro. (Doutor em Engenharia Mecânica). Programa de Pósgraduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro. 242 p., Rio de Janeiro. 2011.

VIEIRA DE MELO, A. M.; SANTOS, J. M.; MAVROIDIS, I.; REIS JUNIOR, N. C. Modelling of odour dispersion around a pig farm building complex using AERMOD and CALPUFF. Comparison with wind tunnel results. *Building and Environment*, v. 56, n. 0, p. 8-20, 2012.

WANG, L.; PARKER, D. B.; PARNELL, C. B.; LACEY, R. E.; SHAW, B. W. Comparison of CALPUFF and ISCST3 models for predicting downwind odor and source emission rates. *Atmospheric Environment*, v. 40, n. 25, p. 4663-4669, 2006.

WEBER, R. O. Estimators for the Standard Deviation of Horizontal Wind Direction. *Journal of Applied Meteorology*, 1997.

WEIL, J. C. Updating Applied Diffusion Models. *Journal of Climate and Applied Meteorology*, v. 24, n. 11, p. 1111-1130, 1985/11/01 1985.

WEIL, J. C.; CORIO, L. A.; BROWER, R. P. A PDF Dispersion Model for Buoyant Plumes in the Convective Boundary Layer. *Journal of Applied Meteorology*, v. 36, n. 8, p. 982-1003, 1997/08/01 1997.

WILLMOTT, C. AND MATSUURA, K.: Advantages of the Mean Absolute Error (MAE) over the Root Mean Square Error (RMSE) in assessing average model performance, *Clim. Res.*, 30, 79–82, 2005.

WITTWER, A. R., Simulação do vento atmosférico e dos processos de dispersão de poluentes em túnel de vento. Tese de doutorado. Programa de Pós graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 180 p., Porto Alegre. 2006.

XIA, H.; FRANCOIS, N.; PUNZMANN, H.; SHATS, M. Lagrangian scale of particle dispersion in turbulence. *Nature Communications*, v. 4, p. 2013, 2013.

YAU, K.-H.; MACDONALD, R. W.; THÉ, J. L. Inter-comparison of the AUSTAL2000 and CALPUFF dispersion models against the kincaid data set. 9th conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes. Garmisch-Partenkirchen, Germany: 182-186 p. 2004.

APÊNDICE 1 – MÉTRICAS ESTATÍSTICAS

Os parâmetros estatísticos avaliados foram: erro sistemático médio (Bias), erro fracional (*Fractional Bias* -FB), erro quadrático médio normalizado (*Normal Mean Square Error* - NMSE), Fator de 2 (*Factor of 2* – FACT2), erro absoluto médio (Mean Absolute Error – MAE) e coeficiente de correlação de Spearman. Para todas as equações apresentadas na sequência, C_o são os valores mensurados; C_p os valores modelados; σ_c é o desvio padrão do conjunto de dados; e o traço sobre as variáveis indicam médias.

A) Erro Sistemático Médio (*Bias*)

Bias estatístico é dentre as métricas consideradas, a mais simples e menos representativa. É dado pela média da diferença entre a série a ser validada e a de referência, e indica o erro sistemático (subestimativa ou superestimativa). É medido com a mesma unidade usada nas séries.

$$BIAS = \overline{C_p} - \overline{C_o} \quad 11$$

O bias pode ter qualquer valor real, onde os valores mais próximos de zero, por definição, representam menor erro (CORREIA, 2012). No entanto, um equilíbrio entre número de subestimativas e superestimativas também pode apresentar Bias igual a 0. Valores de bias negativos significarão que as medições efetuadas são em média superiores às modeladas.

B) Erro Fracional (*Fractional Bias* - FB)

O FB é um fator adimensional, simétrico e limitado entre os valores de -2 e +2. Valores de FB iguais a -2 indicam que os valores que as previsões subestimam as observações em 200% (CORREIA, 2012).

$$FB = \frac{2 \cdot (\overline{C_p} - \overline{C_o})}{(\overline{C_p} + \overline{C_o})} \quad 12$$

C) Erro quadrático médio normalizado (*Normalized Mean Square Error - NMSE*)

O erro quadrático médio normalizado é a média quadrática da diferença entre os valores das observações e previsões. Apresenta valores de 0 a infinito, tendo como valores ideais, os menores erros e próximos a zero (CORREIA, 2012). Através do NMSE é possível avaliar os erros sistemáticos (tendência) e aleatórios.

$$NMSE = \frac{\overline{(C_p - C_o)^2}}{C_p \cdot C_o} \quad 13$$

O NMSE não é indicado para comparações entre valores pequenos, pois apresentará resultados pouco representativos.

D) Fator de 2 (*Factor of 2 - FACT2*)

O FACT2 é uma métrica robusta que quantifica a quantidade de previsões dentro de uma faixa de 0,5 a 2 vezes o valor das observações. Este estimador de erro não sofre influência de valores extremos.

$$FACT2 = 0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2 \quad 14$$

E) Erro Absoluto Médio (*Mean Absolute Error - MAE*)

De acordo com Willmott e Matsuura (2005) relatam que o MAE é uma das formas mais adequadas para representar os erros.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |C_p - C_o| \quad 15$$

F) Coeficiente de correlação de Spearman (ρ)

O coeficiente de correlação não paramétrica de Spearman mede a intensidade da relação existente entre as observações e previsões. Quanto maior a relação proporcional entre as variáveis, o sinal deste coeficiente será positivo. Quando a relação for inversamente proporcional, o coeficiente de correlação apresentará valores negativos. Caso não houver relação entre as variáveis, o valor de r será zero e igual a 1 quando os dados foram idênticos.

$$r = \frac{\Sigma(c_p - \bar{c}_p)(c_o - \bar{c}_o)}{\sqrt{\Sigma(c_p - \bar{c}_p)^2(c_o - \bar{c}_o)^2}} \quad 16$$

Ao contrário do coeficiente de correlação de linear, não requer a suposição que a relação entre as variáveis é linear.

ANEXO 1 – COEFICIENTES DE DISPERSÃO

A) Coeficiente de dispersão vertical do AERMOD

Em atmosfera estável, a dispersão vertical (σ_{zs}) é assumida como sendo composta de contribuições da parcela elevada (σ_{zes}) e próxima da superfície da atmosfera (σ_{zgs}). Devido à ausência de uma forte justificativa física para computar este parâmetro, principalmente para $h_{es} < z_i$, o mesmo é calculado segundo uma simples interpolação linear entre os componentes:

$$\sigma_{zs} = \left(1 - \frac{h_{es}}{z_i}\right) \sigma_{zgs} + \left(\frac{h_{es}}{z_i}\right) \sigma_{zes}$$

Onde, h_{es} é a altura da pluma e para $h_{es} \geq z_i$, $\sigma_{zs} = \sigma_{zes}$.

A componente elevada (σ_{zes}) é calculada pela seguinte equação:

$$\sigma_{zes} = \frac{(\widetilde{\sigma}_{wT} x / \widetilde{u})}{\left(1 + \frac{x/\widetilde{u}}{2TL_{zs}}\right)^{1/2}}$$

Onde, $\widetilde{\sigma}_{wT}$ é a turbulência vertical devido a mistura fornecida por forças mecânicas.

Escrevendo a escala de tempo lagrangiana como $l/\widetilde{\sigma}_{wT}$ e interpolando l ($l/l = l/l_n + l/l_s$) entre atmosfera neutra ($l_n = 0,36 h_{es}$) e estável ($l_s = 0,27\widetilde{\sigma}_{wT}/N$), a equação de σ_{zes} pode ser reescrita como:

$$\sigma_{zes} = \widetilde{\sigma}_{wT} t / \left[1 + \frac{\widetilde{\sigma}_{wT}}{2} \left(\frac{1}{0,36h_{es}} + \frac{N}{0,27\widetilde{\sigma}_{wT}}\right)\right]^{1/2}$$

Onde, N é a frequência de Brunt-Vaisala, que por sua vez significa a frequência de oscilação de uma partícula em torno de sua posição de equilíbrio.

A componente superficial (σ_{zgs}) é calculada como:

$$\sigma_{zgs} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{u_* x}{\widetilde{u}}\right) \left(1 + 0,7 \frac{x}{L}\right)^{-1/3}$$

Em adição a turbulência do próprio ambiente, é considerada a influência da flutuação da pluma na dispersão total dos poluentes. O coeficiente de flutuação induzida é calculado de acordo com a Equação.

$$\sigma_b = \frac{0,4\Delta h}{\sqrt{2}}$$

Onde Δh é a elevação da pluma acima do topo da chaminé. A dispersão total é calculada pela adição quadrática dos coeficientes σ_b , σ_y e σ_z .

B) Coeficientes de dispersão de Pasquill-Gifford

O método elaborado por Gifford em 1961 (*apud* SEINFELD e PANDIS, 2006) para estimar σ_y e σ_z consiste em ábacos que correlacionam as classes de estabilidade de Pasquill, distância entre fonte e receptor e coeficientes de dispersão. Para facilitar a utilização do respectivo método, Turner em 1969 (*apud* SEINFELD e PANDIS, 2006), encontrou uma forma analítica para representar as chamadas curvas de Pasquill-Gifford, dadas pelas equações:

$$\sigma_y = \exp[I_y + J_y \ln(x) + K_y(\ln(x))^2]$$

$$\sigma_z = \exp[I_z + J_z \ln(x) + K_z(\ln(x))^2]$$

Os coeficientes de cada equação são obtidos em função da estabilidade atmosférica, conforme a tabela abaixo:

Coef.	Classe de estabilidade de Pasquill					
	A	B	C	D	E	F
I_y	-1,104	-1,634	-2,054	-2,555	-2,754	-3,143
J_y	0,9878	1,0350	1,0231	1,0423	1,0106	1,0145
K_y	-0,0076	-0,0096	-0,0076	-0,0087	-0,0064	-0,0070
I_z	4,679	-1,999	-2,341	-3,186	-3,783	-4,490
J_z	-1,7172	0,8752	0,9477	1,1737	1,3010	1,4024
K_z	0,2270	0,00136	-0,0020	-0,0316	-0,0450	-0,0540

C) a Coeficientes de dispersão do Högström

Högström (1964) estabeleceu que a dispersão total (lateral e vertical) de um poluente no ar é segue a seguinte equação:

$$\sigma_y^2 = \sigma_{yc}^2 + \sigma_{yp}^2$$

$$\sigma_z^2 = \sigma_{zc}^2 + \sigma_{zp}^2$$

Onde: o índice y representa a dispersão lateral; z a dispersão vertical; c a flutuação do centroide da pluma; e p a dispersão da concentração da pluma.

De acordo com Högström (1964) a dispersão da concentração da pluma nos eixos y e z depende da:

- Distância até a fonte;
- Estabilidade atmosférica;
- Altura em relação ao solo;
- Altura da rugosidade da superfície.

Coefficiente de dispersão vertical

Em condições neutras e estáveis, o coeficiente σ_{zp} é determinado pela Equação:

$$\sigma_{zp} = 0,36 \frac{W_a^*}{u_a} \frac{\sqrt{2[e^{-0,65a_0x} + 0,65a_0x - 1]}}{0,65 \cdot a_0 \left(1 + 2,2 \times 10^{-2} \cdot \left(\frac{h}{87}\right)^{0,62} \cdot s\right)}$$

Onde: h é a altura efetiva da chaminé; x a coordenada do receptor; s o parâmetro de estabilidade de Högström. Sendo que,

$$\frac{W_a^*}{u_a} = \left(4,31 \cdot \log \frac{h}{z_0}\right) - 1$$

$$a_0 = \frac{W_a^*}{u_a} \frac{1}{0,4 \cdot h \cdot N_{pa}}$$

N_{pa} é função do coeficiente de rugosidade (z_o), variando entre 1 (terrenos planos com $z_o < 0,10$ e $0,5$ (grandes rugosidades).

O parâmetro de estabilidade é dado pela seguinte equação:

$$s = \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} / u_f^2 \right) \times 10^5$$

Onde: u_f é a velocidade do vento no topo da camada de mistura; e $\frac{\partial \theta}{\partial z}$ o gradiente vertical da temperatura potencial no centro da pluma.

Estas equações são válidas apenas para distâncias de alguns quilômetros em relação a fonte.

Em condições instáveis o coeficiente de dispersão vertical é dado pela seguinte Equação:

$$\sigma_{zp} = 0,554 \frac{i}{b_0} \sqrt{2[e^{-0,65b_0 \cdot x} + 0,65b_0 \cdot x - 1]}$$

Onde, i é a intensidade da turbulência vertical. Sendo que:

$$b_0 = a_0 \left(\frac{\bar{u}}{16} \right)^{0,8}$$

O parâmetro \bar{u} é a velocidade média do vento na altura efetiva da chaminé.

O valor da intensidade da componente vertical da turbulência é calculada pela seguinte expressão:

$$i = \frac{W_a^*}{u_a} + 0,33 \cdot \left(1 - \frac{\bar{u}}{16} \right)^3$$

Os valores de σ_{zp} podem ser corrigidos para cada estação do ano da seguinte forma:

$$\sigma_{zp} = \sigma_{zph}(1 - p) + \sigma_{zps} \cdot p$$

O parâmetro p é função do mês do ano, conforme a Tabela abaixo.

Mês	p	Mês	p	Mês	p
Dezembro	0	Março	0,5	Maio	1
Janeiro		Outubro		Junho	
Fevereiro	0,25	Abril	0,75	Julho	
Novembro		Setembro		Agosto	

Fonte: Adaptado de Högstöm (1964) *apud* De Melo Lisboa, (1996).

Coefficiente de dispersão lateral

De acordo com Högstöm (1964), a dispersão lateral pouco varia com a alteração da estabilidade atmosférica e, assim, o coeficiente se encaixa para condições estáveis, neutras e instáveis.

$$\sigma_{yp} = 50 \sqrt{2[e^{-10^{-3} \cdot x} + 10^{-3} \cdot x - 1]} \cdot \left(\frac{1}{1+10^{-2} \cdot s}\right)$$

Sendo que s é igual a zero para condições neutras e instáveis.

Coefficiente de flutuação do centroide da pluma

Os valores dos coeficientes de flutuação do centroide da pluma são calculados a partir das Equações (Murray *et al.*, 1978 *apud* DE MELO LISBOA, 1996):

$$\sigma_{yc} = \sqrt{\sigma_y^2 - \sigma_{yp}^2}$$

$$\sigma_{zc} = \sqrt{\sigma_z^2 - \sigma_{zp}^2}$$

Onde, σ_y e σ_z pode ser obtidos pelas formulações de Pasquill, Briggs ou até mesmo pelas estimativas do AERMOD.

D) Coeficientes de dispersão de Draxler

Analogamente ao AERMOD, Draxler em 1976, se baseou na metodologia Pasquill para estimar os coeficientes de dispersão, sendo ela:

$$\sigma_{y,z} = \sigma_{v,w} T f_{1,2} \left(T/t_L \right)$$

A diferença entre o AERMOD e o método desenvolvido por Draxler está no tratamento da função $f_{1,2} \left(T/t_L \right)$. Draxler utiliza diferentes formas de f para abordar fontes elevadas e superficiais. O autor também segrega f para condições estáveis e instáveis.

Para a dispersão lateral por emissões elevadas, tem-se:

$$f_1 = \frac{1}{1+0,9(T/1000)^{0,5}}$$

Para emissões próximas à superfície, f_1 assume a seguinte forma:

$$f_1 = \frac{1}{1+0,9(T/300)^{0,5}} \text{ para condições instáveis e estáveis quando } T < 550.$$

$$f_1 = \frac{T^{0,5}}{T^{0,5}+28} \text{ para condições estáveis e } T > 550.$$

A dispersão vertical por fontes elevadas, f_2 é dada por:

$$f_2 = \frac{1}{1+0,9(T/500)^{0,5}} \text{ em condições instáveis.}$$

$$f_2 = \frac{1}{1+0,945(T/100)^{0,805}} \text{ em condições estáveis.}$$

Por fontes superficiais, f_2 é dada por:

$$f_2 = \frac{(0,3/0,16)}{(T/500-0,4)^2} + 0,7 \text{ em condições instáveis.}$$

$$f_2 = \frac{1}{1+0,9(T/50)^{0,805}} \text{ em condições estáveis.}$$

ANEXO 2 – TRATAMENTO DA TURBULÊNCIA NO AERMOD

No AERMOD a turbulência é representada pelo desvio padrão da velocidade vertical (σ_w) e lateral (σ_v) do vento.

Turbulência Vertical

Na CLC a turbulência vertical contém componentes de ordem mecânica (σ_{wm} e u^*) e convectiva (σ_{wc} e w^*), com turbulência vertical total (σ_{wt}^2) dada por:

$$\sigma_{wt}^2 = \sigma_{wm}^2 + \sigma_{wc}^2$$

Sendo que, na CLE, $\sigma_{wt} = \sigma_{wm}$. A parte convectiva (σ_{wc}^2) da turbulência (variabilidade) é calculada por:

$$\sigma_{wc}^2 = 1,6 \left(\frac{z}{z_{ic}} \right)^{2/3} w_*^2 \text{ para } z \leq 0,1z_{ic};$$

$$\sigma_{wc}^2 = 0,35w_*^2 \text{ para } 0,1z_{ic} < z \leq z_{ic}$$

$$\sigma_{wc}^2 = 0,35w_*^2 \exp \left[-\frac{6(z-z_{ic})}{z_{ic}} \right] \text{ para } z > z_{ic}$$

O conjunto de Equações acima permite que σ_{wc}^2 decaia suavemente até zero abaixo de z_{ic} . A turbulência mecânica (σ_{wm}) leva em conta as contribuições da condição atual da atmosfera (σ_{wml}), bem como do dia anterior (σ_{wmr}) (turbulência residual).

$$\sigma_{wm}^2 = \sigma_{wml}^2 + \sigma_{wmr}^2$$

A expressão para σ_{wml} é dada por Brost et al. (1982):

$$\sigma_{wm} = 1,3 \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{1/2} u_* \text{ para } z \leq z_i;$$

$$\sigma_{wm} = 0,0 \text{ para } z \geq z_i$$

Onde, $\sigma_{wml} = 1,3u_*$ em $z = 0$ é consistente com o estudo conduzido por Panofsky et al., (1977 *apud* Cimorelli et al., 2005). Na ausência de

medições acima de z_i , σ_{wmr} pode ser obtido pela fórmula $0,02u$ (SASTRE *et al.*).

Turbulência Lateral

Na CLC a turbulência lateral total é também assumida como a combinação das parcelas mecânica e convectiva, tal como:

$$\sigma_{vt}^2 = \sigma_{vm}^2 + \sigma_{vc}^2$$

Na camada limite,

$$\sigma_{wc}^2 = 0,35w_*^2$$

Um valor mínimo de σ_{vc} igual a $0,5 \text{ m.s}^{-1}$ é consistente com medições em campo acima de z_i .

O AERMOD assume que σ_{wm}^2 varia linearmente com a altura entre os valores da superfície e os valores residuais em z_{im} , como sugerido por medições em campo. O valor de σ_{wm}^2 em z_{im} é constante em níveis mais altos. O perfil para a turbulência mecânica lateral é calculada por:

$$\sigma_{vm}^2 = \left(\frac{\sigma_{vm}^2\{z_{im}\} - \sigma_{vo}^2}{z_{im}} \right) z + \sigma_{vo}^2 \text{ para } z \leq z_{im};$$

$$\sigma_{vm}^2 = \sigma_{vm}^2\{z_{im}\} \text{ para } z > z_{im}$$

Onde, $\sigma_{vm}^2\{z_{im}\} = \min(\sigma_{wo}^2, 0,25\text{m}^2.\text{s}^{-2})$ e σ_{wo}^2 é igual a $3,6u_*^2$. Na camada limite estável a turbulência é exclusivamente mecânica.