UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática

Dissertação

Análises e comparações estatísticas entre dados experimentais com resultados de um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos

Jorge Ribes

Pelotas, 2018

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

R485a Ribes, Jorge Luis Braga

Análises e comparações estatísticas entre dados experimentais com resultados de um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos / Jorge Luis Braga Ribes ; Willian Silva Barros, orientador ; Régis Sperotto de Quadros, coorientador. — Pelotas, 2017.

100 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2017.

1. Advecção-difusão. 2. Giltt. 3. Poluentes. 4. Solução analítica. 5. Análise estatística. I. Barros, Willian Silva, orient. II. Quadros, Régis Sperotto de, coorient. III. Título.

CDD : 519.5

Elaborada por Ubirajara Buddin Cruz CRB: 10/901

Jorge Luís Braga Ribes

Análises e comparações estatísticas entre dados experimentais com resultados de um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos

Dissertação aprovada, como requisito parcial, para obtenção do grau de Mestre em Modelagem Matemática, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

Data da Defesa: 21 de julho de 2017

Banca examinadora:

Prof. Dr. Willian Silva Barros (Orientador)
Doutor em Genética e Melhoramento pela Universidade Federal de Viçosa, Brasil

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros (Co-Orientador)
Doutor em Matemática Aplicada pela Technische Universitaet Darmstadt, Alemanha

Prof. Dr. Arlan da Silva Ferreira
Doutor em Física pela Universidade Federal de Alagoas, Brasil

Prof. Dr. Claudio Zen Petersen
Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Prof. Dr. Guilherme Jahnecke Weymar
Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Prof. Dr. Maicon Nardino
Doutor em Agronomia pela Universidade Federal de Pelotas, Brasil

Jorge Ribes

Análises e comparações estatísticas entre dados experimentais com resultados de um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática

Orientador: Prof. Dr. Willian Silva Barros
Coorientador: Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros

Pelotas, 2018

Dedico à minha esposa Maira Ribes, meus filhos Pablo Ribes e Sophia Ribes que tiveram a paciência de entender minha ausência, bem como ao meu grande amigo Moacir Elias do Amaral (*in memoriam*) pelo incentivo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço
A Deus por me dar forças para enfrentar as dificuldades encontradas;
Aos professores Willian da Silva Barros, Régis Speroto de Quadros, Daniela Buske pela dedicação e paciência;
Ao Dr. Maicon Nardino pela amizade, paciência e dedicação;
A todos que contribuiram de alguma para a realização deste trabalho.

´’Alguns homens vêem as coisas como são, e dizem ‘’Por quê?’‘ Eu sonho com as coisas que nunca foram e digo ‘’Por que não’‘?’‘ — GEROGE BERNARD SHAW

RESUMO

RIBES, Jorge. **Análises e comparações estatísticas entre dados experimentais com resultados de um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos**. 2018. 98 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2018.

Esta dissertação teve por objetivo fazer a avaliação e a comparação das concentrações experimentais e preditas pelo método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) nos casos bidimensional estacionário, com e sem deposição, bidimensional transiente, com e sem deposição e tridimensional, via estimadores estatísticos, em experimentos de Copenhagen, Hanford e Kinkaid referentes a dispersão dos poluentes atmosféricos SF_6, nos três experimentos e Z_nS no experimento de Hanford. Foram utilizados os softwares Fortran, Excel e SAS para calcular as estimativas e para as simulações para a predição da dispersão das concentrações dos poluentes via método GILTT.

Tanto os dados experimentais e a modelagem do problema foram realizadas na Camada limite planetária. Utilizou-se os estimadores estatísticos como média, variância, correlação linear, entre outros.

A análise dos resultados com dados experimentais foi feita considerando diversos pontos a partir da fonte de emissão, mostrando que o desempenho das soluções são concordantes com os resultados apresentados na literatura, o que foi verificado através da análise dos estimadores estatísticos na avaliação de modelos de dispersão de poluentes atmosféricos.

Palavras-chave: Advecção-Difusão, GILTT, Poluentes, Solução Analítica, Análise Estatística.

ABSTRACT

RIBES, Jorge. **Statistical analyzes and comparisons between experimental data with results of a dispersion model of atmospheric pollutants**. 2018. 98 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2018.

The aim of this dissertation was to evaluate and compare the experimental and predicted concentrations of the GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*)in two-dimensional cases with and without deposition, two-dimensional transient, with and without deposition and three-dimensional, Via statistical estimators, in experiments from Copenhagen, Hanford and Kinkaid concerning the dispersion of air pollutants SF_6, in the three experiments and Z_nS in the Hanford experiment. Fortran, Excel and SAS software were used to calculate the estimates and for the simulations to predict the dispersion of pollutant concentrations via the GILTT model.

Both the experimental data and the modeling of the problem were performed in the Planetary Boundary Layer. Statistical estimators were used as mean, variance, linear correlation, among others.

The analysis of the results with experimental data was made considering several points from the emission source, showing that the performance of the solutions are compatible with the results presented in the literature, which was verified through the analysis of the statistical estimators normally used in the evaluation of models Of atmospheric pollutants.

Keywords: Advection-Diffusion, GILTT, Dispersion of pollutants, Analytical Model, Statistical analysis.

LISTA DE FIGURAS

1 Fontes e receptores. 17
2 Esquema ilustrativo da advecção-difusão. 18

3 Ciclo diário da CLP (STULL, 1988). 26
4 Influência do vento horizontal na dispersão dos poluentes adaptado de (BOUBEL et al., 1994). Na parte inferior é mostrada a distância da fonte em metros. 29
5 Influência da estabilidade da atmosfera na forma da pluma adaptado de (BOUBEL et al., 1994). 30
6 Esquema ilustrativo da representação da inversão térmica. 32
7 Efeito dos diferentes tamanhos de vórtices na dispersão de um *puff* (Adaptado de (SEINFELD, 1994)). 33
8 Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes (caso bidimensional). 34

9 Gráficos de curtose. 52

10 Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais. 61
11 Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários tridimensionais. 62
12 Gráfico box plot referente aos dados de Copenhagen observados e preditos pelos dois cenários bidimensionais. 63
13 Gráfico box plot referente aos dados de Copenhagen observados e preditos pelos dois cenários tridimensionais. 64
14 Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais. 65
15 Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários tridimensionais. 66
16 Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais com deposição de poluentes. . . 72
17 Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais sem deposição de poluentes. . . 73
18 Gráfico box plot referente aos dados de Hanford observados e preditos pelo método GILTT. 74
19 Gráfico box plot referente aos dados de Hanford observados e preditos pelo método GILTT. 75

20 Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários com deposição de poluentes. 76
21 Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários sem deposição de poluentes. 77
22 Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários. 86
23 Gráfico box plot referente aos dados de Kinkaid observados e preditos pelo método GILTT. 87
24 Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários. 88

LISTA DE TABELAS

1 Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen (GRYNING, 1981) (GRYNING; LYCK, 1984) 41

2 Velocidade de fricção u_* em (m/s) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen com todos os passos correspondentes a 10 min 42

3 Comprimento de *Monin-Obukhov* L em (m) para diferentes passos de tempo nos 8 experimentos de Copenhagen, com todos os passos correspondentes a 10 min 42

4 Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford (DORAN; HORST, 1985) 43

5 Dados micrometerológicos e do poluente para os seis experimentos de Hanford. Dados do poluente são normalizados pela taxa de emissão Q. Índice d refere-se ao material que deposita e índice nd refere-se ao material que não deposita 44

6 Parâmetros micrometeorológicos para o experimento de Kinkaid (HANNA; PAINE, 1989), T_a é a temperatura ambiente, T_i é a temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma na saída da chaminé 45

7 Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-2})$ e $(.10^{-4}sm^{-3})$, onde C_{p_1}, C_{p_2}, C_{p_3} e C_{p_4}, representam as concentrações preditas pelos modelos e C_{o_1}, C_{o_2}, C_{o_3} e C_{o_4} representam as concentrações observadas experimentalmente, sendo (g/m^2) a unidade de medida da concentração nos cenários bidimensionais e (g/m^3) a unidade de medida da concentração nos cenários tridimensionais 55

8 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Copenhagen para os quatro cenários: GILTT-1, GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4 56

9 Correlação dos valores das concentrações observadas e preditas dos quatro cenários: GILTT-1, GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4, para o experimento de Copenhagen 58

10 Utilizando os dados de concentrações observados (O) e os dados de concentrações preditas (P) do experimento de Copenhagen para os quatro cenários: GILTT-1, GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4 59

11 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Copenhagen para os quatro cenários: GILTT-1,GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4 60
12 Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-3})$, onde C_{p_1}, C_{p_2}, C_{p_3} e C_{p_4} representam as concentrações preditas pelo método e C_{o_1}, C_{o_2}, C_{o_3} e C_{o_4} representam as concentrações observadas experimentalmente 67
13 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Hanford para os quatro cenários GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV 68
14 Correlação dos valores das concentrações observadas e preditas dos quatro cenários, GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV, para o experimento de Hanford 70
15 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Hanford para os quatro cenários GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV 70
16 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Hanford, como sugestão de novos estimadores, para os quatro cenários GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV 71
17 Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-2})$, onde C_{p_1} e C_{p_2} representam as concentrações preditas pelo método e C_{o_1} e C_{o_2} representam as concentrações observadas experimentalmente (Parte 1) 78
18 Continuação (Parte 2) 79
19 Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-2})$, onde C_{p_1} e C_{p_2} representam as concentrações preditas pelo método e C_{o_1} e C_{o_2} representam as concentrações observadas experimentalmente (Parte 1) 80
20 Continuação (Parte 2) 81
21 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Kinkaid para os dois cenários, 3D-GILTT e GILTTG 82
22 Correlação dos valores das concentrações observadas e preditas dos dois cenários, 3D-GILTT e GILTTG, para o experimento de Kinkaid 83
23 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Kinkaid para os dois cenários 3D-GILTT e GILTTG 84
24 Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Kinkaid, como sugestão de novos estimadores, para os dois cenários 3D-GILTT e GILTTG 85

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

1. Caracteres Arábicos

ADMM	Advection Diffusion Multilayer Method
A_k	Peso da Quadratura de Gauss
B_1	Matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem
B_2	Matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem
B_3	Matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem
c(x,z)	Concentração média de um contaminante passivo (g/m^2)
c(x,y,z)	Concentração de um contaminante passivo (g/m^3)
$\bar{C}$	Variável dependente após aplicação da transformada de Laplace no tempo
$\bar{c_n}$	Variável dependente da expansão em série do problema estacionário
C^*	Concentração adimensional de um contaminante passivo
C_o	Concentrações observadas experimentalmente
C_p	Concentrações preditas pelo modelo
CCL	Camada de Convecção Livre
CLA	Camada Limite Atmosférica
CLC	Camada Limite Convectiva
CLE	Camada Limite Estável
CLP	Camada Limite Planetária
CLS	Camada Limite Superficial
CM	Camada de Mistura
CO_2	Dióxido de Carbono
d	Deslocamento do plano zero (m)
D	Matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem
$\bar{d}$	Viés (bias) médio
EDO	Equação diferencial ordinária
F	Matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $F = B_1^{-1}B_2$

f_c	Parâmetro de Coriolis: $f_c = 1.46.10^{-4}$
$(f_m^*)_i$	Frequência normalizada do pico espectral
$(f_m)_i$	Frequência do pico espectral (s)
FA2	Fator de dois
FB	Fator de inclinação
FS	Desvio fracional padrão
G_c	Matriz de coeficientes do problema transformado de segunda ordem na qual $G = B_1^{-1}B_3$
g	Aceleração da gravidade (m/s^2)
G(x,r)	Matriz diagonal dos autovalores do problema transformado de primeira ordem após inversão de Laplace analítica em x
GIADMT	Generalized Integral Advection Diffusion Multilayer Technique
GILTT	Generalized Integral Laplace Transform Technique
GITT	Generalized Integral Transform Technique
$\delta\bar{c}$	Three-dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique
h	Altura da camada limite convectiva (m)
h_e	Altura efetiva da fonte (m)
H	Matriz bloco do problema transformado de primeira ordem
H_s	Altura da fonte (m)
HFC	Hidrofluorcarboneto
I	Índice de concordância
IPCC	Painel intergovenanmental de mudanças climáticas
k	Constante de Von-Kármán
K_α	Coeficiente de difusão onde α indica as direções x, y e z (m^2/s)
K_x	Coeficiente de difusão na direção x (m^2/s)
K_y	Coeficiente de difusão na direção y (m^2/s)
K_z	Coeficiente de difusão na direção z (m^2/s)
L	Comprimento de Monin-Obukov (m)
L_*	Distância longe da fonte no eixo x (m)
LES	Large Eddy Simulation
M^*	Número de termos no somatório do algoritmo FT
M	Número de pontos da Quadratura de Gauss
MAE	Erro absoluto médio
MG	Média geométrica

N	Número de autovalores no somatório da fórmula da inversa da GILTT
n'	Frequência adimensional
NMSE	Erro quadrático médio normalizado
NMSE$_{min}$	Erro quadrático médio normalizado mínimo
NNUL	Near Neutral Upper Layer
NRMSE	Raiz normalizada do erro quadrático médio
NSD	Desvio padrão normalizado
P_k	Pesos da Quadratura de Gauss
PFC	Perfluorcarboneto
Q	Intensidade da fonte (g/s)
Q_*	Fluxo de calor na superfície (Km/s)
r	Correlação
R^2	Coeficiente de determinação
S	Termo fonte
SF_6	Hexafluoreto de Enxofre
S_k	Assimetria
t	Variável temporal (s)
T_a	Temperatura ambiente (K)
T_i	Temperatura da pluma na saída da chaminé (K)
U	Velocidade instantânea do vento na direção x (m/s)
$\bar{u}$	Componente do vento médio orientado na direção x (m/s)
u'	Componente turbulenta do vento na direção x (m/s)
u_*	Velocidade de fricção (m/s)
$\overline{u'c'}$	Fluxo turbulento do contaminante nas direções longitudinal (g/sm^2)
$\overline{v'c'}$	Fluxo turbulento do contaminante nas direções lateral (g/sm^2)
$\overline{w'c'}$	Fluxo turbulento do contaminante nas direções vertical (g/sm^2)
V	Velocidade instantânea do vento na direção y (m/s)
$\bar{v}$	Componente do vento médio orientado na direção y (m/s)
v'	Componente turbulenta do vento na direção y (m/s)
V_g	Velocidade de deposção do poluente (m/s)
VG	Variância geométrica
V_i	Velocidade vertical da pluma na saída da chaminé (m/s)
W	Velocidade instantânea do vento na direção z (m/s)
$\bar{w}$	Componente do vento médio orientado na direção z (m/s)

w'	Componente turbulenta do vento na direção z (m/s)
w_*	Escala de velocidade convectiva (m/s)
x	Distância longitudinal da fonte (m)
y	Distância lateral da fonte (m)
X	Matriz dos autovetores do problema transformado de primeira ordem
X^*	Distância adimensional da fonte
Y(x,r)	Vetor de incógnitas do problema transformado de segunda ordem
Z(x,r)	Vetor de incógnitas do problema transformado de primeira ordem
z	Altura acima da superfície (m)
z_i	Altura da camada convectiva (m)
Z^*	Altura adimensional
z_0	Comprimento de rugosidade (m)
z_r	Altura de referência (m)
z_t	Altura predeterminada (m)
ZnS	Sulfeto de Zinco

2. Caracteres Gregos

α	Indica as direções x, y e z
β	Termos adicionais no contragradiente
δ	Função delta de Dirac
$\delta\bar{c}$	Derivada da concentração
$\delta\ h$	Ascensão da pluma (m)
$\delta\ z$	Derivada da altura da camada limite
γ	Termo de contragradiente
λ_n	Autovalor do problema de Sturm-Liouville
$(\lambda_m)_i$	Comprimento de onda associado ao máximo do espectro vertical turbulento (m)
ψ	Taxa de dissipação molecular da velocidade turbulenta
ω	Função estabilidade
σ_y	Parâmetro de dispersão lateral
σ_o	Desvio padrão observado
σ_p	Desvio padrão predito
σ_u	Desvio padrão da componente da velocidade turbulenta longitudinal (m/s)
σ_v	Desvio padrão da componente da velocidade turbulenta lateral (m/s)
σ_w	Desvio padrão da componente da velocidade turbulenta vertical (m/s)

σ_θ	Desvio padrão da direção horizontal do vento (graus)
τ	Tempo de relaxação (s)
ϵ	Vetor representado por $X^{-1}Z(0,r)$
ζ	Autofunção do problema de Sturm-Liouville

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 16

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 20
2.1 Evolução das equações de advecção-difusão 20
2.2 Componentes dos modelos de advecção-difusão 24
2.2.1 Camada limite planetária 24
2.2.2 A física da dispersão 27
2.3 O Modelo matemático e a solução 34
2.3.1 A equação bidimensional de advecção-difusão estacionária 34

3 DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO 40
3.1 Dados experimentais 40
3.1.1 O experimento de Copenhagen 40
3.1.2 O experimento de Hanford 43
3.1.3 O experimento de Kinkaid 44
3.1.4 Coeficiente de difusão 46
3.1.5 Perfil de vento 47
3.1.6 Ascensão da pluma 48
3.2 Análises estatísticas e comparações por estimadores estatísticos entre dados observados e preditos 50

4 ANÁLISES E COMPARAÇÕES ESTATÍSTICAS 54
4.1 Resultados utilizando o experimento de Copenhagen 54
4.2 Resultados utilizando o experimento de Hanford 67
4.3 Resultados utilizando o experimento de Kinkaid 78

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS 89

REFERÊNCIAS 91

1 INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica pode ser definida como sendo a presença indesejável de algum material no ar em quantidades suficientemente grandes para causarem danos ao homem ou ao meio ambiente. A emissão excessiva de poluentes na atmosfera tem aumentado com o desenvolvimento industrial e tecnológico fazendo com que o ar fique fora dos padrões adequados.

A poluição atmosférica é ocasionada por efeitos naturais ou antropogênicos. A poluição antropogêncica tem origem no século XIV, quando o carvão mineral começou a substituir a madeira como fonte primária de energia, intensificando seu uso ao longo da revolução industrial até o século XIX. Atualmente, mais de 90% da energia provém de combustíveis fósseis, o que aumenta de forma alarmante a quantidade de substâncias poluentes emitidas por indústrias, superando assim a capacidade de regeneração do meio ambiente (BOTKIN; KELLER, 1995).

Os níveis de poluição natural, que é devida à decomposição microbiana e de erupções vulcânicas, entre outras fontes, podem ser considerados constantes no tempo, enquanto os níveis de poluição antropogênica, ocasionada pelo homem, estão em constante crescimento. Sobre a poluição natural não existe nenhum controle, já a poluição antropogênica é passível de controle. Os gases e poeiras abandonados na atmosfera provocam efeitos inconvenientes próximo das fontes, o que prejudica a qualidade do ar em regiões urbanas, agrícolas e industriais e, a média ou longa distância, podem causar chuva ácida, já em escala global o efeito é o buraco na camada de ozônio (GODISH, 1991) e (BOTKIN; KELLER, 1995).

Um fator fundamental para a qualidade de vida da população bem como do meio ambiente é a qualidade do ar das cidades. Devido a esse fato, diversos pesquisadores têm trabalhado na modelagem de fenômenos atmosféricos e na simulação computacional dos mesmos. Com isso, torna-se importante o desenvolvimento de ferramentas numéricas que sejam capazes de estimar o nível de concentração de contaminantes na atmosfera provenientes das diversas fontes de emissão. A partir da estimativa do nível de concentração próximo à fonte, é possível avaliar o impacto ambiental causado, então agir para solucionar o problema da melhor forma possível.

Faz-se necessário levar em conta a atmosfera em que o transporte e difusão de poluentes ocorrem, bem como seus processos de remoção. Primeiramente é preciso entender um pouco sobre a meteorologia, que é o estudo da termodinâmica e dinâmica da atmosfera, particularmente das partes mais baixas da mesma, onde ocorrem a maioria dos fenômenos e processos que variam com o tempo. Deve-se assim conhecer alguns conceitos fundamentais, sem os quais o entendimento da modelagem da dispersão de poluentes se torna mais difícil.

Os movimentos atmosféricos e os fenômenos relacionados a eles são classificados de acordo com suas dimensões horizontais de três maneiras: macroescala (tem uma escala de comprimento horizontal da ordem de 1000 km ou maior, com escala de tempo de um dia ou mais e na vertical se estende por toda a troposfera), mesoescala (possuem escalas de 100 m a milhares de quilômetros e que modelam fenômenos em escalas de horas ou dias) e microescala (tem um comprimento horizontal de 5 km ou menos, com escala de tempo da ordem de uma hora ou menos e escala vertical é limitada pela profundidade da Camada limite planetária (CLP)). Nesse trabalho o interesse é em fenômenos de pequena escala, que denomina-se **micrometereologia**, a qual sempre confiou muito em experimentos de campo para um melhor entendimento da camada limite (STULL, 1988).

As emissões de poluentes atmosféricos pelas fontes estacionárias e móveis de uma área ou região, associadas às características topográficas e meteorológicas, determinam os níveis de qualidade do ar da mesma área ou região, o que determina os possíveis efeitos adversos da poluição do ar sobre os receptores. Duas abor-

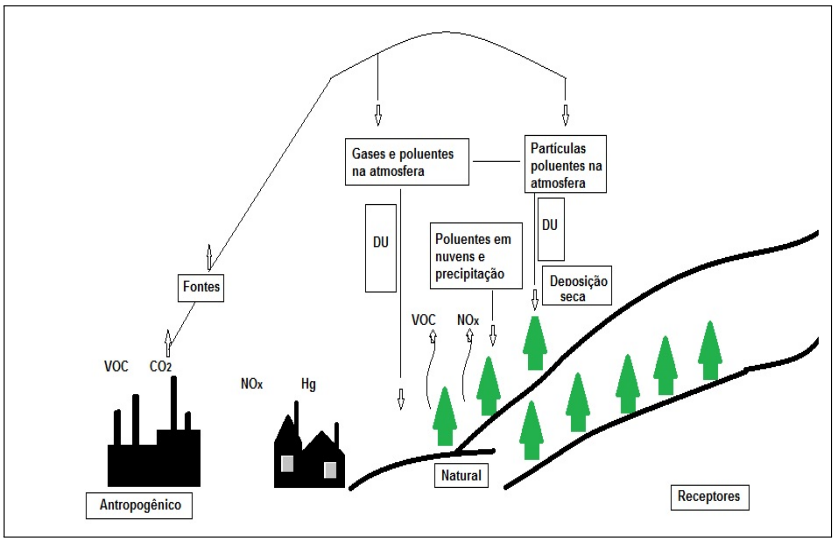


Figura 1: Fontes e receptores.

dagens são usadas para representar o fluxo e difusão de um fluído, a abordagem Euleriana e a Lagrangeana. Medidas de instrumentos localizados em locais fixos no solo, mastros ou torres são alguns dos exemplos de medidas Eulerianas, ou seja, com

referencial fixo, enquanto aquelas de veículos são exemplos de medidas Lagrangeanas, ou seja, com referencial móvel. Nesta dissertação tem-se que as medições dos dados observados são em pontos fixos, logo, utiliza-se a **abordagem Euleriana**. As primeiras medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e variáveis meteorológicas na tentativa de encontrar relações empíricas entre a difusão atmosférica e os fatores meteorológicos ocorreram na década de 1950. O experimento experimento de Copenhagen (GRYNING, 1981) ocorreu na década de 1980 e teve repercussão internacional . Tal experimento determinou o campo de concentração na superfície terrestre a uma distância de até 6000 metros a partir da fonte. As observações de campo são dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos envolvidos. Outros experimentos também destacam-se, como os experimentos de Kinkaid em Illinois nos USA (HANNA; PAINE, 1989) e o de Hanford no ano de 1983 (DORAN; HORST, 1985).

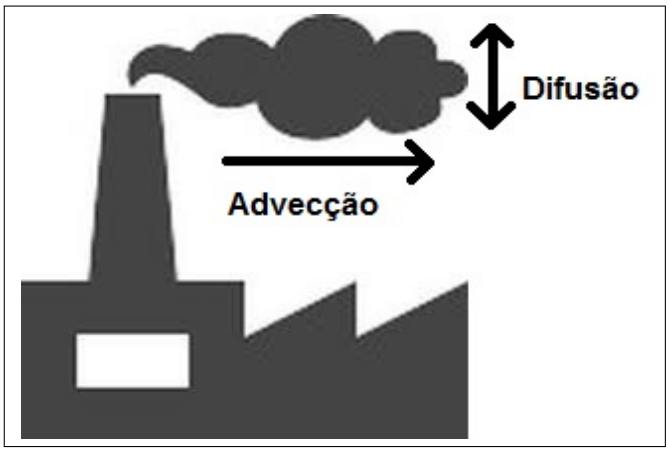


Figura 2: Esquema ilustrativo da advecção-difusão.

Para estimar a concentração de poluentes na baixa atmosfera normalmente emprega-se a **equação de advecção-difusão**, que é obtida a partir da parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade, sendo que as abordagens Eulerianas de dispersão têm como característica a solução desta equação. Um modelo de dispersão é a descrição matemática dos processos de difusão turbulenta e transporte que ocorrem na atmosfera (PASQUILL; SMITH, 1983).

O método GILTT utilizado no estudo da dispersão de poluentes atmosféricos foi o escolhido para ser utilizado nesta dissertação de mestrado por ser o que possui menos aproximações numéricas dentre os outros métodos utilizados. Além disto, possui uma vasta literatura disponível para consulta, facilitando assim a comparação dos resultados.

Nesta dissertação foram desenvolvidas as soluções analíticas das equações de advecção-difusão baseados no método GILTT em geometria bidimensional conside-

rando os estados estacionário com e sem deposição de poluentes, transiente com e sem deposição e em geometria tridimensional aproximado e totalmente analítico, para a concentração de poluentes atmosféricos. Foram considerados a altura da fonte de emissão dos poluentes, a rugosidade do terreno, a velocidade do vento e a turbulência, permitindo assim que, a partir desse cenário, fossem feitas simulações numéricas com o software Fortran, baseadas no conjunto de dados observados nos experimentos de Copenhagen, Hanford e Kinkaid. Os resultados numéricos das concentrações preditas pelo método GILTT foram comparados com os dados observados por estimadores estatísticos. Conforme os resultados obtidos pelos estimadores, a predição da dispersão de poluentes atmosféricos pode tornar-se uma valiosa ferramenta para a prevenção de danos ambientais futuros de maior magnitude causados pelos poluentes atmosféricos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Evolução das equações de advecção-difusão

As equações de advecção-difusão podem ser do tipo unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais, sendo que para ambos os casos, podem ser com ou sem deposição, tendo envolvidas grandezas como vento, velocidade, entre outras.

Na literatura encontram-se diversas soluções numéricas das equações de advecção-difusão (CARVALHO, 1996; LAMB, 1978; NIEUWSTADT; VAN ULDEN, 1978), no entanto, a busca soluções analíticas para os fenômenos de dispersão ainda tem sido uma das principais direções de pesquisa da dispersão de poluentes atmosféricos, devido aos parâmetros aparecerem explicitamente nas representações, facilitando a investigação de suas influências.

Apresenta-se na sequência uma breve revisão do que tem-se na literatura, mostrando-se as soluções analíticas da equação de advecção-difusão existentes.

Os modelos Gaussianos são os mais específicos. Um modelo Gaussiano foi proposto por Fick na metade do século XIX como a primeira solução da equação de advecção-difusão, o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura, e cujas condições de contorno considera-se reflexivas no solo e topo da CLC (Camada limite convectiva).

Uma equação bidimensional para fontes ao nível do solo, quando a velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical $K_z(m^2/s)$ seguem as leis de potência como uma função da altura foi apresentada por (ROBERTS, 1923), onde:

$$\overline{u} = \overline{u}_1 \left(\frac{z}{z_1}\right)^m ; K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1}\right)^n \tag{1}$$

onde z_1 é a altura em que u_1 e k_1 são analisados e m e n são variáveis relacionadas com a instabilidade atmosférica e a rugosidade do terreno, variando entre 0 e 1 (IRWIN, 1979).

Uma equação bidimensional para fontes altas e com perfis lineares de (K_z) foi obtida por Rounds, sendo que Smith resolveu a equação bidimensional de transporte e difusão, com u e K_z como funções de potência da altura com os expoentes dessas de

acordo com a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$, ainda, (SMITH, 1957a) apresentou um modelo para u constante com K_z dado por:

$$K_z = K_0 z^{\alpha}(z_i - z)^{\beta}, \tag{2}$$

sendo K_0 uma constante e α e β valores entre 0 e 1, conforme a altura z_i da camada limite convectiva.

Um modelo com u constante e K_z foi apresentada (SCRIVEN; FISHER, 1975):

$$K_z = z \quad para \quad 0 \leq z \leq z_t \quad e \quad K_z = K_z(z_t) \quad para \quad z_t \leq z \leq z_i, \tag{3}$$

sendo que z_t é uma altura predeterminada, que geralmente é a altura da camada superficial.

Em 1975 foram publicadas soluções para equações bidimensionais de fontes elevadas com u e K_z seguindo perfis de potência, porém para uma atmosfera sem contorno superior $K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z \to \infty$, soluções estas obtidos em termos de funções de Green (BERLYAND, 1975; YEH; HUANG, 1975). Foi apresentada uma solução com alguns avanços por em termos de funções de Bessel para uma camada limitada verticalmente, ou seja, $K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z = h$(DEMUTH, 1978). O modelo de Berlyand foi utilizado na Rússia. Na Itália foram utilizadas soluções baseadas nas soluções de (BERLYAND, 1975; DEMUTH, 1978; YEH; HUANG, 1975).

Em 1978 (DEMUTH, 1978) apresentou uma solução em termos da função de Bessel levando em consideração uma camada vertical limitada ($k_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$ em $z = z_i$).

Com a teoria da similaridade de *Monin-Obukhov* à difusão (VAN ULDEN, 1978) derivou um modelo para a difusão vertical de fontes contínuas e próximas do solo, com a suposição de que u e K_z seguem perfis de similaridade, tendo seus resultados similares aos de Roberts, porém com um modelo para fontes não superficiais mas aplicável para fontes dentro da camada superficial.

Com essa solução (VAN ULDEN, 1978) obteve resultados similares aos de (ROBERTS, 1923) considerando o caso de emissões dentro da camada limite superficial, solução que também foi utilizada no modelo SPM (TIRABASSI; RIZZA, 1992).

Um modelo para o problema unidimensional transiente, utilizando os polinômios de Legendre, foi obtida por Nieuwstadt (NIEUWSTADT, 1980), cujo coeficiente de difusão é dado por:

$$k_z = G_c u_* z \left(1 - \frac{z}{z_i}\right), \tag{4}$$

onde G_c é uma constante e u_* é a velocidade de fricção. Esse modelo foi estendido por (NIEUWSTADT; HAAN, 1981) para quando ocorre uma evolução da altura da camada limite, com a utilização dos polinômios de Jacobi e, Catalano (CATALANO, 1982) fez a extensão do modelo para o caso de perfis de vento vertical não-nulo.

A solução analítica do modelo bidimensional para fonte em superfície, onde o vento e as difusidades seguem os perfis de potência considerando os efeitos de deposição no solo foi dado por (KOCH, 1989).

O desenvolvimento de um modelo tridimensional para o transporte de emissões a partir de uma fonte aérea e contínua em superfície, sem empuxo, quando u e k_z seguem os perfis dados pela equação 1, e considerando o processo de deposição seca foi dado por (CHRYSIKOPOULOS; HILDEMANN; ROBERTS, 1992).

(SHARAN; SINGH; YADAV, 1996a; SHARAN et al., 1996b) realizaram o desenvolvimento de uma solução para dispersão tridimensional, com coeficientes de difusão constantes e parametrizações em termos da distância da fonte, soluções as quais foram obtidos em termos de funções de Bessel e combinações lineares da função de Green.

A equação de advecção-difusão pode ser resolvida através de vários métodos, dentre eles, os métodos analíticos que usam aproximações, métodos híbridos, os quais são chamados de semi-analíticos, onde uma parte do problema é resolvido de forma analítica e outra parte é resolvida numericamente. Particularmente, são de interesse nessa dissertação os métodos analíticos que são obtidos com a aplicação da técnica da transformada de Laplace e da técnica da transformada integral generalizada. A seguir é dado um enfoque aos métodos que utilizam tais técnicas para obter a solução analítica da equação de advecção-difusão.

O método baseado na discretização da camada limite planetária em N subcamadas, chamado de ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*), foi introduzido por Vilhena (VILHENA et al., 1998). Tal método é resolvido aplicando a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica, considerando valores médios para o coeficiente de difusão e perfil de vento, onde há a substituição de um problema com coeficientes variáveis por um conjunto de problemas com coeficientes constantes que são acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminantes nas interfaces. Pode-se citar alguns trabalhos que utilizaram essa técnica, como o utilizado por Moreira e colaboradores (MOREIRA et al., 2005, 2006).

GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) é um método híbrido (COTTA, 1993; COTTA; MIKHAYLOV, 1997) derivado da transformação integral clássica (MIKHAYLOV; OZISIK, 1984) para problemas lineares de difusão, o qual combina uma expansão em séries com uma integração. Em tal expansão, é utilizada uma base de autofunções que são determinadas por um problema auxiliar que contém o operador diferencial principal do problema original cuja integração é feita em todo o intervalo da variável transformada. Utilizando da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão, obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), também chamado de problema transformado que, após solucionado por sub-rotinas numéricas, é invertido para a obtenção do resultado da equação original. A utilização

dessa técnica foi apresentada em diversos trabalhos (CHEROTO et al., 1999; LIU et al., 2000; RIBEIRO et al., 2002; MACEDO; MANESCHY; QUARESMA, 2000; PEREIRA et al., 2002; MAGNO; MACEDO; QUARESMA, 2002; ALVES; COTTA; PONTES, 2002; VELLOSO et al., 2003; STORCH; PIMENTEL, 2003).

A resolução da equação de advecção-difusão tridimensional utilizando a técnica GITT juntamente com o método ADMM foi feita por Costa (COSTA et al., 2006) e recebeu o nome GIADMT (*Generalized Integral Advection-Diffusion Multilayer Technique*). Esse método consiste em transformar o problema tridimensional em um problema bidimensional pela técnica da GITT na variável y, de forma que o problema bidimensional resultante é resolvido pelo método ADMM, discretizando a CLP. Encontra-se as aplicações do método GIADMT em trabalhos de Costa e colaboradores (COSTA et al., 2006; VILHENA et al., 2009; COSTA; TIRABASSI; VILHENA, 2010; COSTA et al., 2012).

Um novo método analítico para a equação de advecção-difusão bidimensional com coeficientes de difusão variáveis com a altura foi apresentada por Wortmann e colaboradores (WORTMANN et al., 2005). Uma aplicação da técnica GITT em problemas de poluição atmosférica, totalmente analítica, recebeu o nome de GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). A solução de problemas diferenciais parciais pelo método GILTT é dada da seguinte maneira: inicialmente expande-se a concentração de poluentes em série, em termos de um conjunto de funções ortogonais, obtidas da solução de um problema auxiliar de Sturm-Liouville. Posteriormente, substitui-se tal expansão na equação de advecção-difusão estacionária, e integra-se em todo o domínio, resultando em um sistema de EDO's, o qual é chamado de problema transformado, que após solucionado é facilmente invertido para a obtenção do resultado da equação original que é resolvida analiticamente. O método GILTT é analítico no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, exceto pelo erro de truncamento da solução em série para os cálculos numéricos. Encontra-se a aplicação do método GILTT em: (WORTMANN et al., 2005; MOREIRA et al., 2006; BUSKE et al., 2007b; MOREIRA; VILHENA; BUSKE, 2009) e (SCHUCH et al., 2011).

Em 2009, surgiu o método 3D-GILTT (*Three-dimensional Generalized Integra Laplace Transform Technique*), o qual foi aplicado a uma classe abrangente de problemas de dispersão de poluentes na atmosfera, onde inclui os problemas que consideram o coeficiente de dispersão transiente. Um maior detalhamento do método pode ser encontrado nos trabalhos de (BUSKE et al., 2009a,b, 2012) e (VILHENA et al., 2012).

A determinação das concentrações de determinados poluentes atmosféricos, primários e secundários são complexas devido à natureza desse fenômeno, às diferentes escalas envolvidas, à não linearidade das equações as quais governam os fluídos atmosféricos, à presença de turbulência, à complexidade do terreno, à falta

de dados de qualidade e à grande quantidade de reações e processos de adição e remoção presentes na atmosfera e que geralmente não podem ser diretamente medidos.

O estudo da dispersão de poluentes nesta dissertação foi baseado na dispersão de um dos gases provenientes das chaminés, o gás hexafluoreto de enxofre (SF_6) que é um dos mais utilizados como objeto de estudo dentre os gases dispersos na atmosfera. Segundo o PAINEL INTERGOVERNAMENTAL DE MUDANÇAS CLIMÁTICAS (IPCC, 2009), os gases causadores do efeito estufa provenientes de indústrias recebem tal denominação por terem a capacidade de reter o calor na atmosfera, do mesmo modo que o revestimento de uma estufa para cultivo de plantas. O SF_6 chega à atmosfera, por exemplo, pela utilização como líquido para refrigeração (HFC), na produção de alumínio (PFC), no isolamento elétrico em atividades de transmissão e na distribuição de energia (SF_6) (EPA, 2009). O SF_6 é um gás-estufa extremamente potente, com um efeito 32000 vezes maior do que o gás CO_2, se considerado um intervalo de 500 anos de atuação, o que certamente será ainda maior, já que o SF_6, por ser inerte, tem uma expectativa de duração na atmosfera de mais de 3200 anos.

2.2 Componentes dos modelos de advecção-difusão

2.2.1 Camada limite planetária

O conhecimento das condições atmosféricas é de suma importância no estudo do transporte de poluentes, principalmente próximo á superfície, isso porque a concentração de poluentes depende basicamente das condições meteorológicas de uma região.

A Terra é envolvida por uma camada composta por gases, a qual denomina-se atmosfera terrestre, que é de grande importância para a vida terrestre e esta é retida pela força gravitacional. A atmosfera divide-se em camadas chamadas de troposfera, estratosfera, mesosfera, termosfera e exosfera, sendo que todas juntas compõem uma extensão de aproximadamente 1000 km (ARYA, 1995).

A camada que está diretamente em contato com a superfície terrestre é a troposfera e é nessa camada que os fenômenos de interesse da meteorologia acontecem, cuja espessura é de aproximadamente 10 km em média, e conforme a altitude aumenta a temperatura também aumenta. Com isso, o ar quente que fica mais próximo da superfície terrestre se eleva facilmente, pois é menos denso que o ar mais frio que localiza-se acima. Tal movimento vertical ou convecção do ar gera as nuvens e, a partir da umidade do ar no interior das nuvens forma-se a chuva, dando origem a uma boa parte do nosso clima. A troposfera limita-se pela tropopausa que é uma região de temperatura estável. Na estratosfera, a temperatura do ar começa a subir, impedindo que ocorra convecção do ar para além da tropopausa e, consequentemente, a maioria

dos fenômenos meteorológicos confinam-se na troposfera (ARYA, 1995).

Em geral, os poluentes são liberados e inicialmente dispersados devido a processos físicos que ocorrem na parte da atmosfera mais próxima à superfície terrestre, chamada de camada limite atmosférica. Assim, quando estuda-se os processos de dispersão atmosférica, é necessário que se compreenda a sua estrutura. Será feita uma breve descrição sobre as principais teorias utilizadas nos últimos anos para uma caracterização do escoamento nesta região. A **camada limite atmosférica (CLA)** desenvolve-se de forma continua devido ao aquecimento e resfriamento superficial terrestre durante o ciclo diurno. Nesse período, o aquecimento superficial terrestre é responsável por uma forte convecção. A forte turbulência na direção vertical gera uma camada instável e bem misturada e normalmente chamada de **camada de mistura (CM)**. Devido a intensa mistura os gradientes de escalares e de momentum nesta região são normalmente nulos ou desprezíveis. No período noturno, o resfriamento radiativo da superfície gera uma **camada limite estável (CLE)** e muito menos difusiva (WYNGAARD, 1981; ARYA, 1995).

Descreve-se o escoamento na CLA através de um conjunto de sete equações, sendo três equações para a conservação do momentum, uma equação para a conservação de massa, uma equação para a conservação da energia térmica, uma equação para a conservação do vapor d'água (se a atmosfera úmida for considerada) e uma equação de estado. Tal conjunto de equações para as quantidades médias e suas respectivas flutuações, aplicado à um fluido em rotação pode ser simplificado ao que é conhecido como a aproximação de Boussinesq (WYNGAARD, 1981), e é descrito em (GARRAT, 1994).

Quanto aos problemas de dispersão de poluentes atmosféricos, a equação para o transporte de uma quantidade escalar precisa ser resolvida. A informação sobre o campo de vento pode ser inserida através da equação para a conservação de momentum. Tal equação é resolvida de forma acoplada às equações de estado, conservação da energia térmica, massa e vapor d'água. A solução das equações de transporte e de momentum necessita de um grande tempo computacional. Alternativamente adotada-se na descrição dos processos de dispersão de poluentes na atmosfera é a utilização de parametrizações para a velocidade do vento e difusão turbulenta (se os fluxos turbulentos que aparecem na equação de conservação de quantidade escalar forem descritos por um modelo de fechamento de 1ª ordem), baseados em teorias de similaridade para a CLA. Tais descrições simplificam computacionalmente o processo de solução de um problema de dispersão.

Para expressar relações entre diferentes quantidades na forma adimensional utiliza-se como base uma teoria de similaridade que utiliza análise dimensional, revelando leis de escala fundamentais. Tal método envolve a escolha de escalas características apropriadas, e a organização das mesmas em grupos adimensionais. O

objetivo de qualquer teoria de similaridade aplicada à atmosfera é dimensionar corretamente quantidades importantes na atmosfera como perfil de vento e fluxos turbulentos, através da escolha de escalas apropriadas de comprimento, velocidade e temperatura (GARRAT, 1994). A ideia básica é assumir que a estrutura da CLA pode ser descrita somente em termos de um pequeno conjunto de parâmetros característicos. A

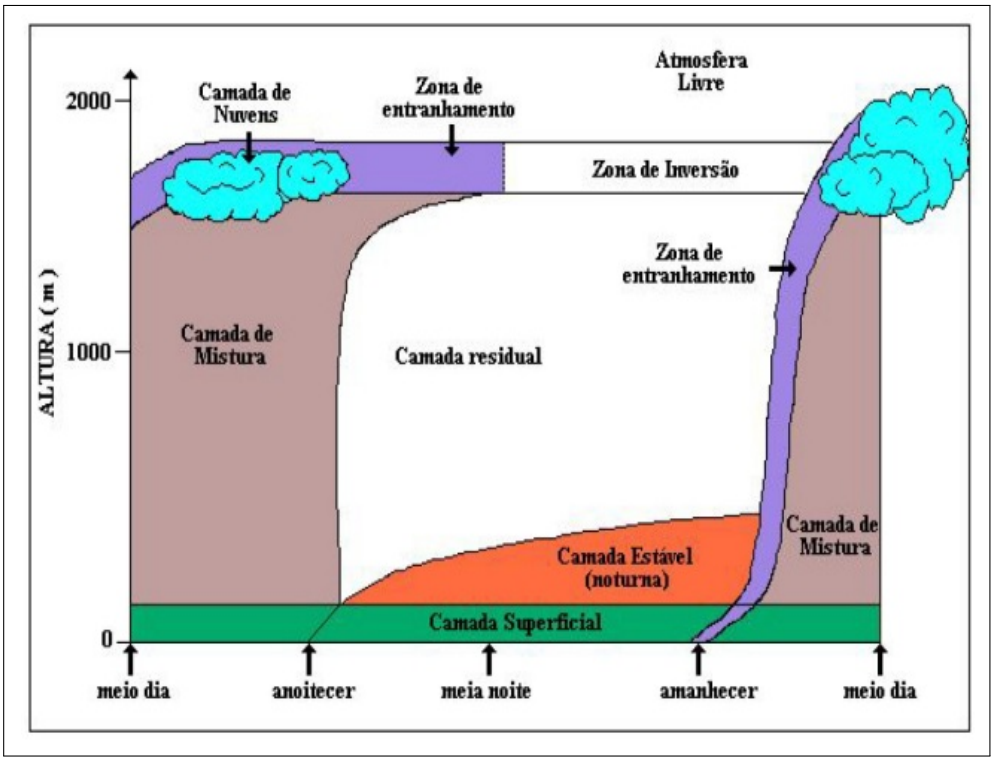


Figura 3: Ciclo diário da CLP (STULL, 1988).

camada limite instável se forma quando há um fluxo de calor sensível da superfície para o ar acima da mesma, o que é resultado de uma diferença de temperatura potencial positiva entre estas duas regiões e é dividida nas regiões descritas a seguir (HOLTSLAG; NIEWSTADT, 1986).

Camada limite superficial (CLS) é a região da CLA em contato direto com a superfície.

Camada de mistura (CM) é a região de domínio dos movimentos convectivos de grande escala, resultantes do aquecimento da superfície. Nesta região a presença da superfície não tem influência sobre o escoamento.

Camada de convecção livre (CCL) é a camada de ligação (*matching Layer*) entre a CLS instável e a CM, Nesta região os gradientes de velocidade do vento e temperatura não são desprezíveis. A velocidade de fricção deixa de ser um parâmetro importante.

***Near neutral upper layer*(NNUL)** é a região conhecida como NNUL, ou camada superior quase neutra. É definida, segundo Holtslag (HOLTSLAG; NIEWSTADT,

1986), pelos mesmos parâmetros que a CLS, com o acréscimo de h.

Camada de estranhamento (*Entrainment Layer*) é a região de interface entre a atmosfera livre e a camada limite instável. A estrutura desta camada ainda não é bem compreendida e por isso, nenhum parâmetro de escala pode ser dado (DRIEDONKS; TENNEKES, 1984).

Camada limite convectiva (CLC) é a camada que começa a se formar depois do nascer do sol, dura o dia todo e cessa antes do pôr do sol (STULL, 1988).

Na CLC, o fluxo de calor sensível turbulento, gerado pelo aquecimento solar da superfície terrestre, dá origem a uma estrutura de plumas térmicas, que é o ar quente que se eleva até a base da inversão térmica, circundadas por ar mais frio que desce do topo das nuvens em direção ao solo. Em condições suficientemente instáveis, tais estruturas são aleatoriamente distribuídas e apresentam longa vida funcional, com escalas de tempo da ordem de 15 minutos.

De acordo com observações na atmosfera, 40% da área de uma CLC é ocupada por plumas térmicas (*updrafts*), e 60% é ocupada por ar mais frio que desce (*downdrafts*).

Sabe-se que pela lei de conservação de massa, o ar quente subindo tem uma velocidade maior do que o ar frio que desce. Os modelos numéricos mostram que esta estrutura assimétrica da CLC é responsável por padrões de dispersão vertical que são distintos dos tradicionais padrões Gaussianos (LAMB, 1982a). Esta assimetria na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como sendo o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por chaminés altas na CLC.

A circulação convectiva, incluindo o *downdraft* e *updraft*, tem escalas horizontais de $1,5h$ (CAUGHEY; PALMER, 1979). As velocidades verticais em termas podem alcançar 5 m/s ou mais, embora *updrafts* de 1 a 2 m/s sejam os mais comuns.

É importante ressaltar que a CLE ocorre com o resfriamento terrestre que provoca um fluxo de calor negativo capaz de extrair energia cinética dos grandes turbilhões, o que permite apenas que pequenos turbilhões resistam, logo, a turbulência nesta camada é menos intensa o que favorece a dispersão mais lenta horizontalmente de poluentes. Essa camada é formada por pequenos turbilhões.

2.2.2 A física da dispersão

O vento e a turbulência, que são flutuações do campo médio dos ventos, determinam os mecanismos da dispersão de poluentes atmosféricos (CARVALHO, 1999).

O vento horizontal, a estabilidade atmosférica, a intensidade da inversão de altitude, o movimento vertical e os efeitos de terreno são os principais fatores meteorológicos que influenciam o fenômeno da dispersão atmosférica (ZANNETTI, 1990).

O resultado direto dos efeitos térmicos (correntes convectivas) e mecânicos (quan-

tidade de movimento do vento horizontal) se dão devido a turbulência que é o principal fator na dispersão vertical de poluentes atmosféricos.

Pode-se destacar influência de alguns fatores na dispersão dos poluentes atmosféricos, como a direção do vento medido no local onde se encontra a fonte que determina a direção inicial do transporte dos poluentes que são originados da fonte. A concentração dos poluentes provenientes de fontes pontuais, como chaminés, é provavelmente mais sensível à direção do vento do que a qualquer outro parâmetro.

Segundo Boubel (BOUBEL et al., 1994), um desvio de 5^0 na direção do vento pode causar uma redução de até 90% na concentração medida por um amostrador alinhado com a direção original, dependendo das condições atmosféricas, ou seja, pequenos erros na estimativa da direção do vento podem ocasionar grandes erros nas estimativas das concentrações. Devido a alternância ocorrida na direção do vento, torna-se difícil uma simulação que seja confiável da dispersão de poluentes atmosféricos, mesmo que a intensidade do vento também uma influência significante na dispersão dos poluentes atmosféricos.

Na figura 4 é representado o efeito do módulo da velocidade do vento na dispersão dos poluentes, de acordo com a velocidade do vento.

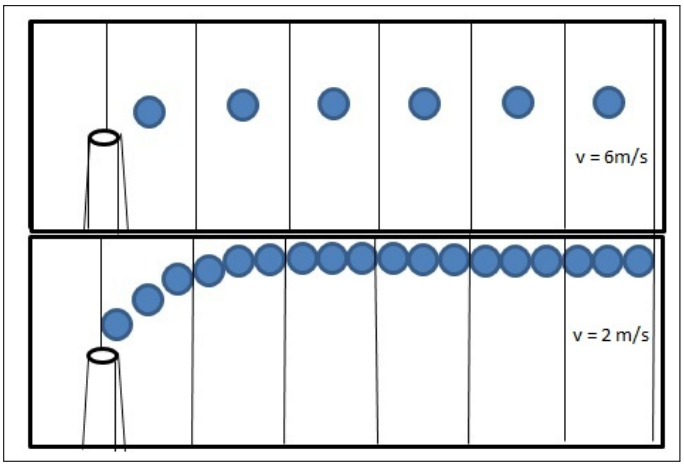


Figura 4: Influência do vento horizontal na dispersão dos poluentes adaptado de (BOUBEL et al., 1994). Na parte inferior é mostrada a distância da fonte em metros.

Define-se a estabilidade da atmosfera como a sua capacidade de resistir ou de intensificar os movimentos verticais. Quanto à sua influência diz-se que quando ela resiste aos movimentos verticais é chamada de atmosfera estável, quando intensifica os movimentos verticais de atmosfera instável ou convectiva, e quando é indiferente a qualquer tipo de movimento vertical é chamada atmosfera neutra.

O grau de estabilidade atmosférica pode ser determinado através do perfil vertical de vento, onde que cada tipo de estabilidade atmosférica proporciona uma melhor ou uma pior dispersão dos poluentes atmosféricos.

A temperatura potencial é definida como a temperatura que uma parcela de ar teria se fosse trazida, adiabaticamente, de um determinado nível até o nível onde a pressão é de 1000 mbar. Este conceito de temperatura potencial está relacionado com o conceito de estabilidade estática, isto é, um arranjo do fluido em que a porção mais leve fica acima da porção mais pesada. De duas parcelas com temperaturas potenciais diferentes, aquela com maior temperatura potencial será a mais leve.

A influência da estabilidade na forma da pluma pode ser observada na figura 5.

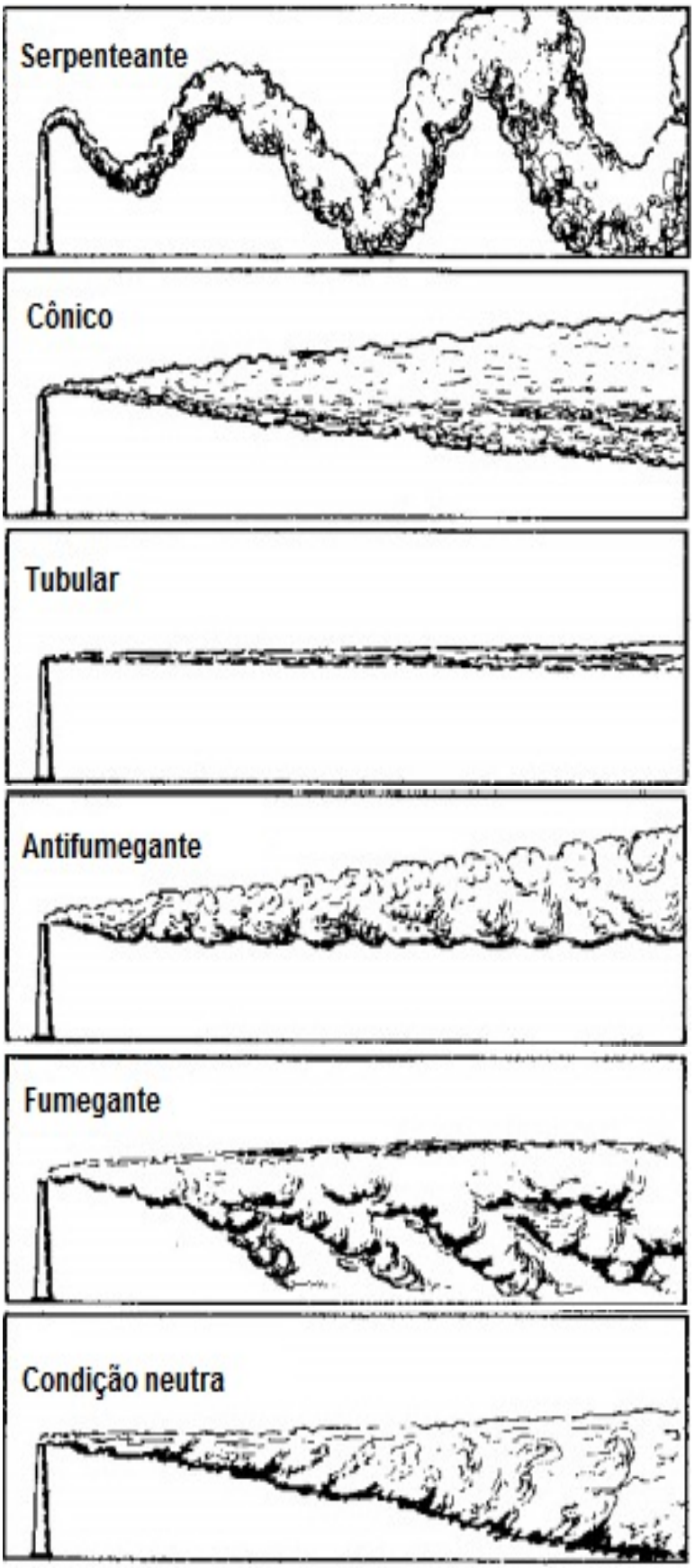


Figura 5: Influência da estabilidade da atmosfera na forma da pluma adaptado de (BOUBEL et al., 1994).

Um dos fatores que mais influenciam a dispersão dos poluentes atmosféricos é o perfil vertical de temperatura próximo ao solo. Em atmosferas convectivas o aspecto da pluma assume forma de *looping*. As condições instáveis ou convectivas ocorrem durante o dia, com forte entrada de radiação, o que acontece em dias bastante ensolarados e sob vento fraco. Estas condições proporcionam uma forte mistura vertical dos poluentes, provocada por movimentos convectivos organizados gerados pelo aquecimento solar da superfície (CARVALHO, 1999).

Diversos estudos de observação e simulação revelaram a presença destes movimentos. Os resultados obtidos por (LAMB, 1982b) com um modelo de simulação de grandes escalas (*Large Eddy Simulation*), mostraram bem este comportamento.

As condições neutras são caracterizadas pela ocorrência de um perfil vertical de temperatura adiabático (aproximadamente constante com a altura). Estas condições ocorrem geralmente durante as transições do dia para noite e vice-versa, em dias nublados ou com vento forte (com velocidades maiores que aproximadamente 6 m/s).

Em atmosferas neutras o aspecto da pluma assume uma forma cônica. Nesses casos a turbulência pode ser considerada homogênea, com vórtices de mesmo tamanho, aproximadamente, atuando em todas as direções. Condições estáveis são caracterizadas por um perfil sub-adiabático, que é o aumento da temperatura com a altura. Quando a parcela de ar, ao elevar-se na atmosfera, encontrar ar circundante mais quente sua tendência é descer.

Em situações estáveis qualquer movimento vertical é inibido. Logo, a turbulência causada por efeitos convectivos não está presente, e a única turbulência presente é a mecânica, causada pelos efeitos mecânicos do vento escoando sobre uma superfície ou outra camada de fluido.

O aspecto da pluma em uma atmosfera estável é tubular. Sob estas condições, com vento fraco, o poluente pode viajar a grandes distâncias mantendo altas concentrações.

A modelagem do transporte e dispersão de poluentes na camada estável é um dos grandes desafios da micrometeorologia. Os efeitos das ondas de gravidade e a intermitência da turbulência tornam ainda mais difícil a modelagem desta camada.

Uma atmosfera estável por exemplo na presença de vento fraco é uma das situações onde se torna mais difícil prever a dispersão de poluentes (BRUSASCA; TINARELLI; ANFOSSI, 1992; DEGRAZIA, 1998). Neste caso a suposição de que a difusão longitudinal, na equação convecção-difusão, pode ser desprezada, em relação aos termos de transporte, deixa de ser verdade, no caso do modelo Gaussiano, e é preciso tomar bastante cuidado, pois as flutuações turbulentas causam grandes variações na direção do vento.

Em situações mistas, quando o perfil de temperatura sofre uma inversão com a altura, e a pluma pode ser, por exemplo, aprisionada nesta camada de inversão. É

o caso da fumigação, onde uma inversão de altura impossibilita a dispersão para altitudes mais elevadas, enquanto que na camada abaixo o perfil é instável. Assim, o poluente é transportado em direção ao solo pelas correntes descendentes *downdrafts*), e os níveis de concentração ao nível do solo podem ser bem altos. Este tipo de situação pode ocorrer em plumas provenientes de chaminés elevadas colocadas junto à costa (EPSTEIN, 1996). Outro caso bem próximo da fumigação é a chamada situação de aprisionamento, quando a atmosfera encontra-se em estado neutro, e logo acima, na altura da pluma, uma camada de inversão se forma. Assim, os poluentes são mais uma vez aprisionados, e se dispersam na direção do solo em formato cônico. O caso inverso deste último caso é a chamado condição do tipo antifumegante, onde uma inversão localizada abaixo da altura da chaminé impede que os poluentes cheguem ao solo. Esta situação pode ocorrer principalmente pela manhã , em dias de sol e após uma noite de céu claro (EPSTEIN, 1996).

Quando a o ar quente fica aprisionado entre duas camadas de ar frio tem-se condições de estagnação de poluentes, chamada de inversão térmica como pode ser ilustrada na figura 6.

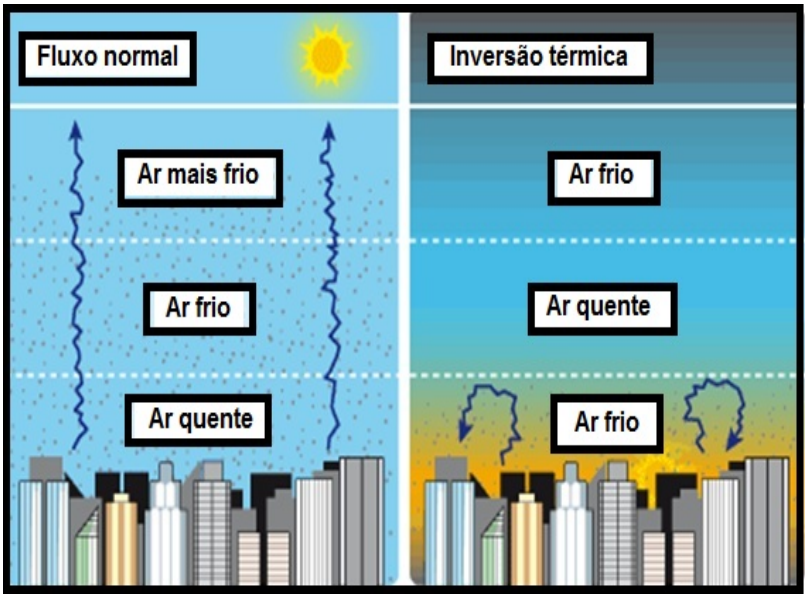


Figura 6: Esquema ilustrativo da representação da inversão térmica.

Ao destacar-se o comportamento da pluma, tem-se que a emissão de poluentes pode ser divididas em dois tipos básicos: os que podem ser liberações descontínuas conhecidas como *puff*, ou liberações contínuas conhecidas como *plumas*. A concentração dos poluentes na atmosfera depende parcialmente da fonte, e em grande parte é influenciada pelas condições meteorológicas e a configuração do terreno.

Na figura 7 são ilustrados os efeitos dos diferentes tamanhos de vórtices na dispersão de um *puff*. Quando o tamanho do *puff* é maior do que o tamanho médio dos vórtices, a tendência do *puff* é de se expandir.

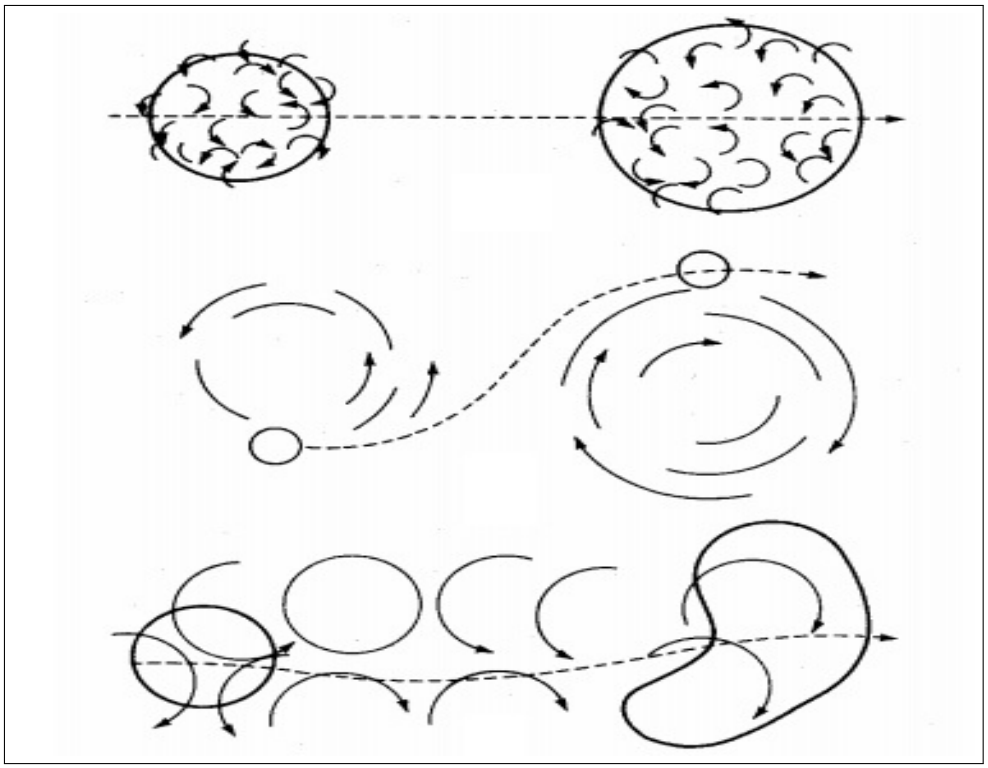


Figura 7: Efeito dos diferentes tamanhos de vórtices na dispersão de um *puff* (Adaptado de (SEINFELD, 1994)).

Por outro lado, em atmosferas instáveis, caracterizadas pela presença de grandes vórtices, com tamanhos da ordem da altura da CLP, o efeito é de elevar e baixar estes *puffs*, de modo a criar um formato serpenteante da pluma, como mencionado anteriormente. Mesmo assim, ainda se tem uma situação mista onde o tamanho dos turbilhões é aproximadamente da dimensão do *puff*.

O terreno também influencia na previsão da dispersão de poluentes atmosféricos, pois a complexidade do terreno ocasiona grandes mudanças na direção e velocidade do vento e nos fluxos turbulentos (CARVALHO, 1999). Fato que limita a aplicação de modelos mais simples como os gaussianos, pois condições de regime permanente e homogeneidade de terreno são dificilmente encontradas. Terrenos planos, sem nenhum tipo de elevação, ou com elevações que não influenciam o escoamento ao seu redor não geram recirculações. Já os terrenos complexos, onde elevações são significativas a ponto de influenciar o escoamento atmosférico ao seu redor geram recirculações.

O encontro da pluma com montanhas, o acúmulo de poluentes em vales, o arrasto dos poluentes para centros urbanos devido ao fenômeno da canalização do vento

pelos vales são as principais situações que podem aumentar as concentrações em terreno complexo. Assim, os modelos que levem em conta o maior número destes fatores, no cálculo do campo do vento, são mais apropriados para captarem a realidade física do fenômeno de dispersão (CARVALHO, 1999).

2.3 O Modelo matemático e a solução

Consideremos um experimento de dispersão de poluentes na atmosfera, no qual uma fonte aérea libera um traçador químico. Este é abandonado sem empuxo, a partir de uma torre com altura H_s, que emite poluentes com intensidade Q a uma taxa constante, como pode ser visto na figura 8.

Figura 8: Esquema ilustrativo representando a dispersão de poluentes (caso bidimensional).

2.3.1 A equação bidimensional de advecção-difusão estacionária

Apresenta-se na sequência, sem perda de generalidade, a solução da equação de advecção-difusão estacionária para exemplificar a obtenção da solução aqui utilizada. A solução foi obtida por (BUSKE, 2004) e está publicada no artigo (MOREIRA et al., 2009a).

A equação de advecção-difusão bidimensional é resolvida aplicando a transformada de Laplace e o método GILTT. Os passos mais importantes do método GILTT são a construção de um problema auxiliar de Sturm-Liouville, a determinação da técnica da transformada integral em uma série truncada usando como base as autofunções do problema de Sturm-Liouville resolvido e a substituição desta expansão

no problema original. Obtém-se a equação transformada da GILTT usando-se propriedades de ortogonalidade das autofunções, integrando-se em todo o domínio. A equação transformada consiste de uma equação diferencial ordinária matricial que é resolvida analiticamente pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização. Por fim, a concentração é obtida invertendo-se a solução do problema.

Considera-se inicialmente a equação bidimensional de advecção-difusão no estado estacionário com vento orientado na direção x:

$$u(z)\frac{\partial c(x,z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z(z)\frac{\partial c}{\partial z}\right), \tag{5}$$

para $0 < z < h$ e $x > 0$, sujeita às condições de contorno de fluxo, zero no solo, ou seja, $z = 0$ e no topo da CLP, isto é, $z = h$ e com uma condição de fonte de emissão Q (contínua) à uma altura H_s:

$$K_z\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0, \text{para } z = 0, h, \tag{6}$$

$$u\bar{c}(0,z) = Q\delta(z - H_s), \text{para } x = 0, \tag{7}$$

sendo u o vento médio orientado na direção *x*, considerado variável com a altura $(u = u(z))$, K_z o coeficiente de difusão turbulenta na direção *z*, considerado variável com a altura $(K_z = K_z(z))$ e δ representa a função delta de Dirac, que é dada por:

$$\delta(z) = \left\{ \begin{array}{ll} \infty, & \text{se } z = H_s \\ 0, & \text{se } z \neq H_s \end{array} \right\} \tag{8}$$

O termo difusivo na equação (5) é reescrito usando a regra da cadeia. Este procedimento permite uma simplificação do problema auxiliar (COTTA; MIKHAYLOV, 1997). Então, podemos escrever:

$$u(z)\frac{\partial \bar{c}(x,z)}{\partial x} = K_z(z)\frac{\partial^2 \bar{c}(x,z)}{\partial^2 z} + K_z^{'}(z)\frac{\partial \bar{c}(x,z)}{\partial z}. \tag{9}$$

Dividindo-se a equação (9) por K_z, obtém-se:

$$\frac{u(z)}{K_z}\frac{\partial \bar{c}(x,z)}{\partial x} = \frac{\partial^2 \bar{c}(x,z)}{\partial z^2} + \frac{K_z^{'}}{K_z}\frac{\partial \bar{c}(x,z)}{\partial z}. \tag{10}$$

Assim, escolhe-se um problema auxiliar de Sturm-Liouville dado por:

$$\psi_n^{''}(z) + \lambda_n^2\psi_n(z) = 0 \text{ para } 0 < z < h, \tag{11}$$

com as seguintes condições de contorno:

$$\psi^{'}(z) = 0 \text{ para } z = 0 = h, \tag{12}$$

com solução: $\psi_n(z) = cos(\lambda_n z)$, sendo essa solução conhecida e tabulada em (ÖZISIK, 1974), onde $\lambda_n = \frac{n\pi}{h}$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$.

Então expande-se a concentração $\bar{c}(x, z)$ em série, em termos das autofunções do problema de Sturm-Liouville dado pela equação(**??**), da seguinte maneira:

$$\bar{c}(x, z) = \sum_{n=0}^{N} \bar{c}_n(x)\psi_n(z). \tag{13}$$

Para determinar o coeficiente desconhecido $\widehat{c}_n(x)$, substitui-se a equação (**??**) na equação (9) e este procedimento leva-nos a:

$$u(z)\sum_{n=0}^{N} \bar{c}_n^{'}(x)\psi_n(z) = K_z \sum_{n=0}^{N} \bar{c}_n(x)\psi_n^{''}(z) + K_z^{'} \sum_{n=0}^{N} \bar{c}_n(x)\psi_n^{'}(z). \tag{14}$$

Na equação (14), uma linha e duas linhas significam primeira e segunda derivadas, respectivamente. Agora, aplicando-se o operador $\int_0^h()\psi_m(z)dz$:

$$-\sum_{n=0}^{N} \bar{c}_n^{'}(x)\int_0^h u(z)\psi_n\psi_m dz - \sum_{n=0}^{N} \bar{c}_n(x)\lambda_n^2 \int_0^h K_z\psi_n\psi_m dz + \sum_{n=0}^{N} \bar{c}_n(x)\int_0^h K_z^{'}\psi_n^{'}\psi_m dz = 0 \tag{15}$$

A equação(15) pode ser escrita na forma matricial:

$$Y^{'}(x) + FY(x) = 0 \ \ , x > 0 \tag{16}$$

Com condição inicial:

$$Y(0) = \bar{c}_n(0) \qquad . \tag{17}$$

onde $Y(x)$ é um vetor cujas componentes são $\bar{c}_n(x)$, $B = b_{n,m}$ e $E = e_{n,m}$ cujas entradas são respectivamente:

$$b_{n,m} = -\int_0^h u(z)\psi_n\psi_m dz \tag{18}$$

$$e_{n,m} = \int_0^h K_z^{'}\psi_n^{'}\psi_m dz - \lambda_n^2 \int_0^h K_z\psi_n\psi_m dz, \tag{19}$$

sendo que as integrais em (18) e (19) são resolvidas numericamente usando a Quadratura de Gauss.

Igualmente, para determinarmos a condição (17), segue-se o mesmo procedi-

mento anterior, ou seja, expande-se em série a condição de fonte e substitui-se em (7) para obter:

$$\sum_{n=0}^{N} u(z)\bar{c}_n(0)\psi_n(z) = Q\delta(z - H_s). \tag{20}$$

$$\bar{c}_n(0) = Q\psi_m(H_s)A^{-1}. \tag{21}$$

aplicando-se o operador integral $\int_0^h()\psi_m(z)dz$ onde A^{-1} é a inversa da matriz A dada por:

$$a_{n,m} = -\int_0^h u(z)\psi_n(z)\psi_m(z)dz. \tag{22}$$

Resolve-se o problema transformado, dado pela equação (16), aplicando-se a técnica da Transformada de Laplace e diagonalização, onde x é transformado em s e Y em $\bar{Y}$ e obtém-se:

$$s\bar{Y}(s) + F\bar{Y}(s) = Y(0). \tag{23}$$

onde $\bar{Y}(s)$ denota a transformada de Laplace para o vetor $Y(x)$. Observando-se que a matriz F, com autovalores distintos pode ser escrita como:

$$F = XDX^{-1}, \tag{24}$$

onde D é a matriz diagonal de autovalores da matriz F, X é a matriz das autofunções e X^{-1} é a inversa. Este procedimento é válido quando os autovalores de F são distintos.

Substituindo-se a equação (24) na equação (23) , obtém-se:

$$(sI + XDX^{-1})\bar{Y}(s) = Y(0). \tag{25}$$

onde I é a matriz identidade. Lembrando que $XX^{-1} = X^{-1}X = I$, a equação (25) pode ser escrita da forma:

$$(sXX^{-1} + XDX^{-1})\bar{Y}(s) = Y(0), \tag{26}$$

Colocando a matriz de autovetores e sua inversa em evidência como:

$$X(sI + D)X^{-1}\bar{Y}(s) = Y(0). \tag{27}$$

Sendo os elementos da matriz $(sI+D)$ da forma $s + d_n$, onde d_n são os autovalores da matriz F da equação (24). Sabendo da estrutura diagonal da matriz F, pode-se escrever a matriz inversa de F como $\frac{1}{s+d_n}$, uma vez que a inversa de uma matriz diagonal é a inversa de seus elementos, isto é, representando cada elemento de $(sI +$

$D)^{-1}$. A matriz $(sI + D)$ é escrita como:

$$(sI + D) = \begin{bmatrix} s + d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + d_n \end{bmatrix}.$$

e sua inversa dada por:

$$(sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{s+d_n} \end{bmatrix}.$$

Multiplicando-se a equação (27) em ambos os lados por X^{-1}, $(sI + D)^{-1}$ e X, consecutivamente, obtém-se:

$$\bar{Y}(s) = X(sI + D)^{-1}X^{-1}Y(0). \tag{28}$$

Aplicando a Transformada Inversa de Laplace na equação (28), obtém-se:

$$Y(x) = X\mathcal{L}^{-1}\left\{(sI + D)^{-1}\right\}X^{-1}Y(0). \tag{29}$$

Aqui, $\mathcal{L}^{-1}$ denota a Transformada Inversa de Laplace. Nota-se que cada elemento da diagonal principal matriz $(sI + D)$ pode ser escrito como $s + d_n$, onde os d_n são os autovalores da matriz F. Da estrutura diagonal da matriz F pode-se escrever a matriz inversa de F sendo cada elemento da diagonal principal da matriz inversa $\frac{1}{s+d_n}$.

Executando-se a inversão da Transformada de Laplace $L^{-1}\{(sI + D)^{-1}\}$, obtemos $e^{-d_n x}$ para cada elemento da diagonal principal da matriz $G(x)$ dada por:

$$G(x) = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{-d_n x} \end{bmatrix},$$

cuja solução final é dada por:

$$Y(x) = X.\begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{-d_n x} \end{bmatrix}.X^{-1}.Y(0).$$

Portanto, a solução para a concentração está agora bem determinada e dada por:

$$Y(x) = X.G(x).X^{-1}.Y(0), \tag{30}$$

pois o vetor $\bar{c}_n(x)$ é conhecido.

Os demais modelos cujas soluções são utilizadas nessa dissertação podem ser encontrados em (MOREIRA et al., 2009a; BUSKE et al., 2012).

3 DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO

Uma utilização correta do modelo de transporte e difusão na atmosfera não pode prescindir de um estudo sobre suas capacidades de representarem corretamente situações reais. Quando possível, deve ser verificada a confiabilidade do modelo utilizado com os dados, cenários topográficos e micrometeorológicos próprios da área de seu emprego. Neste capítulo, apresentam-se os dados experimentais, parametrizações dos coeficientes de difusões, perfis de vento, expressões para o parâmetro de dispersão lateral e os estimadores estatísticos utilizados nesta dissertação.

3.1 Dados experimentais

A seguir são apresentados os experimentos difusivos utilizados nesta dissertação para validar os modelos.

3.1.1 O experimento de Copenhagen

Experimentos realizados com dispersão de poluentes em Copenhagen, descritos nos artigos de Gryning (GRYNING, 1981) e Gryning e Lyck (GRYNING; LYCK, 1984), consistiram na liberação do traçador SF_6 (hexafluoreto de enxofre) ao norte de Copenhagen. Esse é um experimento de fonte alta e fortemente convectivo.

O traçador foi abandonado sem empuxo a partir de uma torre com altura de 115 m, sendo coletado ao nível do solo $(z = 0)$, em unidades de amostragem localizadas em três arcos perpendiculares ao vento médio. As unidades de amostragem foram posicionadas a uma distância entre 2 a 6 km, a partir do ponto onde ocorreu a liberação do poluente, cujo domínio é 6 km de distância da fonte).

As liberações de SF_6 começaram uma hora antes do início da amostragem e o tempo médio das medidas foi de 1 h e suas imprecisões são de 10 %. O local era principalmente residencial, com um comprimento de rugosidade de $z_0 = 0,6$ m (é a altura em que o vento é zero).

A tabela 1 mostra os dados micrometeorológicos dos experimentos de dispersão

na CLC de Copenhagen.

Tabela 1: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Copenhagen (GRYNING, 1981) (GRYNING; LYCK, 1984)

Experimento	$\bar{u}(m.s^{-1})^1$	$\bar{u}(m.s^{-1})^2$	u_*	L	w_*	h
1	$3,40$	$2,10$	$0,36$	-37	$1,80$	1980
2	$10,60$	$4,90$	$0,73$	-292	$1,80$	1920
3	$5,00$	$2,40$	$0,38$	-71	$1,30$	1120
4	$4,60$	$2,50$	$0,38$	-133	$0,70$	390
5	$6,70$	$3,10$	$4,50$	-444	$0,70$	820
6	$13,20$	$7,20$	$1,05$	-432	$2,00$	1300
7	$7,60$	$4,10$	$0,64$	-104	$2,20$	1850
8	$9,40$	$4,20$	$0,69$	-56	$2,20$	810
9	$10,50$	$5,10$	$0,75$	-289	$1,90$	2090

[1]Altura de 115 m.

[2]Altura de 10 m.

Na tabela 1, u é a velocidade do vento médio (m/s), que foi medido em 10 e 115m de altura, u_* representa a velocidade de fricção (m/s), L é o comprimento de *Monin-Obukhov* (m), w_* é a escala de velocidade convectiva vertical (m/s), H_s é a altura da fonte (m) e h é a altura (m) da Camada limite convectiva. Estes dados micrometeorológicos são médias horárias.

No estudo do problema dependente do tempo, são utilizados dados com uma resolução temporal maior. Particularmente, medidas médias de 20 min das concentrações e valores médios de 10 min para os dados micrometeorológicos. Maiores detalhes sobre os dados do experimento transiente podem ser vistos no trabalho de (TIRABASSI; RIZZA, 1992). Como na literatura não constam os dados de 10 em 10 min de u_* e L para o experimento 6, este foi desconsiderado. Para calcular w_* a relação $w_*/u_* = (-h/kL)^{1/3}$ foi usada, na qual k é a constante de *von-Kármán*. Os dados são apresentados nas tabelas 2 e 3.

Tabela 2: Velocidade de fricção u_* em (m/s) para diferentes passos de tempo nos experimentos de Copenhagen com todos os passos correspondentes a 10 min

Passo de tempo	$exp.1$	$exp.2$	$exp.3$	$exp.4$	$exp.5$	$exp.7$	$exp.8$	$exp.9$
1 $(10min.)$	$0,36$	$0,68$	$0,46$	$0,56$	$0,58$	$0,48$	$0,65$	$0,72$
2 $(20min.)$	$0,37$	$0,67$	$0,45$	$0,51$	$0,57$	$0,67$	$0,79$	$0,73$
3 $(30min.)$	$0,40$	$0,81$	$0,47$	$0,37$	$0,51$	$0,57$	$0,67$	$0,60$
4 $(40min.)$	$0,43$	$0,68$	$0,39$	$0,44$	$0,58$	$0,62$	$0,67$	$0,59$
5 $(50min.)$	$0,35$	$0,75$	$0,39$	$0,48$	$0,59$	$0,53$	$0,68$	$0,65$
6 $(60min.)$	$0,34$	$0,74$	$0,40$	$0,48$	$0,52$	$0,65$	$0,65$	$0,71$
7 $(70min.)$	$0,42$	$0,76$	$0,40$	$0,39$	$0,52$	$0,63$	$0,68$	$0,73$
8 $(80min.)$	$0,43$	$0,82$	$0,41$	$0,40$	$0,45$	$0,65$	$0,67$	$0,73$
9 $(90min.)$	$0,40$	$0,76$	$0,31$	$0,39$	$0,44$	$0,66$	$0,73$	$0,73$
10 $(100min.)$	$0,37$	$0,73$	$0,34$	$0,39$	$0,44$	$0,62$	$0,73$	$0,66$
11 $(110min.)$	$0,35$	$0,69$	$0,39$	$0,39$	$0,44$	$0,52$	$0,75$	$0,67$
12 $(120min.)$	$0,36$	$0,66$	$0,40$	$0,39$	$0,43$	$0,62$	$0,69$	$0,74$

Tabela 3: Comprimento de *Monin-Obukhov* L em (m) para diferentes passos de tempo nos 8 experimentos de Copenhagen, com todos os passos correspondentes a 10 min

Passo de tempo	$exp.1$	$exp.2$	$exp.3$	$exp.4$	$exp.5$	$exp7$	$exp.8$	$exp.9$
1 $(10min.)$	-26	-178	-152	-75	-492	-71	-71	-793
2 $(20min.)$	-23	-227	-194	-42	-215	-80	-85	-471
3 $(30min.)$	-83	-311	-106	-23	-368	-64	-47	-202
4 $(40min.)$	-42	-160	-101	-32	-735	-111	-49	-366
5 $(50min.)$	-36	-203	-129	-71	-366	-177	-45	-633
6 $(60min.)$	-42	-286	-70	-80	-273	-67	-63	-13588
7 $(70min.)$	-47	-155	-83	-83	-273	-87	-41	-593
8 $(80min.)$	-38	-228	-60	-101	-262	-71	-47	-471
9 $(90min.)$	-83	-184	-106	-129	-395	-56	-70	-389
10 $(100min.)$	-21	-389	-42	-129	-395	-111	-64	-375
11 $(110min.)$	-32	-133	-101	-129	-395	-215	-52	-262
12 $(120min.)$	-29	-375	-70	-129	-759	-123	-39	-252

3.1.2 O experimento de Hanford

O experimento de Hanford ocorreu no período de maio a junho de 1983 e é conhecido como experimento difusivo de Hanford. O experimento foi feito em uma região semi-árida de sul a leste do estado de Washington nos EUA, em um terreno geralmente plano. Pode-se consultar a descrição detalhada de tal experimento em (DORAN; HORST, 1985).

É um experimento de fonte baixa em condições estáveis a quase-neutras. Foram feitos 6 experimentos e em cada experimento o tempo de liberação foi em torno de 30 minutos exceto no experimento 5 que foi de 22 minutos. Os coletores foram posicionados em círculos concêntricos com uma distância angular de 8^0, 4^0, 4^0 , 2^0 e 3^0 com raio de 100, 200, 800, 1600 e $3200\ m$ respectivamente, ou seja, com domínio de $3200\ m$ de distância da fonte.

A velocidade de deposição foi avaliada somente para as três últimas distâncias. Dois poluentes, um que deposita (SF_6) e um que não deposita (ZnS), foram liberados simultaneamente de uma altura de $2\ m$, A taxa de liberação média foi de $0,3\ g/s$. A separação lateral entre os pontos de liberação do SF_6 e do ZnS foi menor do que $1\ m$.

Os dados micrometeorológicos foram conseguidos tomando medidas nas alturas de 1, 2, 4, 8, 16 e $32\ m$ em uma torre de $122\ m$ localizada aproximadamente a $100\ m$ para o norte do ponto de liberação (DORAN; HORST, 1985). Os valores dos parâmetros da CLP são dados na tabela 4 e os dados micrometerológicos e do poluente para os seis experimentos de Hanford estão dispostos na tabela 5. A rugosidade do terreno era de $3\ cm$.

Tabela 4: Parâmetros micrometeorológicos do experimento de Hanford (DORAN; HORST, 1985)

Experimento	$\bar{u}(2m)(ms^{-1})$	$u_*(ms^{-1})$	$L(m)$	$h(m)$
1	$3,63$	$0,40$	166	325
2	$1,42$	$0,26$	44	135
3	$2,02$	$0,27$	77	182
4	$1,50$	$0,20$	34	104
5	$1,41$	$0,26$	59	157
6	$1,54$	$0,30$	71	185

Tabela 5: Dados micrometerológicos e do poluente para os seis experimentos de Hanford. Dados do poluente são normalizados pela taxa de emissão Q. Índice d refere-se ao material que deposita e índice nd refere-se ao material que não deposita

Exp.	Arc (m)	Z_nS/Q $s.m^{-2}$	SF_6/Q $s.m^{-2}$	$\bar{u}(0,53\sigma_z)$ (m)	σ_z $m.s^{-1}$	V_g $cm.s^{-1}$
1	800	$0,00224$	$0,00373$	$7,61$	28	$4,21$
	1600	$0,00098$	$0,00214$	$8,53$	$43,4$	$4,05$
	3200	$0,00059$	$0,00130$	$9,43$	65	$3,65$
2	800	$0,00747$	$0,0129$	$3,23$	19	$1,93$
	1600	$0,0325$	$0,00908$	$3,59$	$24,3$	$1,80$
	3200	$0,00231$	$0,00722$	$3,83$	$28,7$	$1,74$
3	800	$0,00306$	$0,00591$	$4,74$	$28,4$	$3,14$
	1600	$0,00132$	$0,00331$	$5,40$	$44,6$	$3,02$
	3200	$0,00066$	$0,00179$	$6,32$	$70,5$	$2,84$
4	800	$0,00804$	$0,0201$	$3,00$	$13,0$	$1,75$
	1600	$0,00426$	$0,0131$	$3,39$	$17,8$	$1,62$
	3200	$0,00314$	$0,00915$	$3,75$	$23,1$	$1,31$
5	800	$0,00525$	$0,0105$	$3,07$	$24,6$	$1,56$
	1600	$0,00338$	$0,00861$	$3,24$	$28,5$	$1,47$
	3200	$0,00292$	$0,00664$	$3,46$	$34,6$	$1,14$
6	800	$0,00723$	$0,0134$	$3,17$	$18,6$	$1,17$
	1600	$0,00252$	$0,0615$	$3,80$	$34,1$	$1,15$
	3200	$0,00125$	$0,00311$	$4,37$	$58,7$	$1,10$

Para calcular a altura de camada limite estável, a relação $h = 0,4(u_*L/f_c)^{(1/2)}$ (ZILITINKEVICH, 1972) foi utilizada, na qual f_c representa o parâmetro de Coriolis: $f_c = 1,46.10^{(-4)}$.

3.1.3 O experimento de Kinkaid

No experimento de Kinkaid, em Illinois nos USA, foi levado em consideração o empuxo, relativo somente a condições convectivas para $-h/L > 10$, o qual foi descrito em (HANNA; PAINE, 1989).

O experimento de Kinkaid consistiu-se de uma liberação elevada de SF_6 em um terreno plano com alguns lagos. A liberação foi de uma fonte de altura de 187 m e medido em uma rede com aproximadamente 200 amostradores posicionados em arcos de $0,5$ a 50 km da fonte, ou seja, com um domínio de 50 km da fonte.

As concentrações máximas foram observadas ao nível do solo, e o nível de concentração medida é frequentemente irregular, isto é, com altos e baixos níveis de concentração de ocorrência intermitante ao longo do mesmo arco, além de haverem lacunas frequentes nos arcos de monitoramento. Devido a esses fatores, uma variável tem sido escolhida como um fator de qualidade para indicar o grau de legibilidade dos dados. Esse indicador de qualidade com valores de 0 a 3 tem sido escolhido de acordo

com (OLESEN; LARSEN; HOJSTRUP, 1984). Considerou-se apenas os dados com fator de qualidade 3.

Os parâmetros do conjunto de dados inclui os parâmetros micrometeorológicos como velocidade de fricção, comprimento de *Monin-Obukhov* e altura da camada limite que podem ser observados na tabela 6. O comprimento de rugosidade foi de aproximadamente 10 cm.

Tabela 6: Parâmetros micrometeorológicos para o experimento de Kinkaid (HANNA; PAINE, 1989), T_a é a temperatura ambiente, T_i é a temperatura da pluma na saída da fonte e V_i é a velocidade vertical da pluma na saída da chaminé

Experimento	$L\ (m)$	$h\ (m)$	$u_*\ (ms^{-1})$	$w_*\ (ms^{-1})$	$T_a\ (K)$	$T_i\ (K)$	$V_i\ (ms^{-1})$	$Q\ (gs^{-1})$
1	$-8,60$	2076	$0,30$	$2,65$	$298,40$	416	$14,60$	$10,20$
2	$-11,20$	2092	$0,31$	$2,53$	$298,40$	416	$14,60$	$8,20$
3	$-3,90$	893	$0,22$	$1,95$	$284,20$	432	$29,60$	$11,20$
4	$-4,80$	1032	$0,22$	$1,95$	$285,20$	432	$29,20$	$11,20$
5	$-10,40$	1175	$0,28$	$2,05$	$286,20$	432	$29,60$	$11,30$
6	$-6,30$	1355	$0,25$	$2,19$	$286,60$	432	$29,90$	$11,10$
7	$-23,50$	1300	$0,37$	$2,17$	$290,80$	441	$27,90$	$11,50$
8	$-40,30$	1743	$0,34$	$1,68$	$291,30$	442	$27,10$	$11,80$
9	$-63,50$	1840	$0,29$	$1,24$	$291,60$	445	$27,30$	$12,20$
10	$-8,60$	850	$0,30$	$1,52$	$296,60$	453	$28,50$	$11,20$
11	$-6,60$	1447	$0,28$	$2,31$	$297,60$	456	$31,80$	$11,20$
12	$-35,40$	1223	$0,50$	$2,33$	$299,90$	440	$18,00$	$11,00$
13	$-58,50$	2069	$0,57$	$2,66$	$300,40$	441	$18,00$	$11,00$
14	$-24,40$	950	$0,40$	$1,79$	$285,00$	436	$16,60$	$16,20$
15	$-33,30$	1253	$0,46$	$1,99$	$286,10$	438	$16,90$	$12,00$
16	$-27,00$	1548	$0,44$	$2,12$	$287,50$	434	$17,90$	$11,10$
17	$-28,60$	2250	$0,46$	$2,30$	$288,50$	433	$18,70$	$10,80$
18	$-41,30$	2450	$0,52$	$2,35$	$289,50$	431	$17,60$	$10,80$
19	$-51,40$	2506	$0,53$	$2,29$	$289,80$	431	$15,70$	$10,80$
20	$-67,80$	2528	$0,52$	$2,08$	$290,10$	436	$14,20$	$11,60$
21	$-14,30$	1700	$0,37$	$2,43$	$290,90$	420	$17,30$	$12,10$
22	$-6,00$	1750	$0,29$	$2,56$	$290,40$	423	$18,90$	$12,00$
23	$-41,30$	1776	$0,56$	$2,60$	$290,90$	426	$18,30$	$11,50$
24	$-29,60$	1800	$0,47$	$2,60$	$292,60$	426	$18,80$	$11,10$
25	$-20,60$	1950	$0,39$	$2,46$	$291,40$	395	$21,70$	$10,60$
26	$-18,70$	1131	$0,41$	$2,69$	$298,00$	421	$21,10$	$12,90$
27	$-42,10$	2252	$0,47$	$2,53$	$299,90$	435	$29,80$	$13,10$
28	$-67,60$	2676	$0,51$	$2,37$	$300,00$	436	$31,80$	$13,20$
29	$-5,20$	1725	$0,30$	$3,09$	$299,60$	434	$37,30$	$13,50$
30	$-4,30$	1750	$0,26$	$2,91$	$299,80$	434	$39,30$	$13,70$
31	$-5,40$	1750	$0,25$	$2,61$	$299,90$	434	$38,20$	$13,90$
32	$-8,00$	1450	$0,32$	$2,61$	$302,20$	435	$19,80$	$19,80$
33	$-11,20$	1450	$0,33$	$2,46$	$302,40$	435	$20,00$	$20,00$
34	$-18,30$	1483	$0,34$	$2,21$	$302,30$	436	$19,50$	$19,50$
35	$-18,50$	1505	$0,26$	$1,68$	$301,50$	436	$18,60$	$18,60$
36	$-45,10$	1014	$0,52$	$2,11$	$292,30$	397	$16,70$	$16,70$
37	$-35,80$	1462	$0,54$	$2,98$	$293,00$	397	$16,40$	$16,40$
38	$-42,30$	2274	$0,55$	$2,95$	$293,50$	390	$16,20$	$16,20$
39	$-86,10$	1376	$0,63$	$2,45$	$297,40$	390	$18,50$	$18,50$
40	$-108,00$	1455	$0,62$	$2,25$	$297,20$	395	$18,60$	$18,60$
41	$-131,00$	1539	$0,66$	$2,30$	$297,10$	398	$19,10$	$19,10$
42	$-191,00$	1594	$0,61$	$1,91$	$296,90$	398	$18,50$	$18,50$
43	$-6,40$	1124	$0,28$	$2,51$	$296,80$	427	$13,00$	$13,00$
44	$-8,30$	1250	$0,31$	$2,62$	$297,70$	428	$13,20$	$13,20$
45	$-10,60$	1353	$0,32$	$2,55$	$298,50$	428	$12,70$	$12,70$
46	$-9,20$	1635	$0,30$	$2,54$	$299,00$	428	$12,10$	$12,10$
47	$-11,60$	1721	$0,29$	$2,40$	$299,40$	428	$12,20$	$12,20$
48	$-21,20$	1794	$0,32$	$2,14$	$299,40$	428	$12,50$	$12,50$
49	$-67,50$	1851	$0,34$	$1,55$	$299,30$	427	$12,70$	$12,70$
50	$-81,20$	952	$0,67$	$2,47$	$299,70$	431	$12,60$	$12,60$
51	$-85,60$	1222	$0,68$	$2,59$	$300,30$	431	$12,70$	$12,70$
52	$-59,20$	1300	$0,60$	$2,69$	$301,10$	432	$12,90$	$12,90$
53	$-113,00$	1360	$0,68$	$2,55$	$301,10$	432	$12,50$	$12,50$

3.1.4 Coeficiente de difusão

No estudo de problemas de difusão atmosférica, a escolha de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para modelar a dispersão de poluentes. A partir de um ponto de vista físico, uma parametrização da turbulência é uma aproximações da natureza no sentido que os modelos matemáticos recebem uma relações aproximada que substitui um termo desconhecido. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente da maneira como os parâmetros são calculados e relacionados ao entendimento da Camada limite planetária (MANGIA et al., 2002).

São variadas as formulações para o coeficiente de difusão turbulento vertical encontrados na literatura (ULKE, 2000). Os coeficientes de difusão dependentes somente da turbulência, utilizados neste trabalho, são apresentados a seguir.

Condições instáveis $(L \leq 0)$ (MANGIA et al., 2002):

$$K_z = 0,22 w_* h \left(\frac{z}{h}\right)^{1/3} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{1/3} \left[1 - e^{\frac{-4z}{h}} - 0,0003 e^{\frac{8z}{h}}\right], \tag{31}$$

em que h é a altura da CLC.

Condições estáveis $(L \geq 0)$ (DEGRAZIA et al., 2000):

$$K_z = \frac{0,3(1 - z/h) u_* z}{1 + 3,7(z/\Lambda)}, \tag{32}$$

no qual h é a altura da CLE e $\Lambda = L(1 - z/h)^{5/4}$,

Para que se possa calcular a concentração de poluentes atmosféricos ao nível do do solo os coeficientes de difusão são introduzidos nos modelos.

Para calcular a concentração tridimensional do poluente no cenário GILTTG é necessário o parâmetro de dispersão lateral. Para calcular a concentração máxima no nível do solo $C(x, 0, 0)$ usa-se a seguinte fórmula:

$$\bar{c}(x, y, z) = c(x, z) \frac{e^{(-y^2/2\sigma_y^2)}}{\sqrt{2\pi}\sigma_y}. \tag{33}$$

As fórmulas usadas para calcular σ_y na presente dissertação foram:

Condições instáveis (DEGRAZIA; MANGIA; RIZZA, 1998):

$$\frac{\sigma_y^2}{h^2} = \frac{0,21}{\pi} \int_0^\infty sen^2(2,26\psi^{1/3} X^* n') \frac{dn'}{(1+n')^{5/3} n'^2}, \tag{34}$$

onde $X^* = xw_*/\bar{u}h$ é a distância adimensional, h é a altura da CLC e w_* é a escala de velocidade convectiva. A integral da equação (34) é resolvida fazendo-se uma mudança de variáveis no intervalo $[-1, 1]$ e toda a equação (34) contém a função de dissipação molecular ψ expressa em (HOJSTRUP, 1982) por:

$$\psi^{1/3} = \left[\left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2}, \tag{35}$$

onde L é o comprimento de *Monin-Obukhov* definido na camada limite superficial.

Condições estáveis (CIRILLO; POLI, 1992):

A equação usada para relacionar σ_y a σ_θ (raiz quadrada do valor médio da direção horizontal do vento) foi proposto por (CIRILLO; POLI, 1992) e é dada por:

$$\sigma_y = x[senh(\sigma_\theta^2)]^{1/2}. \tag{36}$$

3.1.5 Perfil de vento

A dispersão de poluentes na atmosfera ocorre de forma muito dependente da intensidade e da direção do escoamento atmosférico onde tais poluentes estão inseridos.

A intensidade do vento é o fator que fornece a informação sobre a extensão da área de alcance da poluição e sua direção, além das possíveis regiões afetadas por ela. Para a obtenção de soluções mais confiáveis para um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos, informações relevantes sobre a distribuição do vento na CLA são necessárias. São muitos os fatores que inluenciam a intensidade e a direção do vento e a sua variação com a altura na CLA, dentre os quais podemos citar a rugosidade da superfície, o ciclo de aquecimento e resfriamento diurno, a profundidade da CLA, a rotação da terra, a presença de nuvens e o regime de precipitação (ARYA, 2001).

O perfil do vento é obtido através de uma análise de escala e utilizando o método de perturbação singular (VAN DYKE, 1964). Tal parametrização estabelece que existe uma camada onde a escala de comprimento escolhida para representar os processos físicos da região próxima à superfície, ou seja, $(z = z_0)$ é tão grande que os efeitos de z_0, isto é, do comprimento de rugosidade são desprezíeis, enquanto a escala de comprimento escolhida para representar os processos distantes da superfície (z_f/u_*), onde f é o parâmetro de coriolis, é tão pequena que os efeitos de f devem ser ignorados, o cisalhamento do vento pode depender somente da fricção e da altura z

(WYNGAARD, 1981).

Uma das formas clássicas para obtenção do perfil logarítmico do vento na CLS é a teoria de similaridade que foi obtida a partir de idealizações de situações que raramente acontecem na atmosfera real. Para a atmosfera não neutra, essa teoria deve ser generalizada, afim de inserir os efeitos do aquecimento na superfície (TENNEKES; BLACKADAR, 1968). O comprimento de *Monin-Obukhov* depende diretamente do fluxo de calor na superfície, e por esta razão sofre mudanças ao longo do dia, bem como a velocidade de fricção.

As equações usadas pelo modelo para calcular o vento médio são as de similaridade (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

$$\bar{u} = \frac{u_*}{k}\left[ln\frac{z-d}{z_0} - \psi_m\frac{z-d}{L}\right], \;\; z \leq z_b, \tag{37}$$

$$\bar{u} = \bar{u}(z_b), \;\; z > z_b, \tag{38}$$

onde $z_b = min[\mid L \mid, 0,1h]$, k é a constante de von-Kármán $(k \cong 0,4)$, z_0 é a rugosidade do terreno, o deslocamento do plano zero (d(m)) é uma altura acima da superfície em que a velocidade do vento é nula e uma consequência do escoamento sobre obstáculos (árvores ou construções, por exemplo), desconsiderado nesta dissertação $(d = 0)$. A função estabilidade ψ_m é expressa em termos das relações de Businger:

$$\psi_m = -4,7\frac{z}{L}, \;\; 1/L \geq 0 \tag{39}$$

$$\psi_m = ln\left(\frac{(1+x^2)}{2}\right) + ln\left(\frac{(1+x)^2}{2}\right) - 2arctang\;\; x + \frac{\pi}{2}, \;\; \frac{1}{L} < 0 \tag{40}$$

com $x = \left(1 - 15\frac{z}{L}\right)^{1/4}$.

A velocidade do perfil de vento pode ser descrita de forma alternativa, por uma lei de potência como (PANOFSKY; DUTTON, 1984).

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^{\alpha}, \tag{41}$$

sendo u e u_1 as velocidades médias horizontais do vento nas alturas z e z_1 e α é um expoente relacionado com a intensidade da turbulência (IRWIN, 1979).

3.1.6 Ascensão da pluma

Em muitas aplicações, assim como em emissões industriais, é necessário levar em conta o efeito do empuxo sobre a pluma de poluentes. Quando a pluma de poluentes é mais quente que o ambiente, ou seja, menos densa, ela tende a se elevar até uma camada onde se encontre em equilíbrio termodinâmico, a altura efetiva da fonte (H_e)

será a soma da altura real da fonte (H_s) e o efeito de ascensão da pluma (δH). Dessa forma assumimos que, a uma certa distância da fonte, a pluma de material liberado em H_s se comporta como uma pluma de mesma densidade que o ambiente, abandonada sem empuxo a uma altura H_e (ARYA, 1999).

Em casos de convecção forte ($h/|L| > 10$), a pluma terá uma ascensão final dada por:

$$\Delta H = 4.3 \left(\frac{F}{\bar{u} w_*} \right)^{3/5} h^{2/5}, \tag{42}$$

onde F é um parâmetro de flutuabilidade definido como:

$$F = g V_i r_i^2 \frac{(T_i - T_a)}{T_i}, \tag{43}$$

sendo g é a aceleração da gravidade, T_i, V_i, r_i e T_a são a temperatura da fonte, a velocidade vertical de saída, raio da fonte e temperatura ambiente (BRIGGS, 1975). Para condições moderadamente convectivas a ascensão da pluma é dada como:

$$\Delta H = \left(\frac{F}{\bar{u} w_d^2} \right)^{3/5} \left(1 + \frac{2H_s}{\Delta H} \right)^2, \tag{44}$$

que pode ser resolvida interativamente, onde $w_d = 0,4 w_*$ é a velocidade média dos *downdrafts* (correntes de ar descendentes). Para condições de estabilidade neutra temos a expressão para ΔH:

$$\Delta H = 1,3 \frac{F}{\bar{u} w_*^2}^{3/5} \left(1 + \frac{H_s}{\Delta H} \right)^{2/3}. \tag{45}$$

(WEIL; BROWER, 1984) sugere que uma pluma tem a seguinte restrição para sua ascensão:

$$\Delta H = 0,62(h - H_s). \tag{46}$$

Considerando o que foi exposto acima, (BRIGGS, 1975) sugere que o valor final de ΔH deve ser o valor mínimo obtido com as equações (43), (44) e (45). Esta sugestão é a mais prudente, pois na medida em que o efeito de ascensão é maior, menores são os valores de concentração obtidos para níveis próximos do solo, diminuindo o risco de subestimar o valor destas concentrações.

3.2 Análises estatísticas e comparações por estimadores estatísticos entre dados observados e preditos

Na Estatística Descritiva utilizam-se estimadores, para uma amostra utilizada para estimar parâmetros da população.

O uso dos estimadores estatísticos é necessário, pois através deles é possível comparar as concentrações de poluentes observadas nos experimentos e as concentrações preditas pelo modelo GILTT. Dentre as medidas de posição podemos citar a média, a mediana e a moda e, dentre as medidas de dispersão podemos citar a variância, o desvio padrão e o coeficiente de variação, lembrando que esse último descreve a razão do desvio padrão pela média em termos percentuais. Quanto às separatrizes, estas são descritas pelos quartis, que dividem o conjunto de dados em quatro partes tais que o primeiro quartil é o valor que indica que 25% dos valores são menores que ele, o segundo quartil é o valor que indica duas partes iguais a 50% dos valores acima ou abaixo do mesmo, já o terceiro quartil é o valor que indica que 25% dos valores são maiores que ele (CORREA, 2003; COSTA, 2015).

A fórmula destinada a estimar um parâmetro é chamada de estimador. Dada uma amostra, o valor assumido pelo estimador é chamado de estimativa ou valor estimado do parâmetro. As estimativas obtidas por esta fórmula variam de acordo com a amostra selecionada, tanto nos valores quanto no tamanho.

A diferença entre estatística e estimativa é que a estatística é uma variável aleatória, e a estimativa é um particular valor dessa variável aleatória.

Os parâmetros são em geral desconhecidos porque, na prática, não é possível observar toda a população (CORREA, 2003; SILVA, 2004). Como exemplo de estimadores temos a média populacional, mediana, moda, quartis, variância, desvio padrão e coeficiente de variação (CORREA, 2003; SILVA, 2004). Outros índices estatísticos avaliados neste trabalho, dados por Hanna e Panofsky (HANNA; PAINE, 1989; PANOFSKY; DUTTON, 1984) que são: NMSE, r, FA2 , FB, FS, MG, VG, NMSE$_{min}$, NSD e NRMSE(Raiz quadrada do erro quadrático médio). Tais estimadores são descritos por:

- **Erro quadrático médio normalizado (NMSE):** informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas, É uma estatística adimensional, e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo,

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}. \tag{47}$$

- **Coeficiente de correlação (r):**(HANNA; PAINE, 1989; PANOFSKY; DUTTON, 1984)

$$r = \frac{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}{\sigma_o \sigma_p}. \tag{48}$$

O valor do coeficiente de correlação r tem a variação entre -1 e $+1$, ou seja, está limitado entre os valores do intervalo $[-1, +1]$ (CORREA, 2003).

- **Fator de dois (FA2):** fração de dados ($\%$ normalizados a 1) que estão entre $0,5$ e 2. Quanto mais próximo de 1 este valor estiver, maior é a confiabilidade no modelo.

$$FA2 = 0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2. \tag{49}$$

- **Fração de Inclinação (FB):** informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas, O valor ótimo é zero.

$$FB = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0,5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)}. \tag{50}$$

- **Desvio fracional padrão (FS):** Fornece informações sobre a disseminação das concentrações. O valor ótimo é zero.

$$FS = \frac{\widehat{\sigma}_o - \widehat{\sigma}_p}{0,5(\widehat{\sigma}_o + \widehat{\sigma}_p)}. \tag{51}$$

- **Média geométrica (MG):** indica erros sistemáticos, referindo-se a razão entre dados previstos e dados observados, cujo valor ideal é 1.

$$MG = exp\left(\overline{lnC_o} - \overline{lnC_p}\right). \tag{52}$$

- **Variância geométrica (VG):** expressa a dispersão em uma distribuiição log-normal, sendo uma medida de média relativa, refletindo erros sistemáticos e aleatórios. O valor ideal é 1.

$$VG = exp\overline{(lnC_o - lnC_p)^2}. \tag{53}$$

- **Erro quadrático médio mínimo (NMSE$_{min}$):** informa sobre todos os desvios entre as concentrações preditas e as concentrações observadas e esse é mais preciso que o estimador NMSE.

$$NMSE_{min} = \frac{4FB^2}{4 - FB^2}. \tag{54}$$

- **Desvio padrão normalizado (NSD):**

$$NSD = \frac{\sigma C_p}{\sigma C_o}. \tag{55}$$

- **Raiz quadrada do erro quadrático médio (NRMSE):**

$$NRMSE = \frac{\sqrt{((C_p - \bar{C}_p) - (C_o - \bar{C}_o))^2}}{\sigma C_o}. \tag{56}$$

- **Assimetria:** As medidas de assimetria referem-se à forma da curva de uma distribuição de frequência, mais especificamente do polígono de frequência ou do histograma (CORREA, 2003), (SILVA, 2004). Denomina-se assimetria o grau de afastamento de uma distribuição da unidade de simetria.

- **Curtose:** A medida de curtose é o grau de achatamento (ou afilamento) de uma distribuição em comparação com uma distribuição padrão. De acordo com o grau de curtose, classificamos três tipos de curvas de frequência (SILVA, 2004) 9:

  – Mesocúrtica: é uma curva básica de referência chamada curva padrão ou curva normal, como na figura.

  – Platicúrtica: é uma curva mais achatada (ou mais aberta) que a curva normal, como na figura.

  – Leptocúrtica: é uma curva mais afilada que a curva normal, como na figura.

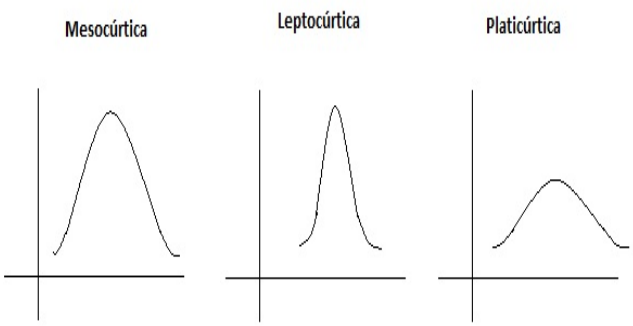


Figura 9: Gráficos de curtose.

Em muitas situações, torna-se interessante e útil estabelecer uma relação entre duas variáveis. A matemática estabelece vários tipos de relações entre duas variáveis aleatórias, no estudo estatístico, a relação entre duas ou mais variáveis denomina-se correlação e a importância das correlações entre duas variáveis podem conduzir à

descoberta de novos métodos, cujas estimativas são vitais em tomadas de decisões (CORREA, 2003), (SILVA, 2004).

A configuração geométrica do diagrama de dispersão pode estar associada a uma linha reta, chamada de correlação linear que é uma correlação entre duas variáveis, cujo gráfico aproxima-se de uma linha. Essa é uma linha de tendência, porque procura acompanhar a tendência da distribuição de pontos. Por outro lado, é também uma linha média, porque procura deixar a mesma quantidade de pontos abaixo e acima da linha (CORREA, 2003), (SILVA, 2004).

- **Equação linear:** O gráfico cartesiano que representa essa linha é denominado diagrama de dispersão. Para poder avaliar melhor a correlação entre as variáveis, é interessante obter a equação da reta que é chamada de reta de regressão e a equação que a representa é chamada de equação de regressão. O diagrama de dispersão é construído de acordo com os dados amostrais de n observações e a equação de regressão é dada pela expressão (CORREA, 2003), (SILVA, 2004):

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x \ldots + \beta_n x \ldots + \epsilon, \tag{57}$$

  onde β_0 é o *intercept*, $\beta_1 x$ é o coeficiente angular e ϵ é o resíduo ou desvio.

4 ANÁLISES E COMPARAÇÕES ESTATÍSTICAS

Neste trabalho foi feita uma revisão e o desenvolvimento das equações de advecção-difusão. Foram estudados os casos da equação de advecção-difusão bidimensional estacionária com deposição de poluentes e sem deposição de poluentes, bidimensional transiente, com deposição de poluentes e sem deposição de poluentes e tridimensional. Em seguida, foram feitas simulações utilizando os dados dos experimentos de Copenhagen, Hanford e Kinkaid, e os resultados numéricos foram descritos através de tabelas e gráficos e comparados por estimadores estatísticos. Foram usados nas simulações o software Fortran e para calcular os estimadores estatísticos foram utilizados o Excel e o software SAS. O computador utilizado foi um Dell Vostro 1320 com processador Intel(R)Core(TM) Duo CPU T6750 2.1GHz, com memória RAM 4.0GB e sistema operacional Windows 7 de 64-bit.

A partir dos dados obtidos, além da predição pelo método GILTT, foram realizadas análises das concentrações observadas e preditas dos três experimentos (Copenhagen, Hanford e Kinkaid), através de estimadores estatísticos tais como: erro quadrático médio normalizado (NMSE), coeficiente de correlação (r), desvio fracional padrão (FB), fração de inclinação (FS), sendo que novos índices foram incorporados, os quais ainda não haviam sido utilizados para tais experimentos, como média geométrica (MG), variância geométrica (VG), raiz normalizada do erro quadrático médio (NRSME), erro quadrático médio mínimo (NMSE_{min})), desvio padrão normalizado (NSD), falso-negativo (FBfn), falso-positivo (FBfp), além de média, mediana, variância, desvio padrão, separatrizes (primeiro quartil e terceiro quartil). Foi realizada ainda a análise estatística com base na análise da variância dos resíduos entre os valores observados e preditos pelo método, além de representações através de gráficos de regressão, gráficos de dispersão, gráficos *box plot* e tabelas.

4.1 Resultados utilizando o experimento de Copenhagen

Os resultados foram gerados através da equação de advecção-difusão do tipo: bidimensional estacionário, bidimensional transiente, tridimensional considerando

uma Gaussiana na direção transversal e, tridimensional, utilizando os dados das concentrações observadas do experimento de Copenhagen (GRYNING; LYCK, 1984; GRYNING et al., 1987).

Os dados das concentrações observadas e as concentrações preditas pelo método GILTT no experimento de Copenhagen estão dispostos na tabela 7. Foram utilizados os seguintes dados: de concentração integrados lateralmente para a equação bidimensional estacionária (aqui denominado GILTT-1), para a equação bidimensional transiente (aqui denominado GILTT-2), tridimensionais para a equação tridimensional estacionária que aqui é resolvida assumindo-se que em y tem-se uma distribuição Gaussiana da pluma como em (MOREIRA et al., 2009a)(aqui denominado GILTT-3) e dados tridimensionais (aqui denominado GILTT-4).

Tabela 7: Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-2})$ e $(.10^{-4}sm^{-3})$, onde C_{p_1}, C_{p_2}, C_{p_3} e C_{p_4}, representam as concentrações preditas pelos modelos e C_{o_1}, C_{o_2}, C_{o_3} e C_{o_4} representam as concentrações observadas experimentalmente, sendo (g/m^2) a unidade de medida da concentração nos cenários bidimensionais e (g/m^3) a unidade de medida da concentração nos cenários tridimensionais

		Dados GILTT-1		Dados GILTT-2		Dados GILTT-3		Dados GILTT-4	
Exp.	Dist (m)	C_{o_1}	C_{p_1}	C_{o_2}	C_{p_2}	C_{o_3}	C_{p_3}	C_{o_4}	C_{p_4}
1	1900	$6,48$	$6,84$	$6,48$	$5,53$	$10,50$	$4,53$	$10,50$	$12,22$
	3700	$2,31$	$3,97$	$2,31$	$3,40$	$2,14$	$1,70$	$2,14$	$4,25$
2	2100	$5,38$	$4,65$	$5,38$	$3,46$	$9,85$	$5,41$	$9,85$	$8,23$
	4200	$2,95$	$3,05$	$2,95$	$2,47$	$2,83$	$2,12$	$2,83$	$2,86$
3	1900	$8,20$	$8,14$	$8,20$	$7,47$	$16,33$	$8,83$	$16,33$	$16,49$
	3700	$6,22$	$5,19$	$6,22$	$4,78$	$7,95$	$3,68$	$7,95$	$5,66$
	5400	$4,30$	$3,98$	$4,30$	$3,77$	$3,76$	$2,26$	$3,76$	$3,29$
4	4000	$11,66$	$9,24$	$11,66$	$9,02$	$15,71$	$14,30$	$15,71$	$10,44$
5	2100	$6,72$	$8,58$	$6,72$	$8,98$	$12,11$	$17,69$	$12,11$	$16,24$
	4200	$5,84$	$6,71$	$5,84$	$6,31$	$7,24$	$8,55$	$7,24$	$7,09$
	6100	$4,97$	$5,39$	$4,97$	$5,04$	$4,75$	$5,43$	$4,75$	$3,96$
6	2000	$3,96$	$3,51$	$-$	$-$	$7,44$	$5,75$	$7,44$	$6,80$
	4200	$2,22$	$2,50$	$-$	$-$	$3,37$	$2,38$	$3,37$	$2,39$
	5900	$1,83$	$1,98$	$-$	$-$	$1,74$	$1,50$	$1,74$	$1,49$
7	2000	$6,70$	$4,67$	$6,70$	$3,53$	$9,48$	$4,25$	$9,48$	$8,66$
	4100	$3,25$	$2,76$	$2,25$	$2,37$	$2,62$	$1,53$	$2,62$	$2,67$
	5300	$2,23$	$2,23$	$2,23$	$1,95$	$1,15$	$1,05$	$1,15$	$1,70$
8	1900	$4,16$	$4,83$	$4,16$	$4,45$	$9,76$	$5,99$	$9,76$	$10,04$
	3600	$2,02$	$3,27$	$2,02$	$3,17$	$2,64$	$2,75$	$2,64$	$4,04$
	5300	$1,52$	$2,63$	$1,52$	$2,56$	$0,98$	$1,77$	$0,98$	$2,23$
9	2100	$4,58$	$4,45$	$4,58$	$3,18$	$8,52$	$5,02$	$8,52$	$7,83$
	4200	$3,11$	$2,91$	$3,11$	$2,29$	$2,66$	$1,95$	$2,66$	$2,72$
	6000	$2,59$	$2,19$	$2,59$	$1,80$	$1,98$	$1,15$	$1,98$	$1,47$

Tabela 8: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Copenhagen para os quatro cenários: GILTT-1, GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4

Estimadores	GILTT-1 (C_o)	GILTT-1 (C_p)	GILTT-2 (C_o)	GILTT-2 (C_p)	GILTT-3 (C_o)	GILTT-3 (C_p)	GILTT-4 (C_o)	GILTT-4 (C_p)
Média	$4,49$	$4,51$	$4,14$	$3,72$	$6,33^*$	$4,76^*$	$6,33$	$6,21$
Mediana	$4,16$	$3,98$	$4,44$	$3,50$	$4,75$	$3,68$	$4,75$	$4,25$
Coef. de var.(%)	$53,00$	$46,00$	$59,00$	$57,00$	$71,00$	$87,00$	$71,00$	$71,00$
Variância	$5,99$	$4,51$	$6,20$	$4,81$	$21,20$	$17,77$	$21,20$	$20,12$
Desvio Padrão	$2,39$	$2,08$	$2,43$	$2,14$	$4,50$	$4,12$	$4,50$	$4,39$
Simetria	$0,56$	$1,91$	$0,94$	$1,42$	$2,19$	$1,17$	$2,19$	$1,17$
Curtose	$-0,63$	$4,29$	$0,14$	$2,17$	$5,57$	$1,09$	$5,57$	$1,09$
Quartil 1	$3,27$	$2,31$	$2,56$	$2,31$	$2,38$	$2,14$	$2,38$	$2,14$
Quartil 3	$6,84$	$5,84$	$5,53$	$6,22$	$5,43$	$7,95$	$5,43$	$7,95$

*

$^+$

As estimativas relacionadas a média revelaram a partir do teste *t de Student* para os cenários GILTT-1, GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4, a existência ou inexistência de diferença entre os valores das concentrações observadas e das concentrações preditas. Nos cenários bidmensionais observou-se que não diferem significativamente, a 5% de probabilidade, as concentrações observadas das concentrações preditas pelo método GILTT, do poluente hexafluoreto de enxofre. No que se refere aos cenários tridimensionais, o cenário GILTT-4 não tem diferença significativa a 5% de probabilidade entre as concentrações observadas e preditas, para o cenário GILTT-3 apresentou diferença significativa a 5% de probabilidade entre as concentrações observadas e preditas do poluente.

A mediana nos quatro cenários serviu para caracterizar os conjuntos de dados das concentrações observadas e preditas pelo método, dando uma ideia melhor da distribuição das concentrações.

A caracterização indicada pelo primeiro quartil mostrou que as concentrações observadas no cenário GILTT-1 apresenta uma separatriz de valor superior ao do cenário GILTT-2 e que as concentrações preditas apresentam separatrizes de mesmo valor para os dois cenários bidimensionais. Nos cenários tridimensionais as separatrizes apresentam mesmo valor para as concentrações observadas e para as concentrações preditas.

Quanto a caracterização dada pelo terceiro quartil nos cenários bidimensionais, foi verificado que a separatriz no conjunto das concentrações observadas apresentam um valor inferior para o cenário GILTT-2 e um valor inferior para o cenário GILTT-1 no conjunto das concentrações preditas. Nos cenários tridimensionais os valores das separatrizes são os mesmos tanto para o conjunto das concentrações observadas quanto para o conjunto das concentrações preditas.

Verifica-se que nenhum dos cenários apresenta simetria, sendo que o cenário GILTT-1 possui uma assimetria positiva tanto para as concentrações observadas quanto para as concentrações preditas, já o cenário GILTT-2 possui uma assimetria negativa para as concentrações observadas e positiva para as concentrações preditas, enquanto para os cenários GILTT-3 e GILTT-4 as assimetrias são positivas tanto para as concentrações observadas quanto para a preditas.

O coeficiente de variação é uma medida de dispersão relativa, empregada para estimar a precisão dos experimentos e representa o desvio padrão expresso como porcentagem da média, descrevendo o quanto os valores estão dispersos. Foi verificado que os valores observados das concentrações apresentaram uma dispersão inferior a 50% para os cenários bidimensionais (GILTT-1 e GILTT-2) e uma dispersão superior a 80% para os cenários tridimensionais (GILTT-3 e GILTT-4).

Foram realizadas análises estatísticas da variância e os resultados foram descritos por meio do teste F, indicando tanto para os cenários bidimensionais (GILTT-1 e GILTT-

2) quanto para os cenários tridimensionais (GILTT-3 e GILTT-4) que não existe uma diferença significativa a 5% de probabilidade entre as concentrações observadas e preditas, o que significa que os modelos contribuem significativamente na predição do poluente hexafluoreto de enxofre.

A partir do desvio padrão foi observado que nos cenários bidimensionais as concentrações observadas e as concentrações preditas estão mais próximas da média para o cenário GILTT-1. Nos cenários tridimensionais as concentrações observadas não apresentam diferenças. As concentrações preditas estão mais próximas da média para o cenário GILTT-3.

O coeficiente de correlação para as concentrações de hexafluoreto de enxofre observadas e preditas descrito na tabela 9, mede o grau da correlação entre as duas concentrações e que comumente assume valores entre -1 e 1, sendo que valor 1 indica uma correlação perfeita positiva, valor -1 indica uma correlação negativa perfeita.

Observou-se na tabela 9 que para os cenários bidimensionais, o GILTT-1 apresentou uma correlação muito forte entre as concentrações observadas e preditas (superior a 0,9) e o GILTT-2 apresentou uma correlação forte (entre 0,7 e 0,9). Já para os cenários tridimensionais, o GILTT-3 apresentou uma correlação forte (entre 0,7 e 0,9) e o GILTT-4 uma correlação muito forte entre as concentrações observadas e preditas (superior a 0,9).

Tabela 9: Correlação dos valores das concentrações observadas e preditas dos quatro cenários: GILTT-1, GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4, para o experimento de Copenhagen

Correlação	GILTT-1	GILTT-2	GILTT-3	GILTT-4
r	$0,91$	$0,80$	$0,80$	$0,93$

Observa-se na tabela 10 as avaliações dos estimadores estatísticos FS, NMSE, FA2 e FB.

Tabela 10: Utilizando os dados de concentrações observados (O) e os dados de concentrações preditas (P) do experimento de Copenhagen para os quatro cenários: GILTT-1, GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4

Modelos	NMSE	FA2	FB	FS
GILTT-1	$0,05$	$1,00$	$-0,01$	$0,14$
GILTT-2	$0,12$	$1,00$	$0,11$	$0,13$
GILTT-3	$0,33$	$0,87$	$0,28$	$0,09$
GILTT-4	$0,08$	$0,96$	$0,02$	$0,03$

Os índices FB com valores negativos indicam que, de maneira geral, as concentrações observadas são superestimadas pelas concentrações preditas pelo método GILTT e com valores positivos indicam que as concentrações obtidas tendem a subestimar os valores as concentrações observadas. O cenário GILTT-1 apresenta valor negativo e valores positivos para os cenários GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4, embora para todos os valores de FB são bastante próximos de zero, como pode ser visto na tabela 10.

Os valores positivos de FS indicam que em todos os cenários as concentrações preditas subestimam o espalhamento das concentrações observadas. Observa-se ainda que todos os valores são próximos de zero.

Os pequenos valores do estimador estatístico NMSE indicam que as concentrações obtidas e observadas estão bastante próximas.

Verifica-se ainda que os valores de FA2 mostram a porcentagem das concentrações preditas que ficaram entre a metade e o dobro das concentrações observadas, sendo que todos os valores são muito próximos de 100%.

Percebe-se que os valores do estimador NMSE são aproximadamente zero para os quatro cenários. Os estimadores r e FA2 tem valores próximos de 1 e estimadores FB e FS são próximos de zero tanto para os cenários bidimensionais quanto para os cenários tridimensionais, dando a perspectiva de uma boa performance para o método utilizados na predição das concentrações do hexafluoreto de enxofre (HANNA; PAINE, 1989; PIMENTEL-GOMES, 2009).

Na tabela 11 são descritos os valores dos novos estimadores estatísticos propostos: NMSE$_{min}$, MG, VG, NSD, NRMSE, FB$_{fn}$ e FB$_{fp}$.

Tabela 11: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Copenhagen para os quatro cenários: GILTT-1,GILTT-2, GILTT-3 e GILTT-4

Estimadores	GILTT-1	GILTT-2	GILTT-3	GILTT-4
$MNSE_{min}$	$0,00$	$0,01$	$0,081$	$0,00$
MG	$0,96$	$1,08$	$1,36$	$0,98$
VG	$1,06$	$1,1$	$1,25$	$1,10$
FB_{fn}	$0,08$	$0,20$	$0,35$	$0,10$
FB_{fp}	$0,08$	$0,09$	$0,07$	$0,08$
$FB_{fn} - FB_{fp}$	$-0,00$	$0,11$	$0,28$	$0,02$
$FB_{fn} + FB_{fp}$	$0,16$	$0,29$	$0,41$	$0,18$
NSD	$0,87$	$0,88$	$0,92$	$0,97$
$NRMSE$	$0,41$	$0,48$	$0,60$	$0,37$

Os valores do estimador estatístico MG encontram-se bastante próximos de 1 indicando assim que os cenários apresentam um baixo desvio médio relativo, ou seja, que não existem grandes erros sistemáticos no método, sendo que o cenário GILTT-1 apresenta o menor desvio dos cenários bidimensionais e o cenário GILTT-4 apresenta o menor desvio para os cenários tridimensionais. Os valores do estimador estatístico VG são razoavelmente próximos de 1 indicando que a dispersão dos valores é pequena e que o método não apresenta grandes erros sistemáticos ou aleatórios, sendo essa característica mais representativa no cenário GILTT-1 nos casos bidmensionais e no cenário GILTT-4 nos casos tridimensionais. Os valores do estimador estatístico NSD apresentam-se próximos de 1, indicando que a variação dos valores não estão distantes do valor da média no conjunto de valores, ou seja, que não existem grandes erros aleatórios. O estimador estatístico NRMSE apresenta valores razoavelmente próximos de zero, sinalizando poucos erros aleatórios para os cenários bidimensionais e tridimensionais, sendo que o cenário GILTT-3 apresenta o valor mais distante de zero, ou seja, o que apresenta mais erros aleatórios.

Os valores dos estimadores r, NRSME e NSD, quando avaliados juntamente, atendendo aos parâmetros ideais, nos levam a uma maior confiabilidade na avaliação da performance do método. Dessa forma, ao fazermos uma análise conjunta de tais estimadores pode-se concluir que é esperado que apresente uma melhor performance o cenário GILTT-1 para o caso dos cenários bidimensionais e o cenário GILTT-4 para o caso dos cenários tridimensionais.

Nas figuras 10 e 11 podem ser observados os gráficos de regressão para os cenários bidimensionais e tridimensionais do experimento de Copenhagen. Os gráficos de regressão expressam a relação entre as concentrações observadas e preditas, sendo os $\beta_1 = 1$, $\beta_0 = 0$ e $R^2 = 1$ os valores ideais.

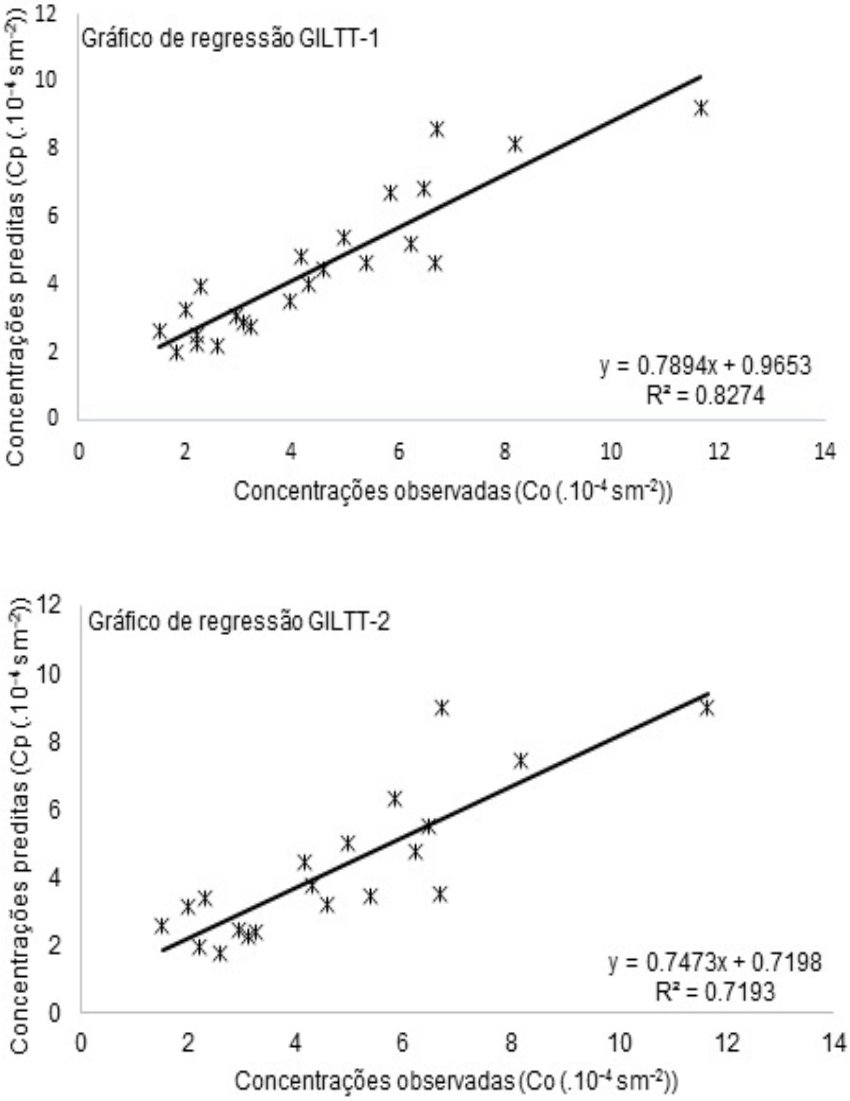
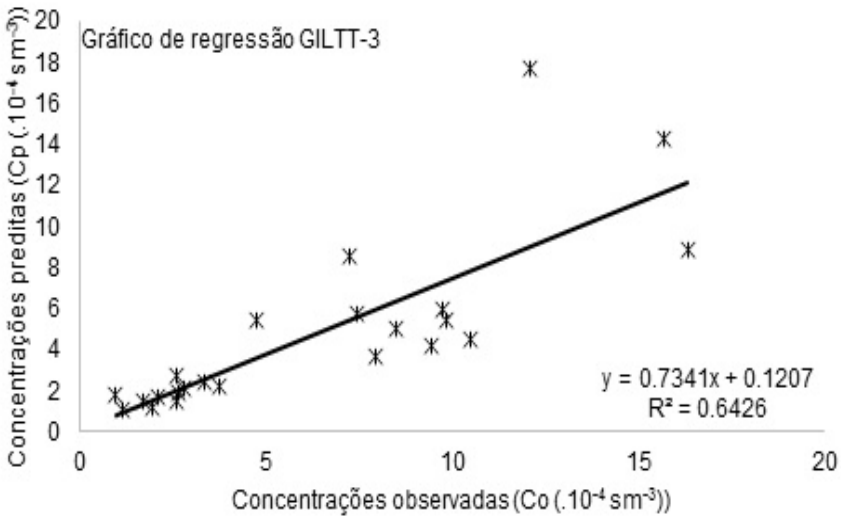


Figura 10: Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais.



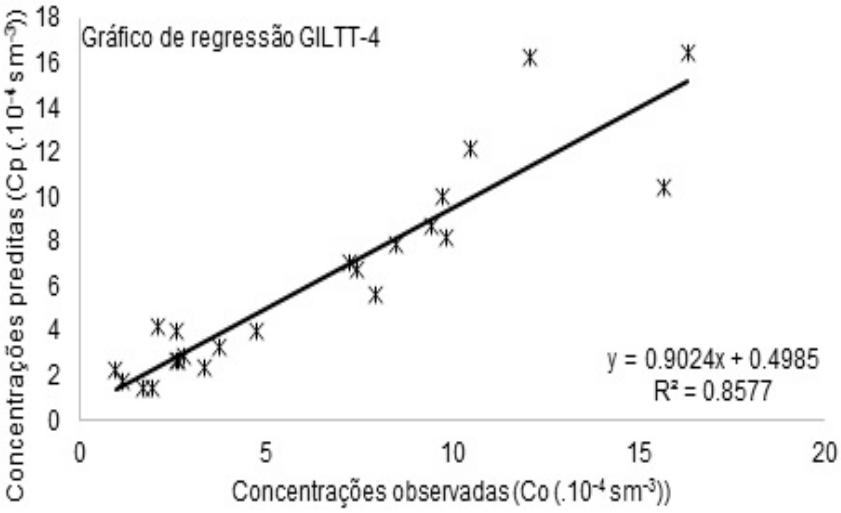


Figura 11: Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários tridimensionais.

Nas figuras 12 e 13 são apresentados através de gráficos *box-plot* os resultados da análise estatística das concentrações observadas e preditas referentes aos quatro cenários do experimento de Copenhagen. Tais gráficos representam valores máximo e mínimo, além da mediana.

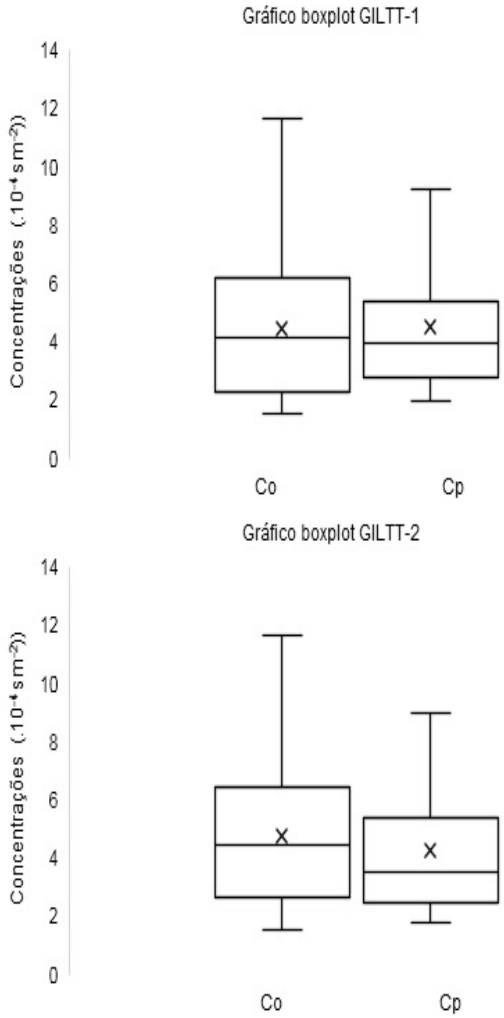


Figura 12: Gráfico box plot referente aos dados de Copenhagen observados e preditos pelos dois cenários bidimensionais.

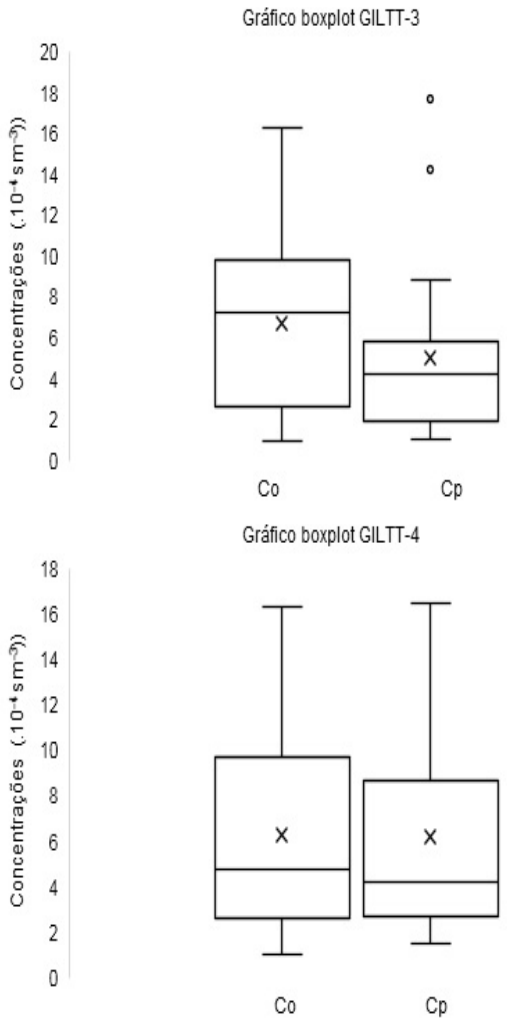
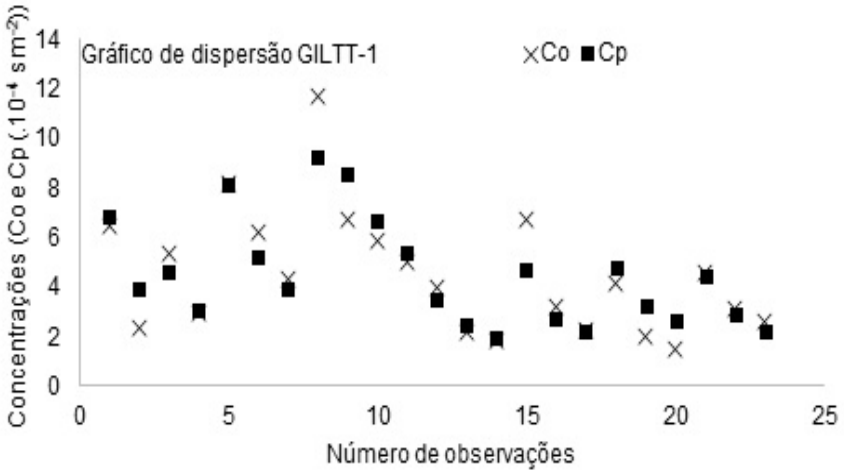


Figura 13: Gráfico box plot referente aos dados de Copenhagen observados e preditos pelos dois cenários tridimensionais.

Nas figuras 14 e 15 observa-se que existe uma menor dispersão no cenário GILTT-1 entre os bidimensionais e no cenário GILTT-4 entre os tridimensionais, indicando que tais cenários ajustam-se melhor ao conjunto de dados na predição (SILVA, 2004), (DEMETRIUS, 1978), valores estes referentes aos valores de componentes da taxa de emissão do poluente hexafluoreto de enxofre em $(.10^{-4}sm^{-2})$.



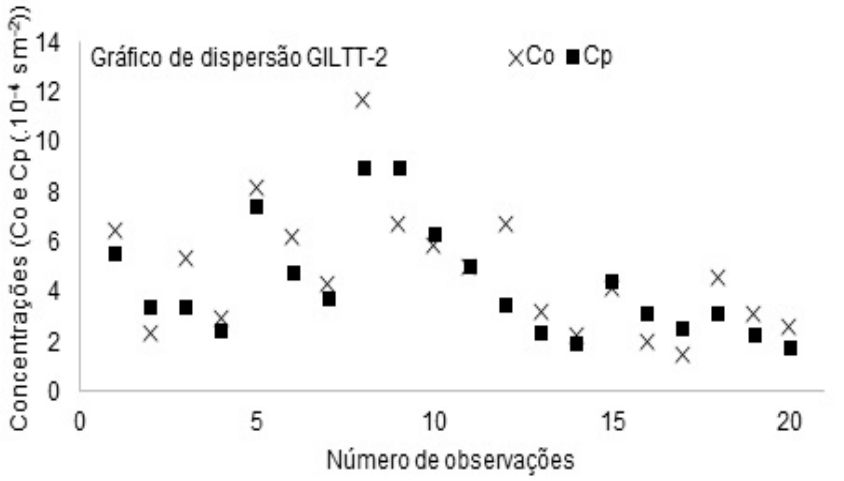
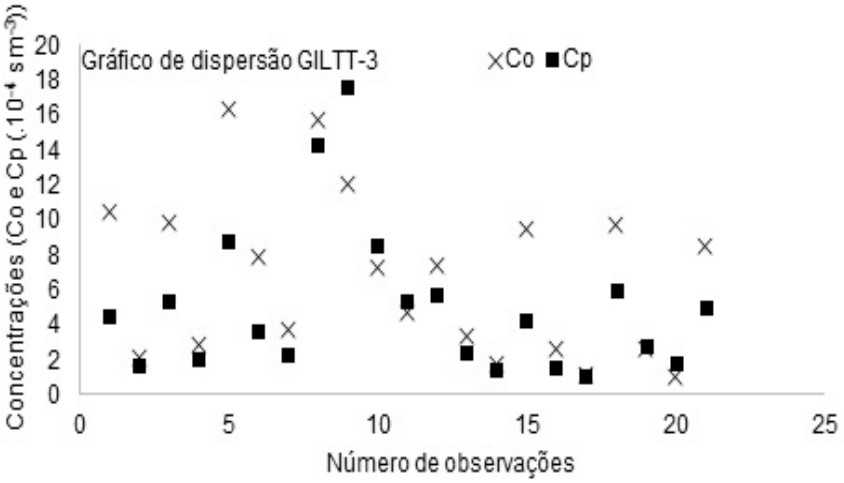


Figura 14: Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais.



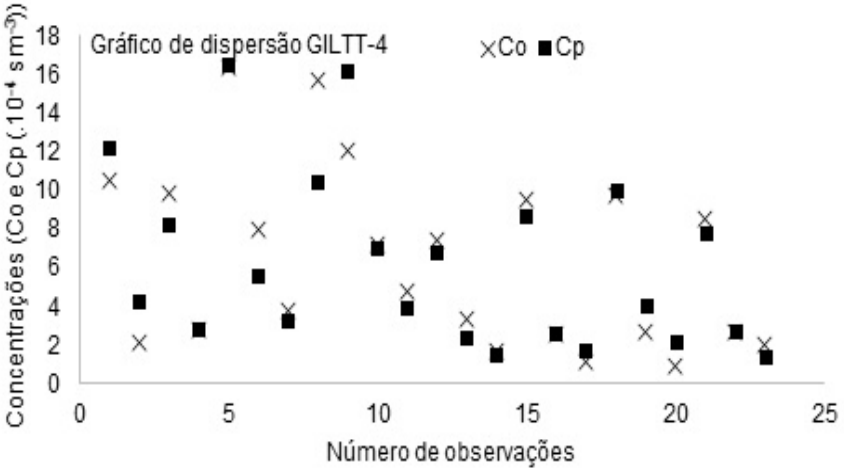


Figura 15: Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários tridimensionais.

Com a análise estatística do conjunto de dados referentes as concentrações observadas e preditas, buscou-se descrever sobre o grau de posição e variação entre os valores das concentrações preditas e as concentrações que de fato foram observadas.

4.2 Resultados utilizando o experimento de Hanford

Os resultados foram gerados através da equação de advecção-difusão nos cenários: bidimensional estacionário, com e sem deposição , bidimensional transiente, com e sem deposição, utilizando os dados das concentrações observadas do experimento de Hanford (DORAN; HORST, 1985).

Foram utilizados os dados das concentrações observadas no experimento de Hanford e preditas pelo método GILTT, utilizando a equação de advecção-difusão nos casos: bidimensional estacionário com deposição (aqui denominado GILTT-I), bidimensional estacionário sem deposição (aqui denominado GILTT-II), bidimensional transiente com deposição (aqui denominado GILTT-III) e bidimensional transiente sem deposição (aqui denominado GILTT-IV).

Podem ser observadas na tabela 12 as concentrações observadas no experimento de Hanford e as concentrações preditas pelo método GILTT.

Tabela 12: Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-3})$, onde C_{p_1}, C_{p_2}, C_{p_3} e C_{p_4} representam as concentrações preditas pelo método e C_{o_1}, C_{o_2}, C_{o_3} e C_{o_4} representam as concentrações observadas experimentalmente

		Dados GILTT-I		Dados GILTT-II		Dados GILTT-III		Dados GILTT-IV	
		(Estac. com dep.)		(Estac.sem dep.)		(Trans. com dep.)		(Trans. sem dep.)	
Exp.	Arc(m)	C_{o_1}	C_{p_1}	C_{o_2}	C_{p_2}	C_{o_3}	C_{p_3}	C_{o_4}	C_{p_4}
1	800	$0,60$	$0,78$	$3,70$	$7,12$	$0,60$	$0,72$	$3,70$	$6,79$
	1600	$0,46$	$0,71$	$2,10$	$4,11$	$0,46$	$0,65$	$2,10$	$4,19$
	3200	$0,45$	$0,62$	$1,30$	$2,46$	$0,45$	$0,56$	$1,30$	$2,47$
2	800	$0,58$	$0,57$	$12,90$	$17,76$	$0,58$	$0,62$	$12,90$	$18,22$
	1600	$0,36$	$0,49$	$9,10$	$11,10$	$0,36$	$0,49$	$9,10$	$11,14$
	3200	$0,32$	$0,42$	$7,20$	$7,15$	$0,32$	$0,35$	$7,20$	$7,12$
3	800	$0,52$	$0,68$	$5,90$	$12,92$	$0,52$	$0,75$	$5,90$	$13,02$
	1600	$0,40$	$0,59$	$3,30$	$7,96$	$0,40$	$0,62$	$3,30$	$8,10$
	3200	$0,37$	$0,50$	$1,80$	$5,09$	$0,37$	$0,46$	$1,80$	$5,04$
4	800	$0,40$	$0,57$	$20,10$	$24,25$	$0,40$	$0,60$	$20,10$	$24,81$
	1600	$0,33$	$0,49$	$13,10$	$15,36$	$0,33$	$0,47$	$13,10$	$15,41$
	3200	$0,34$	$0,42$	$9,20$	$10,01$	$0,34$	$0,33$	$9,20$	$10,00$
5	800	$0,50$	$0,60$	$10,50$	$16,29$	$0,50$	$0,66$	$10,50$	$16,87$
	1600	$0,39$	$0,52$	$8,60$	$10,05$	$0,39$	$0,53$	$8,6$	$9,92$
	3200	$0,44$	$0,45$	$6,60$	$6,47$	$0,44$	$0,38$	$6,60$	$6,52$
6	800	$0,54$	$0,64$	$13,40$	$12,58$	$0,54$	$0,71$	$13,40$	$12,81$
	1600	$0,41$	$0,54$	$6,20$	$7,97$	$0,41$	$0,56$	$6,20$	$7,97$
	3200	$0,40$	$0,45$	$3,10$	$5,32$	$0,40$	$0,39$	$3,10$	$5,37$

Dispôs-se as avaliações de média, mediana, coeficiente de variação, variância e desvio padrão, simetria, curtose, quartis e correlação na tabela 13.

Tabela 13: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Hanford para os quatro cenários GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV

Estimadores	GILTT-I(C_o)	GILTT-I(C_p)	GILTT-II(C_o)	GILTT-II(C_p)	GILTT-III(C_o)	GILTT-III(C_p)	GILTT-IV(C_o)	GILTT-IV(C_p)
Média	$0,43$	0.56	7.67	10.22	0.43	0.55	7.67	10.32
Mediana	$0,41$	$0,56$	$6,90$	$8,99$	$0,41$	$0,56$	$6,90$	$9,01$
Coef. de var. (%)	$19,00$	$18,00$	$63,00$	$53,00$	$19,00$	$23,00$	$63,00$	$54,00$
Variância	$0,01$	$0,01$	$25,05$	$30,69$	$0,01$	$0,02$	$25,05$	$32,63$
Desvio Padrão	$0,08$	$0,10$	$4,86$	$5,38$	$,08$	$0,13$	$4,86$	$5,55$
Simetria	$0,90$	$0,82$	$0,18$	$0,70$	$0,29$	$0,82$	$0,25$	$0,70$
Curtose	$0,12$	$-0,15$	$-1,19$	$0,10$	$-1,08$	$-0,15$	$-1,17$	$0,09$
Quartil 1	$0,38$	$0,49$	$3,40$	$6,64$	$0,38$	$0,46$	$3,40$	$6,59$
Quartil 3	$0,49$	$0,62$	$10,18$	$12,84$	$0,49$	$0,64$	$10,18$	$12,97$

$*$

$+$

As estimativas relacionadas a média revelaram a partir do teste *t de Student* para os cenários GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV, a inexistência de diferença significativa a 5% de probabilidade entre os valores das concentrações observadas e das concentrações preditas do poluente hexafluoreto de enxofre e ZnS.

Para a caracterização dos conjuntos de dados das concentrações observadas e das concentrações preditas por esses modelos foi utilizada a mediana, dando uma ideia melhor da distribuição das concentrações.

Indicada pelo primeiro quartil, a caracterização dos cenários GILTT-I e GILTT-III mostrou que as concentrações observadas e preditas apresentam separatrizes de baixo valor, sendo o menor valor para as concentrações observadas e as separatrizes dos cenários GILTT-II e GILTT-IV apresentaram valores cujas concentrações preditas apresentam separatrizes de maior valor.

A caracterização dada pelo terceiro quartil nos quatro cenários apresentam separatrizes nos conjuntos das concentrações observadas com valores inferiores às separatrizes dos conjuntos das concentrações preditas.

Verifica-se que os cenários GILTT-I e GILTT-III são simétricos para as concentrações observadas e preditas, entretanto os cenários GILTT-II e GILTT-IV possuem uma assimetria positiva tanto para as concentrações observadas quanto para as concentrações preditas.

Foi verificado que os valores observados e preditos das concentrações apresentaram uma dispersão bastante baixa para os cenários GILTT-I e GILTT-III e uma dispersão superior a 50% para os cenários GILTT-II e GILTT-IV.

Os cenários GILTT-I e GILTT-III apresentaram uma baixa variação para as concentrações observadas e para as concentrações preditas, enquanto os cenários GILTT-II e GILTT-IV apresentaram uma alta variação para as concentrações observadas e para as concentrações preditas.

As concentrações observadas e as concentrações preditas nos cenários GILTT-I e GILTT-III estão mais próximas da média e mais distantes da média para os cenários GILTT-II e GILTT-IV tanto para as concentrações observadas quanto para as concentrações preditas.

O coeficiente de correlação para as concentrações de hexafluoreto de enxofre observadas e preditas está descrito na tabela 14, indicando que existem correlações superiores a 78% entre as concentrações observadas e preditas para os quatro cenários.

Tabela 14: Correlação dos valores das concentrações observadas e preditas dos quatro cenários, GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV, para o experimento de Hanford

Correlação	GILTT-I	GILTT-II	GILTT-III	GILTT-IV
r	$0,78$	$0,92$	$0,78$	$0,92$

Foram realizadas análises estatísticas da variância e os resultados foram descritos por meio do teste F, indicando para os quatro cenários que não existe uma diferença significativa a 5% de probabilidade entre as concentrações observadas e preditas do poluente hexafluoreto de enxofre.

Observa-se na tabela 15 as avaliações dos estimadores estatísticos FS, NMSE, FA2 e FB.

Tabela 15: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Hanford para os quatro cenários GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV

Cenários	NMSE	FA2	FB	FS
GILTT-I	$0,08$	$1,00$	$-0,25$	$-0,19$
GILTT-II	$0,14$	$0,83$	$-0,28$	$-0,10$
GILTT-III	$0,08$	$1,00$	$-0,23$	$-0,43$
GILTT-IV	$0,15$	$0,83$	$-0,29$	$-0,13$

Os quatro cenários apresentam valores negativos, embora para todos os valores de FB sejam bastante próximos de zero, como pode ser observado na tabela 15, sinalizando assim que as concentrações observadas superestimam as concentrações preditas.

Os valores de FS são negativos para os quatro cenários indicam que todos os cenários subestimam o espalhamento das concentrações observadas. Observa-se ainda que todos os valores são próximos de zero, o que mostra que os dados preditos pelo método superestimam as concentrações observadas.

A proximidade entre as concentrações observadas e preditas é sinalizada pelos baixos valores encontrados para o estimador estatístico NMSE.

Os valores encontrados para FA2 indicam que a porcentagem das concentrações preditas que ficaram entre a metade e o dobro das concentrações observadas, pois

os valores são muito próximos ou iguais a 100%.

Percebe-se que os valores do estimador NMSE são aproximadamente zero para os quatro cenários. Os estimadores r e FA2 tem valores próximos de 1 e estimadores FB e FS são próximos de zero para todos os cenários, indicando assim a perspectiva de uma boa performance para os cenários utilizados na predição das concentrações do hexafluoreto de enxofre (PIMENTEL-GOMES, 2009), (HANNA; PAINE, 1989).

Na tabela 16 estão descritos os valores dos novos estimadores estatísticos propostos: NMSE$_{min}$, MG, VG, NSD, NRMSE, FB$_{fn}$ e FB$_{fp}$.

Tabela 16: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Hanford, como sugestão de novos estimadores, para os quatro cenários GILTT-I, GILTT-II, GILTT-III e GILTT-IV

Estimadores	GILTT-I	GILTT-II	GILTT-III	GILTT-IV
$MNSE_{min}$	$0,06$	$0,08$	$0,05$	$0,09$
MG	$0,78$	$0,68$	$0,80$	$0,68$
VG	$0,78$	$1,29$	$1,08$	$1,29$
FB_{fn}	$0,00$	$0,01$	$0,01$	$0,00$
FB_{fp}	$0,25$	$0,29$	$O,24$	$0,30$
$FB_{fn} - FB_{fp}$	$-0,25$	$-0,28$	$-0,23$	$-0,29$
$FB_{fn} + FB_{fp}$	$0,25$	$0,30$	$0,25$	$0,30$
NSD	$1,21$	$1,11$	$1,55$	$1,14$
$NRMSE$	$0,14$	$0,08$	$0,97$	$0,43$

Os valores do estimador estatístico MG encontram-se razoavelmente próximos de 1 indicando assim que os cenários não apresentam um alto desvio médio relativo, sendo que o cenário GILTT-I apresenta o menor desvio dos cenários com deposição de poluentes e o cenário GILTT-III apresenta o menor desvio para os cenários sem deposição de poluentes. Os valores do estimador estatístico VG são razoavelmente próximos de 1 indicando que a dispersão dos valores é pequena, sendo essa característica mais representativa no cenário GILTT-I nos casos com deposição de poluentes e no cenário GILTT-III nos casos tridimensionais. Os valores do estimador estatístico NSD apresentam-se próximos de 1, indicando que a variação dos valores não estão distantes do valor da média no conjunto de valores, ou seja, que não existem grandes erros aleatórios. O estimador estatístico NRMSE apresenta valores razoavelmente próximos de zero, sinalizando poucos erros aleatórios para os cenários bidimensionais e tridimensionais, sendo que o cenário GILTT-3 apresenta o valor mais distante de zero, ou seja, o que apresenta mais erros aleatórios.

Os valores de correlação r, NRSME e NSD, quando avaliados juntamente, atendendo aos parâmetros ideais, nos levam a uma maior confiabilidade na avaliação da performance do método. Dessa forma, ao fazermos uma análise conjunta de tais

estimadores pode-se concluir que o cenário que apresenta melhor performance é o GILTT-1 para o caso dos cenários bidimensionais e o GILTT-4 para o caso dos cenários tridimensionais.

Os gráficos de regressão para o experimento de Hanford podem ser observados nas figuras 16 e 17.

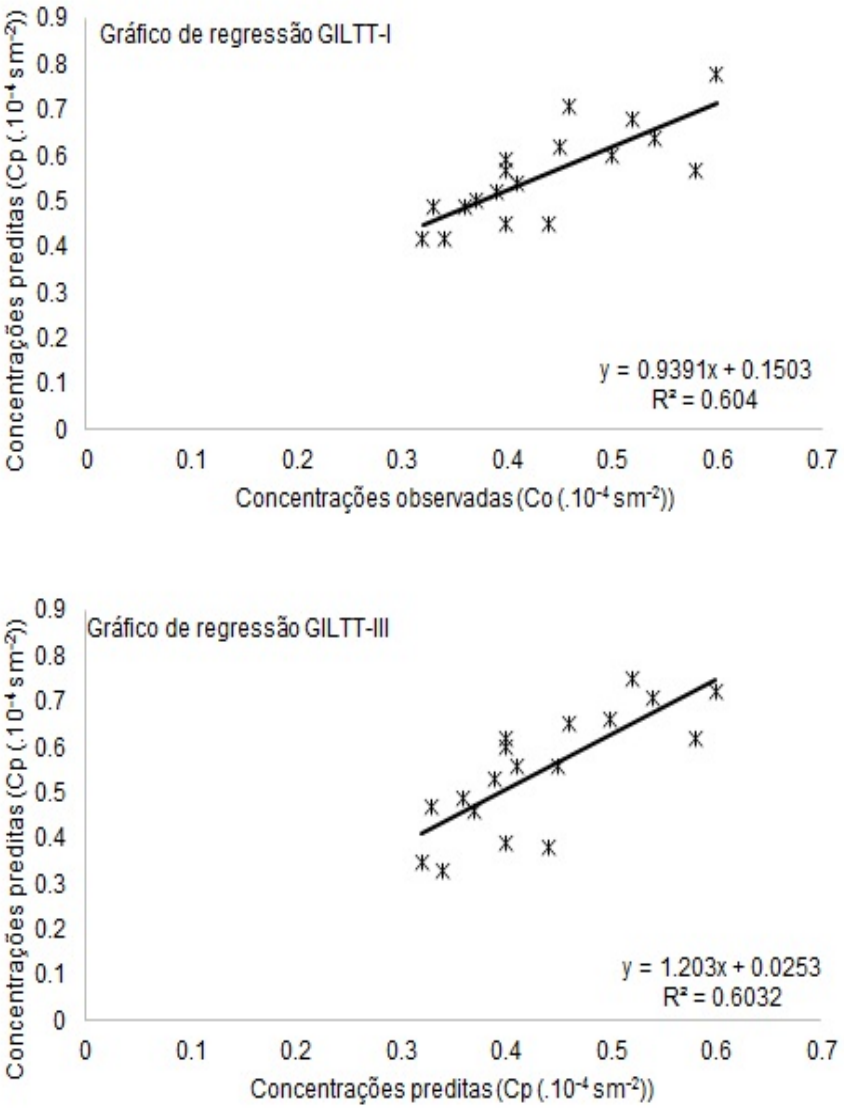


Figura 16: Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais com deposição de poluentes.

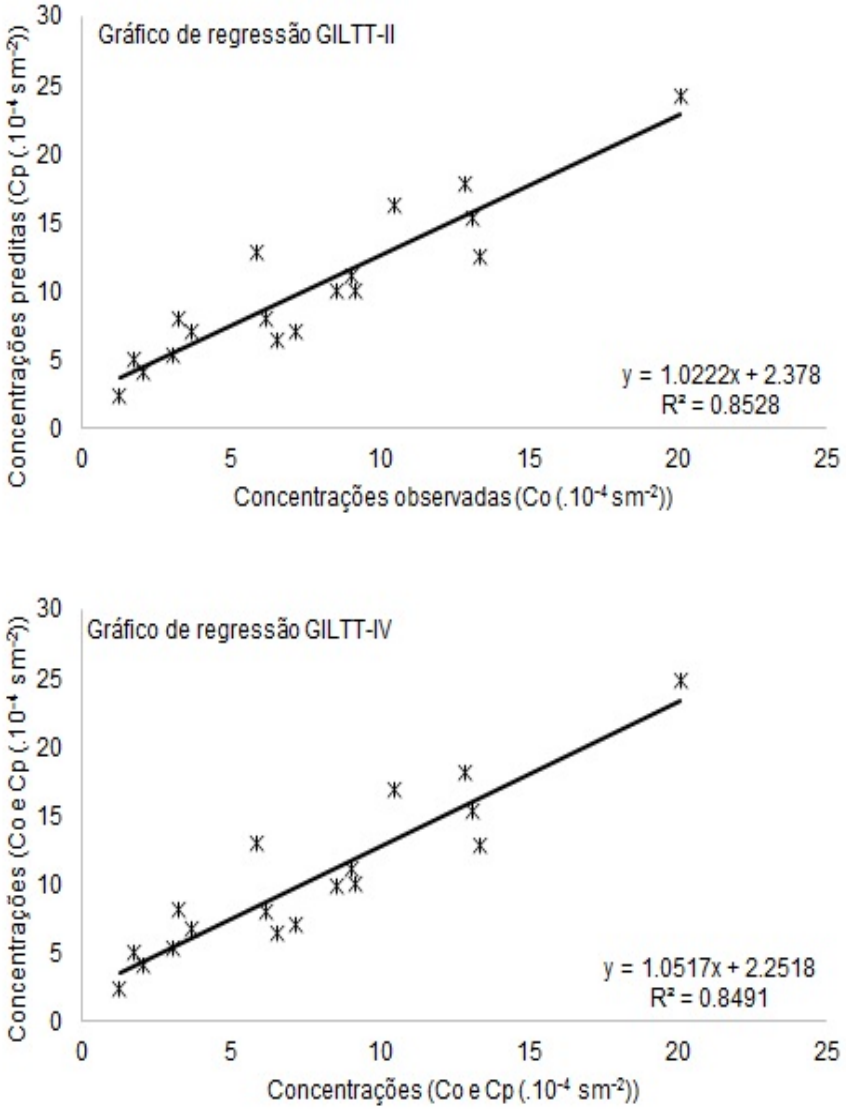


Figura 17: Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários bidimensionais sem deposição de poluentes.

Nas figuras 18 e 19 são demonstrados os resultados da análise estatística dos dados referentes aos modelos GILTT dos experimentos de Hanford, com os dados observados e preditos pelo método.

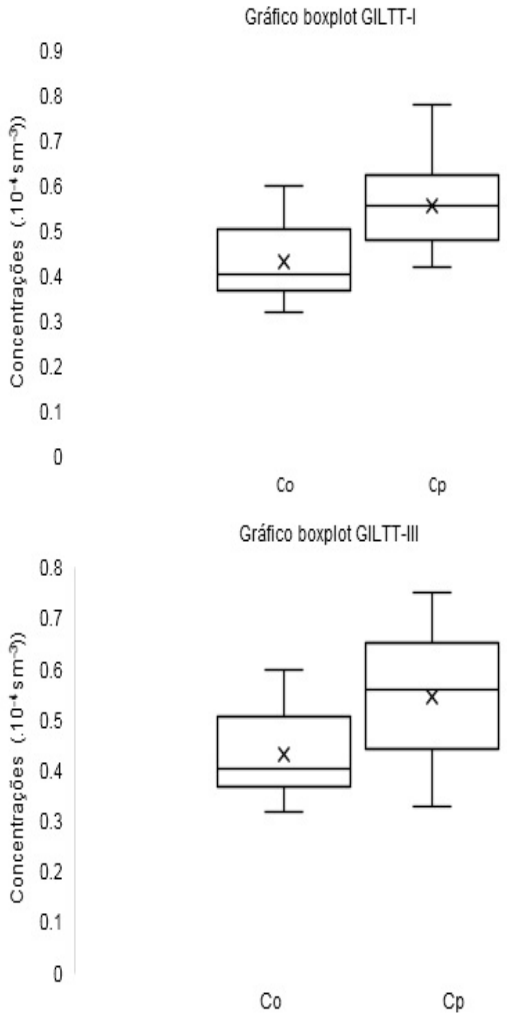


Figura 18: Gráfico box plot referente aos dados de Hanford observados e preditos pelo método GILTT.

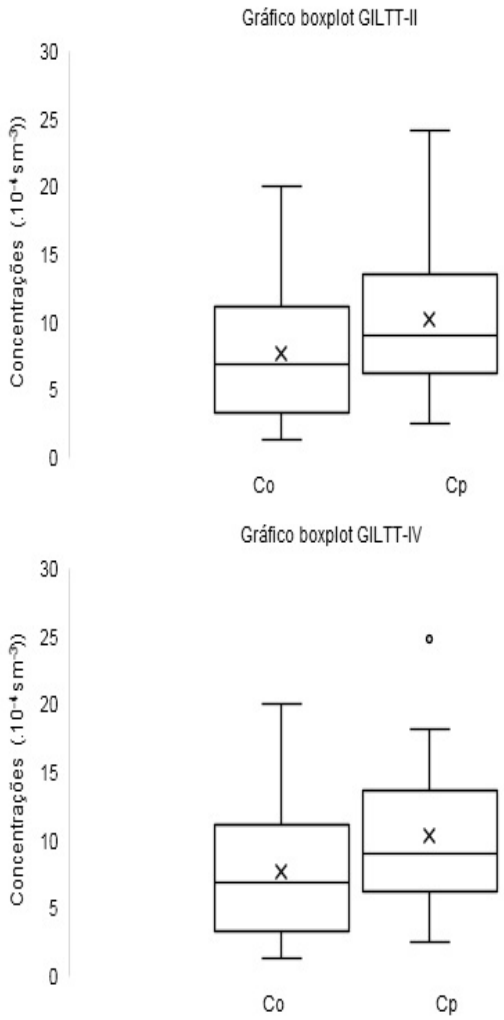


Figura 19: Gráfico box plot referente aos dados de Hanford observados e preditos pelo método GILTT.

Com a análise estatística do conjunto de dados busca-se descrever sobre o grau de posição e variação entre os valores preditos e os dados que de fato foram observados.

As figuras 20 e 21, apresentam a dispersão, ou seja, a incerteza presente no conjunto de dados dos dados observados e preditos pelo método GILTT, e a partir da qual pode-se inferir que para o método GILTT os ajustes foram semelhantes quanto a dispersão dos dados observados e preditos, ou seja, demonstrou pouca distorção na predição de valores de componentes da taxa de emissão do poluente hexafluoreto de enxofre em $(.10^{-4}sm^{-2})$.

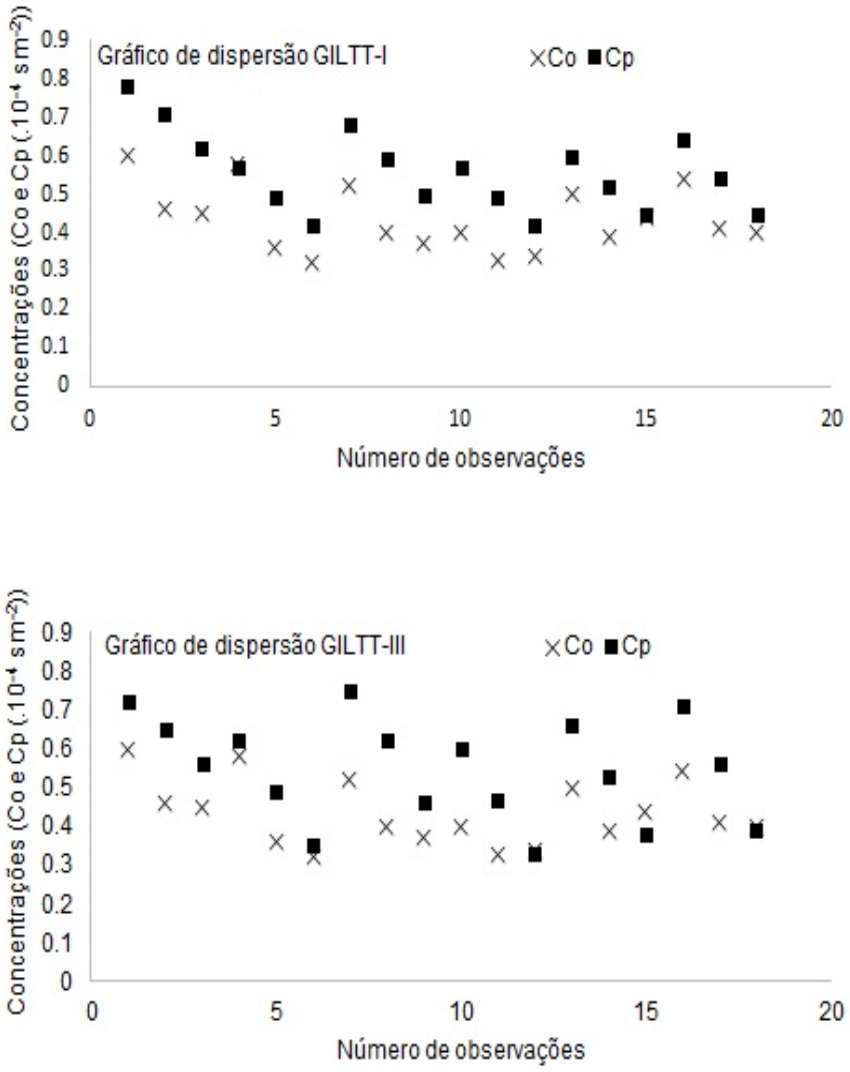


Figura 20: Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários com deposição de poluentes.

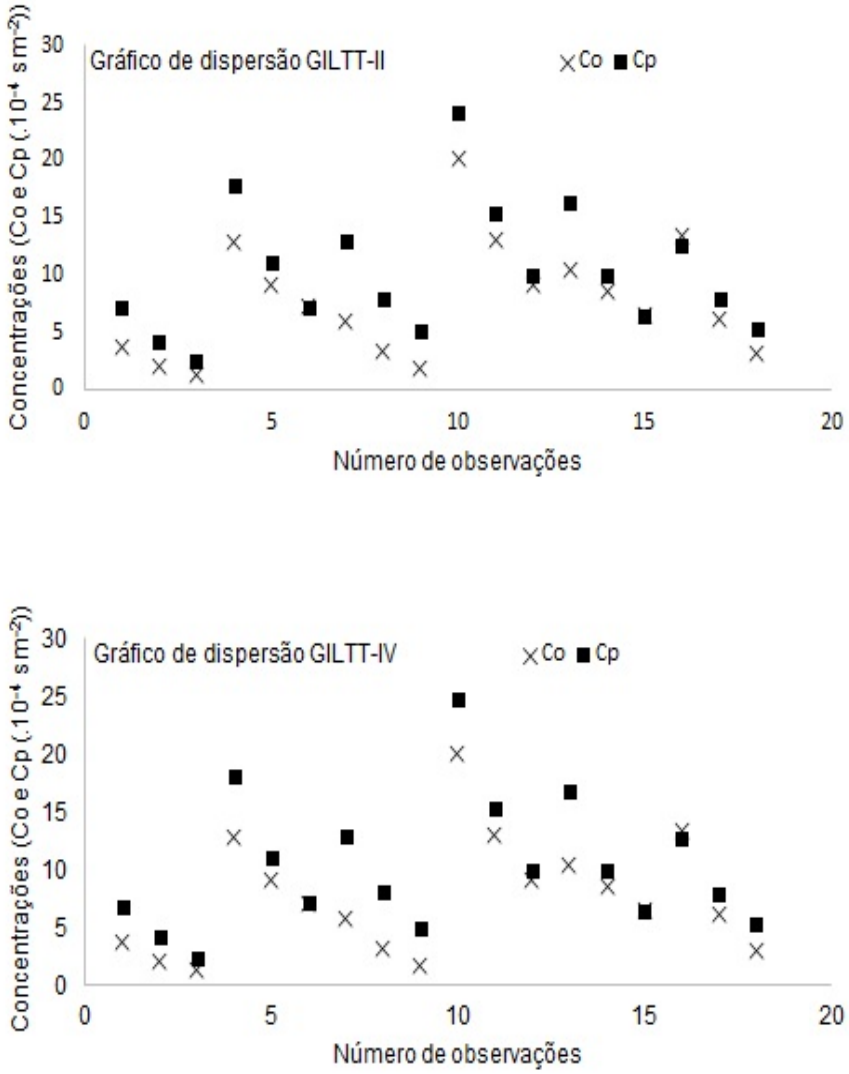


Figura 21: Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários sem deposição de poluentes.

4.3 Resultados utilizando o experimento de Kinkaid

Foram utilizados os dados das concentrações observadas no experimento de Kinkaid e preditas pelo método GILTT, para a equação de advecção-difusão tridimensional (aqui denominados 3D-GILTT e GILTTG) (HANNA; PAINE, 1989).

Nas tabelas 17, 18, 19 e 20 estão descritos os dados das concentrações observadas e preditas dos cenários 3D-GILTT e GILTTG.

Tabela 17: Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-2})$, onde C_{p_1} e C_{p_2} representam as concentrações preditas pelo método e C_{o_1} e C_{o_2} representam as concentrações observadas experimentalmente (Parte 1)

	Dados 3D-GILTT						
Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}	Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}
1	3000	59,30	58,89	24	3000	45,60	34,74
	5000	30,30	43,03		5000	41,70	31,20
	7000	17,20	32,57				
2	3000	165,50	261,42	25	3000	40,00	89,97
	5000	182,70	166,80		15000	52,40	46,64
	7000	132,60	120,12		20000	48,90	34,99
3	3000	158,60	215,95	26	5000	38,30	17,84
	5000	117,50	141,44		15000	27,00	18,62
	7000	89,20	102,55		20000	21,60	14,33
4	3000	136,30	131,20	27	1000	49,80	2,35
	7000	68,00	69,09		5000	26,10	10,01
	10000	63,30	98,04				
5	3000	117,10	128,60	28	1000	13,61	66,08
	5000	89,00	89,62		3000	36,80	80,04
	7000	101,90	66,49		5000	47,00	56,72
	10000	77,80	94,17		7000	43,00	42,43
					15000	22,70	40,39
6	10000	58,00	65,71	29	3000	47,80	93,79
					5000	66,80	65,25
					7000	49,40	48,44
					15000	16,10	45,89
					20000	21,50	34,43
7	10000	79,60	48,90	30	3000	10,20	94,55
					5000	20,80	66,99
					7000	25,80	50,13
					15000	16,00	47,72
					20000	14,10	35,81
8	7000	52,60	31,61	31	15000	28,50	45,68
	10000	63,10	51,33		20000	22,40	34,28
9	5000	89,00	121,43	32	15000	25,10	44,28
					20000	26,50	33,24
10	2000	69,20	113,53	33	15000	19,40	41,90
	5000	69,10	72,71		20000	21,70	31,48
	10000	49,00	78,13				
11	10000	51,40	51,1	34	20000	10,40	40,51
12	10000	10,80	26,45	35	20000	65,60	31,03
					50000	28,30	12,42

continua

Tabela 18: Continuação (Parte 2)

	Dados 3D-GILTT						
Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}	Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}
13	5000	117,60	75,76	36	20000	49,00	20,13
	7000	88,20	58,87		50000	18,20	8,06
	10000	73,00	85,56				
14	5000	135,00	43,12	37	10000	44,20	26,35
	7000	65,00	35,36		20000	32,60	12,36
	10000	73,30	53,52		30000	16,10	8,19
					50000	12,00	4,91
15	3000	66,10	36,29	38	3000	73,60	48,99
	5000	52,30	34,12		10000	73,60	36,86
	7000	31,50	28,49		20000	27,80	18,43
	10000	41,20	43,80		30000	26,10	12,29
16	2000	58,00	10,88	39	10000	22,50	34,62
	3000	67,00	17,58		30000	24,80	11,75
	5000	31,50	19,31		50000	11,60	7,05
	10000	23,60	26,66				
	15000	20,00	19,09				
17	20007	38,90	11,00	40	5000	26,60	29,13
					20000	30,70	15,60
	3000	57,10	17,79		30000	15,00	10,39
	5000	44,60	18,43		50000	10,50	6,24
18	2000	56,20	12,35	41	5000	12,40	22,53
	5000	47,40	18,68		20000	26,80	16,06
	7000	89,20	102,55		30000	24,80	10,81
					50000	9,60	6,50
19	2000	39,60	5,97	42	2000	72,00	189,16
	3000	48,70	12,83		3000	105,50	151,50
	5000	50,10	15,67		7000	117,90	73,36
					15000	37,40	68,76
20	3000	85,70	49,35	43	1000	91,30	113,08
	5000	75,80	40,95		3000	105,60	115,08
	7000	97,10	32,66		5000	75,80	79,40
	10000	70,70	48,52		7000	59,70	58,66
	15000	34,50	33,15		15000	63,90	55,37
21	3000	55,30	74,51	44	1000	75,90	75,35
	5000	110,90	55,53		2000	95,80	109,53
	7000	64,80	42,42		3000	82,50	96,36
	10000	54,70	61,14		7000	82,50	51,68
	15000	37,00	41,12		15000	45,50	49,23
22	3000	56,10	30,77	45	1000	109,00	48,39
	5000	43,20	26,24		7000	70,10	44,28
	7000	47,00	20,67		15000	43,50	42,78
	10000	34,50	30,39				
	15000	32,90	20,78				
23	3000	71,40	35,68	46	1000	37,70	39,64
	5000	53,70	30,04		2000	183,40	76,73
	7000	48,90	23,89		3000	202,90	73,57
	10000	22,30	35,51		7000	56,00	42,91
	15000	18,10	24,41		15000	28,00	41,86
				47	2000	94,20	46,42
					3000	37,30	52,20
					7000	41,10	35,32
					15000	37,90	36,13

Tabela 19: Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão $(.10^{-4}sm^{-2})$, onde C_{p_1} e C_{p_2} representam as concentrações preditas pelo método e C_{o_1} e C_{o_2} representam as concentrações observadas experimentalmente (Parte 1)

	Dados GILTTG						
Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}	Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}
1	3000	59,30	42,77	24	3000	45,60	28,88
	5000	30,30	39,25		5000	41,70	33,54
	7000	17,20	34,22				
2	3000	165,50	262,12	25	3000	40,00	96,20
	5000	182,70	209,39		5000	52,40	50,94
	7000	132,60	175,47		20000	48,90	43,69
3	3000	158,60	203,34	26	5000	38,30	19,35
	5000	117,50	166,41		15000	27,00	16,61
	7000	89,20	140,25		20000	21,60	14,52
4	3000	136,30	129,92	27	1000	49,80	0.17
	7000	68,00	98,98		5000	26,10	10.49
	10000	63,30	82,47				
5	3000	117,10	108,26	28	1000	13,60	24,69
	5000	89,00	94,14		3000	36,80	55,33
	7000	101,90	80,99		5000	47,00	48,96
	10000	77,80	67,37		7000	43,00	42,44
					15000	22,70	28,54
6	10000	58,00	59,62	29	3000	47,80	61,53
					5000	66,80	53,42
					7000	49,40	45,98
					15000	16,10	30,81
					20000	21,50	26,44
7	10000	79,60	42,91	30	3000	10,20	64,46
					5000	20,80	57,03
					7000	25,80	49,44
					15000	16,00	33,25
					20000	14,10	28,52
8	7000	52,60	50,03	31	15000	28,50	39,63
	10000	63,10	47,65		20000	22,40	33,98
9	5000	89,007	212,66	32	15000	25,10	40,31
					20000	26,50	34,55
10	2000	69,20	79,09	33	15000	19,40	40,64
	5000	69,10	76,81		20000	21,70	34,83
	10000	49,00	56,07				
11	10000	51,40	54,17	34	20000	10,40	44,66
12	10000	10,80	22,31	35	20000	65,60	52,59
					50000	28,30	32,39

continua

Tabela 20: Continuação (Parte 2)

	Dados GILTTG						
Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}	Exp.	Distância (m)	C_{o_1}	C_{p_1}
13	5000	117,60	135,35	36	20000	49,00	24,31
	7000	88,20	121,77		50000	18,20	14,95
	10000	73,00	103,66				
14	5000	135,00	69,48	37	10000	44,20	19,82
	7000	65,00	66,03		20000	32,60	12,39
	10000	73,30	58,44		30000	16,10	9,81
					50000	12,00	7,45
15	3000	66,10	38,65	38	3000	73,60	63,87
	5000	52,30	47,11		10000	73,60	40,58
	7000	31,50	45,72				
		20000	27,80	27,36			
	10000	41,20	41,06		30000	26,10	21,93
16	2000	58,00	6,36	39	10000	22,50	38,74
	3000	67,00	14,64		30000	24,80	21,24
	5000	31,50	21,94		50000	11,60	16,16
	10000	23,60	20,87				
	15000	20,00	17,78				
17	2000	38,90	7,14	40	5000	26,60	48,31
	3000	57,10	15,45		20000	30,70	23,29
	5000	44,60	21,66		30000	15,00	18,59
					50000	10,50	14,12
18	2000	56,20	7,51	41	5000	12,40	38,37
	5000	47,40	22,21		20000	26,80	25,17
					30000	24,80	20,28
					50000	9,60	15,40
19	2000	39,60	4,06	42	2000	72,00	142,72
	3000	48,70	11,24		3000	105,50	136,55
	5000	50,10	19,07		7000	117,90	95,90
					15000	737,40	63,85
20	3000	85,70	43,40	43	1000	91,30	56,95
	5000	75,80	45,80		3000	105,60	102,39
	7000	97,10	42,29		5000	75,80	88,15
	10000	70,70	36,75		7000	59,70	75,54
	15000	34,50	30,06		15000	63,90	50,47
21	3000	55,30	55,62	44	1000	75,90	36,49
	5000	110,90	51,97		2000	95,80	80,32
	7000	64,80	45,97		3000	82,50	85,49
	10000	54,70	38,83		7000	82,50	66,34
	15000	37,00	31,36		15000	45,50	44,64
22	3000	56,10	31,98	45	1000	109,00	19,78
	5000	43,20	35,25		7000	70,10	50,59
	7000	47,00	32,12		15000	43,50	34,42
	10000	34,50	27,43				
	15000	32,90	22,29				
23	3000	71,40	33,40	46	1000	37,70	15,05
	5000	53,70	36,21		2000	183,40	48,50
	7000	48,90	33,30		3000	202,90	57,24
	10000	22,30	28,86		7000	56,00	48,52
	15000	18,10	23,68		15000	28,00	33,29
				47	2000	94,20	30,99
					3000	37,30	44,21
					7000	41,10	44,20
					15000	37,90	31,64

Dispõe-se na tabela 21 as avaliações de média, mediana, coeficiente de variação, variância e desvio padrão, simetria, curtose, quartis.

Tabela 21: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Kinkaid para os dois cenários, 3D-GILTT e GILTTG

Estimadores	3D-GILTT(C_o)	3D-GILTT(C_p)	GILTTG(C_o)	GILTTG(C_p)
Média	$55,80^{nsm}$	$51,05^{nsm}$	$55,80^{nsm}$	$51,37^{nsm}$
Mediana	$48,80$	$41,88$	$48,80$	$40,45$
Coef. de var. (%)	$67,00$	$80,00$	$67,00$	$84,00$
Variância	$1679,25^{nsv}$	$1388,82^{nsv}$	$1388,82^{+}$	$1856,93^{+}$
Desvio Padrão	$40,84$	$37,14$	$37,14$	$42,95$
Simetria	$1,89$	$1,48$	$2,12$	$1,48$
Curtose	$4,51$	$2,75$	$4,88$	$2,75$
Quartil 1	$26,95$	$24,28$	$26,95$	$24,60$
Quartil 3	$72,25$	$66,18$	$72,25$	$57,54$

nsm

nsv

$*$

$+$

A partir das médias das concentrações observadas e preditas foram realizadas análises estatísticas e as estimativas revelaram para o teste t de Student, nos cenários 3D-GILTT e GILTTG, a inexistência de diferença, a 5% de probabilidade, entre os valores das concentrações observadas e das concentrações preditas da dispersão do poluente hexafluoreto de enxofre na atmosfera.

A caracterização dos conjuntos de dados das concentrações observadas e das concentrações preditas por esse método foi dada também pela mediana, dando uma ideia melhor da dispersão das concentrações.

A caracterização indicada pelo primeiro quartil nos cenários 3D-GILTT e GILTTG mostrou que as concentrações observadas e preditas apresentam separatrizes de baixo valor, sendo o menor valor para as concentrações preditas para os dois cenários.

A caracterização dada pelo terceiro quartil nos dois cenários apresentam separatrizes relativamente altas no conjunto das concentrações observadas e no conjunto das concentrações preditas.

Verifica-se que os cenários 3D-GILTT e GILTTG não são simétricos, porém apresentam assimetria positiva para as concentrações observadas e para as concentrações preditas tanto para o cenário 3D-GILTT quanto para o cenário GILTTG.

Foi verificado que os valores observados e preditos das concentrações apresentaram uma dispersão superior a 60% para os cenários 3D-GILTT e GILTTG.

O cenário 3D-GILTT apresentou uma baixa variação para as concentrações observadas e para as concentrações preditas e, do mesmo modo, o cenário GILTTG, sendo a mais elevada nos dois cenários, para as concentrações preditas.

As concentrações observadas para o cenário 3D-GILTT estão mais distantes da média e as concentrações preditas neste cenário mais próximas da média enquanto para o cenário GILTTG as concentrações observadas estão mais próximas da média e as concentrações preditas estão mais distantes da média.

O coeficiente de correlação para as concentrações de hexafluoreto de enxofre observadas e preditas está descrito na tabela 22, indicando que existem correlações superiores a 60% entre as concentrações observadas e preditas para os dois cenários. Há uma correspondência razoável entre as concentrações observadas e preditas.

Tabela 22: Correlação dos valores das concentrações observadas e preditas dos dois cenários, 3D-GILTT e GILTTG, para o experimento de Kinkaid

Correlação	3D-GILTT	GILTTG
r	$0,67$	$0,68$

Foram realizadas análises estatísticas da variância e os resultados foram descritos por meio do teste F, indicando para o cenário 3D-GILTT que não existe uma diferença significativa a 5% de probabilidade entre as concentrações observadas e preditas e para o cenário GILTTG que existe uma diferença significativa a 5% de probabilidade entre as concentrações observadas e preditas do poluente hexafluoreto de enxofre. Observa-se na tabela 23 as avaliações dos estimadores estatísticos FS, NMSE, FA2 e FB.

Tabela 23: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Kinkaid para os dois cenários 3D-GILTT e GILTTG

Cenário	NMSE	FA2	FB	FS
3D-GILTT	$0,37$	$0,71$	$0,09$	$-0,09$
GILTTG	$0,37$	$0,77$	$0,08$	$-0,15$

Os dois cenários apresentam valores positivos para o estimador estatístico FB, embora para todos os valores de FB sejam próximos de zero, sinalizando assim que as concentrações observadas subestimam as concentrações preditas.
Os valores do estimador estatístico FS são próximos de zero e negativos para os dois cenários indicando que os resultados do método subestimam o espalhamento das concentrações observadas.
A proximidade entre as concentrações observadas e preditas é sinalizada pelos baixos valores encontrados para o estimador estatístico NMSE.
Os valores encontrados para FA2 indicam que a porcentagem das concentrações preditas ficaram entre a metade e o dobro das concentrações observadas, e os valores são em torno de 70%.
Percebe-se que os valores do estimador NMSE são aproximadamente zero para os dois cenários. O estimadore FA2 tem valores mais próximos de 1 e estimadores FB e FS são próximos de zero para os dois cenários, indicando assim a perspectiva de uma boa performance do método para os dois cenários utilizados na predição das concentrações do hexafluoreto de enxofre (HANNA; PAINE, 1989; PIMENTEL-GOMES, 2009).
Na tabela 24 estão descritos os resultados dos novos estimadores estatísticos propostos.

Tabela 24: Utilizando os dados de concentrações observados (C_o) e os dados de concentrações preditas (C_p) do experimento de Kinkaid, como sugestão de novos estimadores, para os dois cenários 3D-GILTT e GILTTG

Estimadores	3D-GILTT	GILTTG
$MNSE_{min}$	$0,01$	$-$
MG	$1,18$	$1,18$
VG	$1,65$	$1,90$
FB_{fn}	$0,26$	$0,25$
FB_{fp}	$0,17$	$0,16$
$FB_{fn} - FB_{fp}$	$0,09$	$0,08$
$FB_{fn} + FB_{fp}$	$0,44$	$0,41$
NSD	$1,10$	$1,16$
$NRMSE$	$0,61$	$0,87$

Os valores de MG próximos de 1 indicando assim que os modelos apresentam um baixo desvio médio relativo, ou seja, que não existem grandes erros sistemáticos nos modelos.

Para os valores de VG estão um pouco afastados do valor 1, sendo assim os cenários apresentam uma grande dispersão dos valores e que os cenários apresentam erros sistemáticos ou aleatórios.

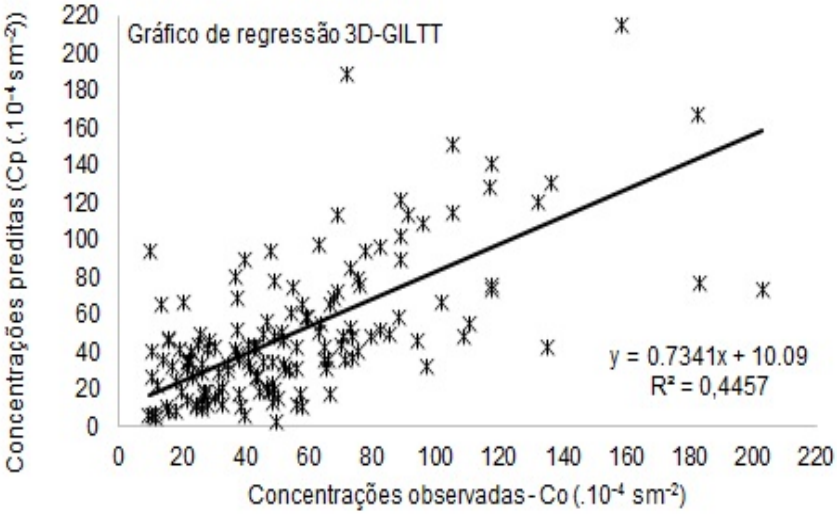
Os índices NSD apresentam valores próximos de 1 indicando que a variação dos valores não estão muito distantes do valor da média do conjunto, ou seja, que são poucos os erros aleatórios.

Os valores do estimador NRMSE não são próximos de zero, indicando que existem erros aleatórios.

Ao avaliarmos simultaneamente os estimadores R, NRSME e NSD, atendendo aos parâmetros ideais, nos levam a uma maior confiabilidade na avaliação do método para os cenários. Dessa forma, ao fazermos uma análise simultânea não podemos garantir nada.

Nas figuras 18 e 19 são demonstrados os resultados da análise estatística dos dados referentes ao método GILTT dos experimentos de Hanford, com os dados observados e preditos pelo método.

Os gráficos de regressão para o experimento de Kinkaid podem ser observados na figura 22.



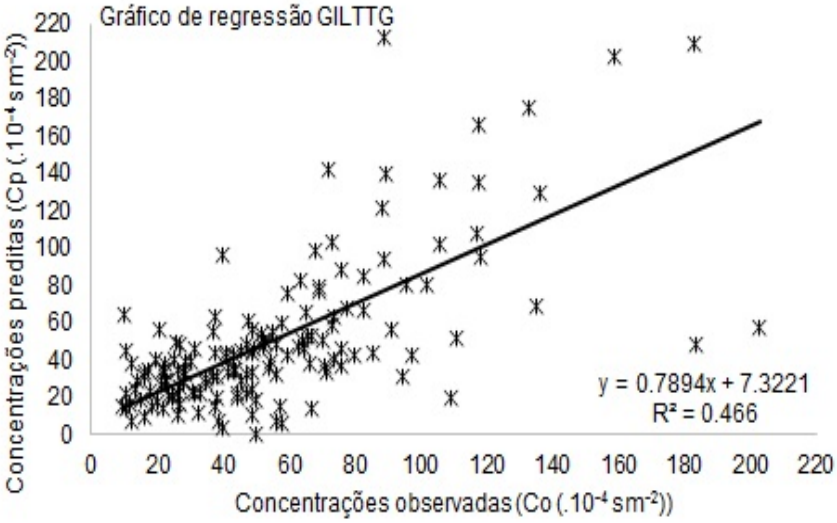


Figura 22: Gráficos de regressão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários.

Na figura 23 são demonstrados os resultados da análise estatística dos dados referentes aos dois cenários do experimento de Kinkaid, com os dados observados e preditos pelo método, através de gráficos *box-plot*.

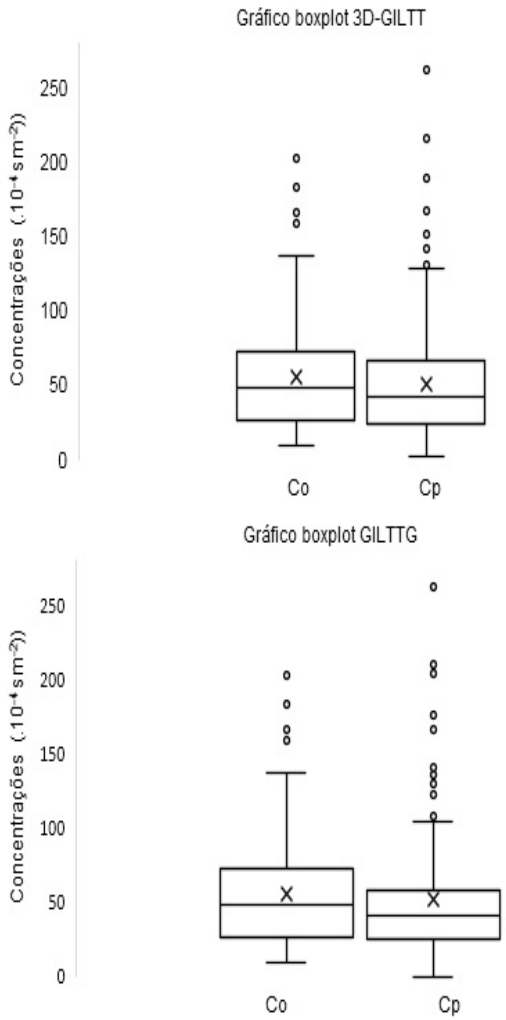


Figura 23: Gráfico box plot referente aos dados de Kinkaid observados e preditos pelo método GILTT.

Com a análise estatística do conjunto de dados busca-se descrever sobre o grau de posição e variação entre os valores preditos e os dados que de fato foram observados.

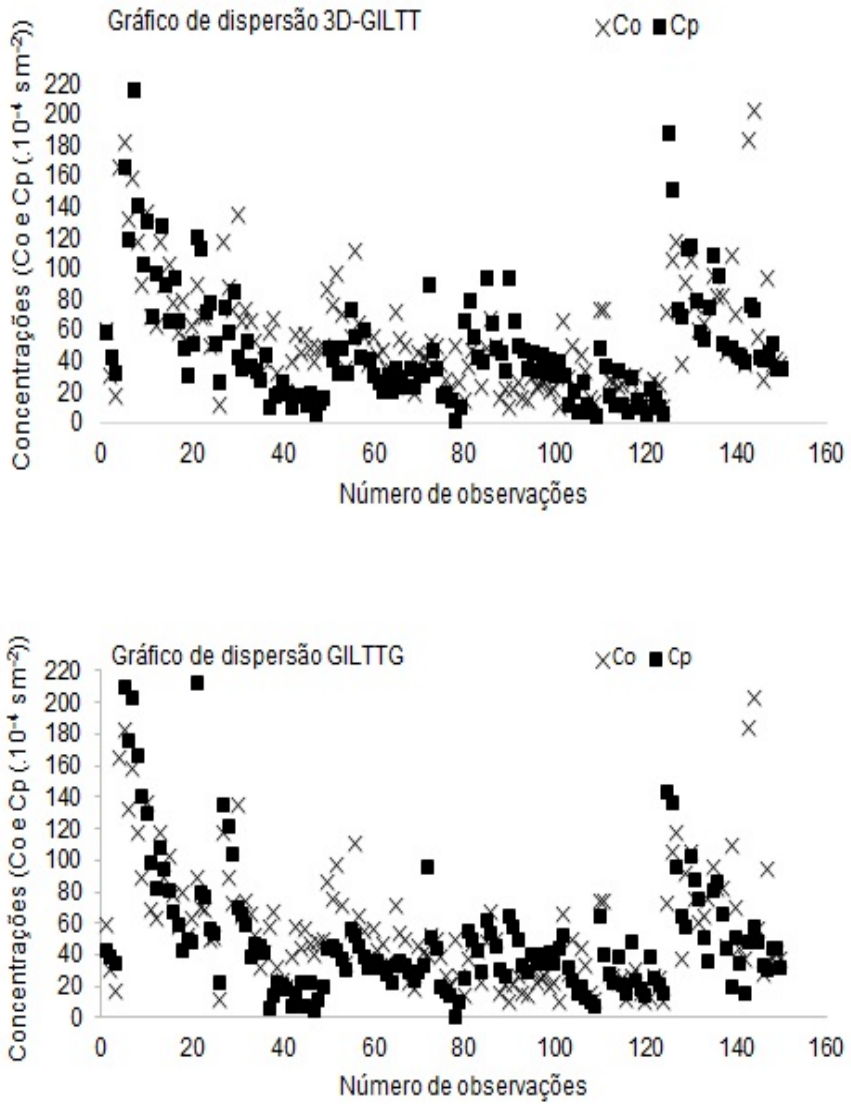


Figura 24: Dispersão dos dados observados (C_o) e preditos (C_p) nos dois cenários.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O método utilizado mostrou-se capaz de representar adequadamente a distribuição de concentrações quando o escoamento na CLA é governado por forçantes térmicos ou mecânicos, simulando a dispersão de poluentes atmosféricos mesmo quando considerada a complexidade do terreno, ou seja, diversos cenários de poluição atmosférica podem ser simulados com este método, independente da topografia mais ou menos complexa.

Ao compararmos os cenários bidimensionais do experimento de Copenhagen, via estimadores estatísticos, verificou-se que o cenário GILTT-1 apresentou melhores resultados.

Na comparação entre os quatro cenários bidimensionais do experimento de Hanford através de estimadores estatísticos, levando em consideração apenas a dimensão o cenário GILTT-I apresentou melhores resultados. Comparando apenas os cenários com deposição de poluentes atmosféricos o cenário GILTT-I apresentou melhores resultados, enquanto os melhores resultados na comparação dos cenários sem deposição de poluentes atmosféricos foram os do cenário GILTT-II. Quando comparamos os cenários de acordo com a dependência do tempo ou não dependência do tempo, o cenário estacionário GILTT-I apresentou os melhores resultados e o cenário transiente com melhores resultados foi o GILTT-III.

Comparou-se ainda todos os cenários bidimensionais, os dois cenários de Copenhagen e os quatro cenários de Hanford, o que apresentou os melhores resultados foi o cenário bidimensional GILTT-1 do experimento de Copenhagen. Na comparação dos cenários tridimensionais do experimento de Copenhagen, o cenário GILTT-4 apresentou melhor ajuste.

Comparou-se os dois cenários tridimensionais do experimento de Kinkaid e verificou-se que o que apresentou melhores resultados foi o 3D-GILTT. Ao compararmos todos os cenários tridimensionais, os dois do experimento de Copenhagen e os dois do experimento de Kinkaid, observou-se que o GILTT-4 do experimento de Copenhagen foi o que apresentou melhor ajuste.

Pode-se, dessa forma, afirmar que tanto para os cenários bidimensionais quanto para

os cenários tridimensionais, os do experimento de Copenhagen foram os que apresentaram os resultados para as concentrações preditas mais próximos das concentrações observadas, após a comparação de acordo com as dimensões. No entanto, essa afirmação sobre os resultados dos experimentos, tanto bidimensionais quanto tridimensionais, pode estar relacionada ao experimento realmente ser o que melhor se condiciona ao método, porém não podemos descartar a possibilidade de haver diferença, seja entre os materiais de coleta dos diferentes experimentos, a altura da fonte ou algum outro fator que possa interferir nos resultados para cenários com as mesmas características, entendendo-se que não há erro de mensuração.

REFERÊNCIAS

ALVES, L. S.; COTTA, R. M.; PONTES, J. Stability analysis of natural convection in porous cavities through integral transforms. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.45, p.1185–1195, 2002.

ARYA, P. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. **Journal Meteorological Applications**, v.34, p.1112–1122, 1995.

ARYA, S. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. New York, USA Oxford University Press, 1999.

ARYA, S. P. **Introduction to Micrometeorology**. Academic Press, 2001.

BERLYAND, M. Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere. **Translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA**, 1975.

BOTKIN, D.; KELLER, E. **Earth as a living planet**. New York John Wiley, 1995.

BOUBEL, R.; FOX, D.; TURNER, D.; STERN, A. **Fundamentals of Air Pollution**. 3 ed., New York Academic Press, 1994. 323 p.p.

BRIGGS, G. A. Plume rise predictions, Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses. **Amer. Meteor. Soc.**, p.59–111, 1975.

BRUSASCA, G.; TINARELLI, G.; ANFOSSI, D. Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions. **Atmospheric Environment**, v.26,n.4, p.707–723, 1992.

BUSKE, D. **Solução analítica da equação de difusão-advecção pelo método GILTT aplicada à dispersão de poluentes atmosféricos**. 2004. Dissertação de mestrado — Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

BUSKE, D.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T. An unsteady two-dimensional analytical solution for the modeling of air pollution dispersion and turbulent dry deposition. **19th International Congress of Mechanical Engineering**, 2007b.

BUSKE, D.; QUADROS, R.; VILHENA, M.; MOREIRA, D. Simulação analítica da dispersão analítica de poluentes atmosféricos tridimensional. **Revista Ciência e Natura**, p.29–32, 2009a.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. A 3D analytical solution of the advection-diffusion equation applied to pollutant dispersion in atmosphere. **Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 2009b.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BODMANN, B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. **Journal of Environmental Protection**, v.3, n.09, p.1124, 2012.

CARVALHO, D. L. **Um estudo numÃ©rico da dispersÃ$o de poluentes na camada limite convectiva**. 1996. DissertaÃ§Ã$o de Mestrado — Mestrado em Meteorologia, USP, SÃ$o Paulo.

CARVALHO, J. **Estudo dos processos de transporte e difusÃ$o na camada limite planetÃ¡ria utilizando os modelos RAMS e SPRAY**: AplicaÃ§Ã$o ao caso do experimento TRACT. 1999. Tese de doutorado — IAG-USP, SÃ$o Paulo.

CATALANO, G. An analytical solution to the turbulent diffusion equation with mean vertical wind. **southeastern Sem. Thermal**, v.103, p.143–151, 1982.

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

CHEROTO, S.; MIKHAILOV, M. D.; KAKA, C.; COTTA, R. Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms. **International Journal of Thermal Sciences**, v.38, p.613–621, 1999.

CHRYSIKOPOULOS, C.; HILDEMANN, L. M.; ROBERTS, P. V. A threedimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground level area source. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.747–757, 1992.

CIRILLO, M. C.; POLI, A. A. An inter comparison of semi empirical diffusion models under low wind speed, stable conditions. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.765–774, 1992.

CORREA, S. M. B. B. **Probabilidade e Estatística**. Belo Horizonte, MG PUC Minas Virtual, 2003. v.2.

COSTA, C. P.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T. **A Closed-Form Formulation for Pollutant Dispersion in the Atmosphere**. Birkhauser, Boston Integral Methods in Science and Engineering: Computational Methods, Organized by: C. Constanda; M. E. Pérez, 2010. v.2, p.141–150.

COSTA, C. P.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere. **Journal of Engineering Mathematics**, v.74, p.159–173, 2012.

COSTA, C.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.40,n29, p.5659–5669, 2006.

COSTA, G. G. O. **Curso de Estatística**. Atlas, 2015.

COTTA, R. M. **Integral transforms in computational heat and fluid flow**. Boca Raton, Florida CRC Press, 1993.

COTTA, R.; MIKHAYLOV, M. **Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. Baffins Lane, Chinchester, England John Wiley & Sons, 1997.

DEGRAZIA, G. A.; MANGIA, C.; RIZZA, U. A comparison between different methods to estimate the lateral dispersion parameter under convective conditions. **Journal of Applied Meteorology**, v.37, p.227–231, 1998.

DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.34, p.3575–3583, 2000.

DEGRAZIA, G. e. a. A Lagrangian decorrelation time scale for non-homogeneous turbulence. **Boundary-Layer Meteorology**, v.86, p.525–534, 1998.

DEMETRIUS, L. Adaptative value, entropy and survivorship curve. **Nature**, v.275, p.213–214, 1978.

DEMUTH, C. A. Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1255–1258, 1978.

DORAN, J. C.; HORST, T. W. An evaluation of Gaussian plume depletion models with dual-tracer field measurements. **Atmospheric Environment**, v.19, p.939–951, 1985.

DRIEDONKS, A. G.; TENNEKES, H. Entrainment effects in the well-mixed atmospheric boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.30, p.75–105, 1984.

EPA. **ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Diversos documentos**.

EPSTEIN, M. **Estudo de Impacto Ambiental e Relatório de Impacto Ambiental da Unidade Jorge Lacerda IV**. Porto Alegre: FUNDATEC American Meteo. Soc., Eds. F.T.M. Nieuwstadt and H. van Dop, Eds., Reidel, 1996.

GARRAT, J. **The Atmospheric Boundary Layer**. Cambridge , 1994.

GODISH, T. **Air quality**. Lewis 2 ed. Chelsea, 1991.

GRYNING, S. E. **Elevated source $SF6$ - tracer dispersion experiments in the Copenhagen area**. Roskilde, Denmark Risoc National Laboratory, 1981. Report. (RISOE-R-446).

GRYNING, S. E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, v.23, n.4, p.651–660, 1984.

GRYNING, S.; HOLTSLAG, A.; IRWING, J.; SILVERSTEN, B. Applied dispersion modelling based on meteorological scaling parameters. **Atmospheric Environment**, v.21(1), p.79–89, 1987.

HANNA, S.; PAINE, R. J. Hibrid plume dispersion model (HPDM) development and evaluation. **Journal of Applied Meteorology**, v.28, p.206–224, 1989.

HOJSTRUP, J. Velocity spectra in the unstable boundary layer. **Journal of Amospheric Sciences**, v.39, p.2239–2248, 1982.

HOLTSLAG, A. A. M.; NIEWSTADT, F. Scaling the Atmospheric Boundary Layer. **Boundary Layer Meteorology**, v.36, p.201–209, 1986.

IPCC. **INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE**.

IRWIN, J. S. A theorical variation of the wind profile power-low exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment**, v.13, p.191–194, 1979.

KOCH, W. A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1729–1732, 1989.

LAMB, R. **Diffusion in the convective boundary layer. In**: Lectures in Atmospheric turbulent and air pollution modeling. Boston American Meteo. Soc., Eds. F.T.M. Nieuwstadt and H. van Dop, Eds., Reidel, 1982. 159-229p.

LAMB, R. G. A numerical study of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1297–1304, 1978.

LAMB, R. G. **Diffusion in the convective boundary layer**. Reidel, Boston Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling, Editted by F.T.M. Nieuwstadt and H. Van Dop, 1982. p.159–229.

LIU, C.; SZECSODY, J.; ZACHARA, J.; BALL, W. Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. **Advances in Water Resouces**, v.23, p.483–492, 2000.

MACEDO, E. N.; MANESCHY, C. E.; QUARESMA, J. N. Forced convection in termally developing turbulent flow of drag-reducing fluids within circular pipes. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.43, p.3785–3794, 2000.

MAGNO, R. N.; MACEDO, E. N.; QUARESMA, J. N. Solutions for the internal boundary layer equations in simultaneously developing flow os power-law fluids within parallel plates channels. **Chemical Engineering Journal**, v.87, p.339–350, 2002.

MANGIA, C.; MOREIRA, D. M.; SCHIPA, I.; DEGRAZIA, G. A.; TIRABASSI, T.; RIZZA, U. Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.67–76, 2002.

MIKHAYLOV, M.; OZISIK, M. **Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**. New York John Wiley & Sons, 1984.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D. **On the GILTT Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer**. CRC Press, Boca Raton - Flórida Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications, Organized by: D. Moreira; M. Vilhena, 2009. v.1, p.179–202.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, C. A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant. **Ecological Modelling**, v.189, n.3-4, p.413–424, 2005.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; COSTA, C.; BODMANN, B. Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. **Water, Air and Soil Pollutio**, v.177, p.411–439, 2006.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL. **Atmospheric Environment**, v.40, n.17, p.3186–3194, 2006.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, n.1, p.1–17, 2009a.

NIEUWSTADT, F. T. M. An analytical solution of the time-dependent, onedimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.14, p.1361–1364, 1980.

NIEUWSTADT, F. T. M.; HAAN, B. J. An analytical solution of the onedimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation. **Atmospheric Environment**, v.15, p.845–851, 1981.

NIEUWSTADT, F. T. M.; VAN ULDEN, A. P. A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2119–2124, 1978.

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

ÖZISIK, M. **Heat Conduction**. 2.ed. New York John Wiley & Sons, 1974.

PANOFSKY, H. A.; DUTTON, J. A. **Atmospheric Turbulence**. New York John Wiley & Sons, 1984.

PASQUILL, F.; SMITH, F. **Atmosferic Diffusion**. New York 3 ed Halsted Press, 1983.

PEREIRA, L. M.; GUERRERO, J. S.; BRAZÃO, N.; COTTA, R. M. Compressible flow and heat transfer in ultracentrifuges hybrid analysis via integral transforms. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.45, p.99–112, 2002.

PIMENTEL-GOMES, F. **Curso de Estatística Experimental**. Piracicaba , 2009. 451p. v.15.

RIBEIRO, M.; FERREIRA, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Efeito do mecanismo de reação química sobre o transporte de contaminantes na região da camada limite atmosférica. **Proceedings do XII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2002.

ROBERTS, O. F. T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. **Proceedings of the Royal Society of London**, v.104, p.640–648, 1923.

SCHUCH, D.; WEYMAR, G. J.; FURTADO, I.; QUADROS, R. S.; BUSKE, D. Simulação da dispersão de poluentes na camada limite atmosférica incluindo o efeito da deposição seca no solo. **Revista Ciência e Natura**, v.1, p.127–130, 2011.

SCRIVEN, R. A.; FISHER, B. A. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II - The efect of turbulent diffusion. **Atmospheric Environment**, v.9, p.59–69, 1975.

SEINFELD, J. **Atmospheric chemistry and physics of air pollution**. 1 ed. New York Wiley, 1994. 738 p.p.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K. A mathematical model for the dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmospheric Environment**, v.30, p.1137–1145, 1996a.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K.; AGARWAL, P.; NIGAM, S. A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions. **Atmospheric Environment**, v.30, p.1209–1220, 1996b.

SILVA, J. G. C. da. Estatística Básica. **Versão Preliminar**, p.811–827, 2004.

SMITH, F. B. Convection-diffusion processes below a stable layer. **Meteorological Research Committee**, v.Technical Report 1048, 1957a.

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo eulariano de dispersÃ$o de poluentes atmosfÃ©ricos via GITT e modelos algÃ©bricos para os fluxos turbulentos. **Revista CiÃªncia e Natura**, p.103–106, 2003.

STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Dordrecht, Holanda Kluwer Academic Publishers, 1988.

TENNEKES, H.; BLACKADAR, A. H. Assymptotic similarity in neutral barotropic boundary layers. **Journal of Atmospheric Sciences**, v.25, p.1015–1020, 1968.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. An analytical model for a screen evaluation of the enviromental impact from a single point source. **Il Nuovo Cimento**, v.15c, p.181–190, 1992.

ULKE, A. G. New turbulent parameterisation for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.34, p.1029–1042, 2000.

VAN DYKE, M. D. **Perturbation methods in fluid mechanics**. Academic Press, 1964.

VAN ULDEN, A. P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2125–2129, 1978.

VELLOSO, M.; BARBARIOLI, A.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo computacional para estudo do efeito do mecanismo de deposiçã sobre a dispersã de poluentes atmosféricos. **Revista Ciência e Natura**, 2003.

VILHENA, M.; COSTA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. A semianalytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Atmospheric Research**, v.1, p.63–69, 2009.

VILHENA, M.; RIZZA, U.; DEGRAZIA, G.; MANGIA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. An analytical air pollution model: Development and evalution. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315–320, 1998.

VILHENA, M. T.; BODMANN, B.; BUSKE, D.; RIZZA, U. **On an analytical model for the radioactive contaminant release in the atmosphere from nuclear power plants**. INTECH Open Access Publisher, 2012.

WEIL, J. C.; BROWER, R. P. An update gaussian plume model for tall stacks. **JAPCA**, v.34, p.818–827, 1984.

WORTMANN, S.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D.; BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, n.12, p.2171–2178, 2005.

WYNGAARD, J. C. **Atmospheric turbulence and air pollution modelling**. D. Reidel Publishing, 1981.

YEH, G.; HUANG, C. Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere. **Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere**, v.9, p.381–390, 1975.

ZANNETTI, P. **Air Pollution Modeling**. 1 ed. New York Van Nostrand, Reinhold, 1990. 568 p.p.

ZILITINKEVICH, S. S. On the determination of the height of the Ekman boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.3, p.141–145, 1972.

Revista de Informática Aplicada, Volume 12, Número 1, 2016

03

Caracterização de Modelos para a Predição de Poluentes Atmosféricos

Jorge L. B. Ribes1

Maicon Nardino2

Elisia R. Corrêa3

Régis S. Quadros4

Willian S. Barros5

Daniela Buske6

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat - UFPel)

Pelotas – RS – Brasil

Resumo:

O objetivo do trabalho baseia-se na análise estatística dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão utilizando-se a combinação da Transformada de Laplace e da técnica GILTT. Os resultados obtidos por quatro modelos, utilizando os dados do experimento de Copenhagen, foram analisados. As análises estatísticas realizadas mostram que o modelo proposto é eficaz para a predição da concentração de poluentes utilizando o conjunto de dados do experimento de Copenhagen.

Abstract:

The objective of this study is based on statistical analysis of results obtained in the analytical development of the advection-diffusion equations using the combination of the Laplace transform and GILTT technique. The results obtained by four different models, using the Copenhagen experimental data, were analyzed. The performed statistical analyzes show that the proposed model is able to predict the concentration of pollutants using the Copenhagen experiment data set.

1. jlbribes@gmail.com
2. nardinomn@gmail.com,
3. elisiarc@hotmail.com
4. regisquadros@gmail.com
5. willianbarros@gmail.com
6. danielabuske@gmail.com

1 Introdução

Nossa atenção e percepção de que o planeta Terra enfrenta uma crise ambiental sem precedentes, que afeta a sobrevivência da humanidade, é muito recente e entrou no debate internacional mais efetivamente nas últimas décadas do século passado. Uma evolução sustentável implica numa gestão de responsabilidade socioambiental.

Em relação ao controle da poluição atmosférica em escala local ou regional geralmente se utiliza as redes de monitoramento da qualidade do ar. Esta rede constitui um instrumento útil para a segurança da saúde humana e do ambiente, e permite analisar o benefício de ações de saneamento e predispor intervenções específicas no caso de acontecer superação dos níveis do limiar estabelecido pela legislação (MOREIRA; TIRABASSI, 2004).

Na prática a gestão da qualidade do ar pode ser muito comprometida, pois o número de pontos de medida do monitoramento é limitado, além disso, a sua disposição espacial, pode não ter sido estudada detalhadamente e corre-se o risco de terem sido posicionadas em locais pouco representativos. Diante destes fatos, os modelos matemáticos que simulam o transporte e a difusão dos poluentes na atmosfera constituem uma opção importante para auxiliar as medidas de concentrações e prever a sua evolução. Assim, a utilização da modelagem matemática dos fenômenos de dispersão de poluentes produz um ganho significativo na qualidade na gestão da poluição atmosférica.

Diante disso, vários pesquisadores foram estimulados no desenvolvimento de modelos destes fenômenos de dispersão de poluentes. O grande desafio tem sido desenvolver e comparar os modelos que produzam resultados eficazes na estimação do nível de concentração de poluentes na atmosfera provenientes das inúmeras fontes de emissão, tanto antropogênicas como naturais.

Este trabalho baseia-se na comparação de modelos, por métodos estatísticos e análise estatística, dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão utilizando-se a combinação da Transformada de Laplace e da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Esta técnica compreende os seguintes passos para a resolução de um problema bidimensional estacionário, por exemplo: solução de um problema associado de Sturm-Liouville, expansão da concentração de poluentes em uma série em termos das autofunções, substituição desta expansão na equação de difusão-advecção e finalmente tomar momentos. Esse procedimento nos leva a um conjunto de equações diferenciais ordinárias chamadas de problema transformado. O problema transformado é resolvido pela técnica da Transformada de Laplace e diagonalização (WORTMANN et al., 2005). A técnica GILTT é um método totalmente analítico, no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo da sua derivação exceto pelo erro de truncamento.

A modelagem do problema se dá na Camada Limite Planetária (CLP) que é definida como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela superfície terrestre e responde aos forçantes superficiais com uma escala de tempo inferior a uma hora, efetuando-se uma análise estatística dos resultados. Aplicaremos alguns conceitos estatísticos de acordo com os resultados encontrados pré-conhecidos na literatura e encontrados em (MOREIRA ET AL., 2009; BUSKE et al., 2012).

Os resultados foram gerados pela solução analítica da equação de advecção-difusão do tipo: bidimensional estacionário, bidimensional transiente, tridimensional considerando uma Gaussiana na direção transversal e, tridimensional totalmente analítico, utilizando os dados do experimento de Copenhagen (GRYNING; LICK, 1984; GRYNING et al., 1987).

A partir dos dados obtidos, além da análise pela técnica GILTT, serão realizadas análises dos estimadores erro quadrático médio normalizado (NMSE), coeficiente de correlação (COR), desvio fracional padrão (*FB*), fração de inclinação (*FS*), além de média, variância, desvio padrão, com a avaliação dos modelos com relação aos estimadores estatísticos analisados. Foi realizado ainda a análise estatística com base na análise da variância dos resíduos entre os valores observados e preditos pelos modelos.

A estatística descritiva compreende o conjunto dos métodos estatísticos para resumir e descrever as características proeminentes de conjuntos de dados referentes a observações de fenômenos particulares de uma classe de fenômenos. Nesse sentido, ela inclui a condensação de dados em forma de tabelas, sua representação gráfica e a determinação de indicadores numéricos de centro e de variabilidade (DA SILVA, 2004; PIMENTEL-GOMES, 2009).

A propriedade da estatística da entropia é interpretada como uma medida do grau de heterogeneidade do conjunto de dados observados e preditos de um sistema. A análise estatística através do uso da entropia permite uma interpretação da desordem dos elementos presentes nos modelos matemáticos, quanto mais próximo de zero (0) melhor o modelo prediz os valores observados (DEMÉTRIUS, 1978).

O presente artigo é uma versão estendida do artigo publicado por (NARDINO et al., 2016) no WCAMA de 2016. Neste presente trabalho foram incorporadas novas análises estatísticas dos dados, visando o aumento da acurácia dos resultados apresentados conforme a predição dos modelos GILTT. O artigo traz resultados referentes a estatística da entropia, como medida para verificação da heterogeneidade dos modelos GILTT, gráficos *box plot* para a discussão das estatísticas descritivas e análise de regressão, para verificação do ajuste entre os dados preditos e observados.

O presente artigo teve por objetivo de aplicar as medidas descritivas e efetuar o cálculo da entropia para verificar o grau de distorção entre os dados observados e preditos por quatro modelos matemáticos.

2 Modelagem

2.1 Modelagem Matemática

A equação de advecção-difusão da poluição do ar é uma representação da conservação de massa na atmosfera. Assumindo um fechamento Fickiano da turbulência, a equação de advecção-difusão pode ser escrita como (Buske, 2008):

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\bar{u}\frac{\partial c}{\partial x}+\bar{v}\frac{\partial c}{\partial y}+\bar{w}\frac{\partial c}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)+S \quad (1)$$

onde, representa a concentração média do poluente em g/m3, , , representam as componentes do vento médio em m/s nas direções *x*, *y* e *z*, respectivamente, *Kx*, *Ky* e *Kz* são as componentes cartesianas do coeficiente de difusão nas direções *x*, *y* e *z*, respectivamente e *S* é o termo fonte. Na primeira ordem de fechamento, todas as informações sobre a turbulência do processo estão contidas nos coeficientes de difusividade turbulenta.

A equação (1) está sujeita as condições de contorno de fluxo nulo nos contornos:

$$K_x\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}=0 \text{ em } x=0 \text{ e } x=L_x \quad (2)$$

$$K_y\frac{\partial \bar{c}}{\partial y}=0 \text{ em } y=0 \text{ e } x=L_y \quad (3)$$

$$K_x\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}=0 \text{ em } z=0 \text{ e } x=L_z \quad (4)$$

É considerado que a atmosfera está limpa no tempo inicial, ou seja, . A condição de fonte é representada por, onde é a taxa de emissão em g/s, a altura da CLP em metros, é a altura da fonte em metros, e são as distâncias longe da fonte e representa a função delta de Dirac.

A solução do problema é obtida aplicando-se a técnica da transformada integral na variável ***y***, transformando o problema 3D em um problema 2D resolvido em (Buske et al., 2012). Aplicando a transformada de Laplace na variável temporal, obtemos um problema estacionário, cuja solução é encontrada pelo método GILTT (Moreira et al., 2009).

2.2 Análises dos resultados dos modelos por métodos estatísticos

As análises estatísticas foram realizadas com intuito de verificar o comportamento do conjunto de dados observados e preditos pelos quatro modelos GILTT, neste sentido foram aplicados medidas estatísticas descritivas.

Quanto às medidas de dispersão (variância, desvio padrão), estas indicam a distância que os valores se encontram da média e o quanto de variação o conjunto possui. O desvio padrão e a variância são dados, respectivamente por:

$$S^2=\frac{\sum_1^n(x_i-\bar{x})^2}{n-1} \quad (5)$$

$$S=\sqrt{\frac{\sum_1^n(x_i-\bar{x})^2}{n-1}} \quad (6)$$

Ainda, o coeficiente de variação, indica em termos percentuais, qual a variação dos dados, e é dado por:

$$CV=\frac{S}{\bar{x}}\ x100 \quad (7)$$

Erro quadrático médio normalizado (NMSE), é a média quadrática da diferença entre os valores observados (Co) e preditos (Cp) que quando normalizado apresenta valores de 0 a 1. Tendo os menores erros os valores próximos a zero. Dado por:

$$\frac{(C_o - C_p)^2}{\overline{C_o}\,\overline{C_p}} \quad (8)$$

Coeficiente de Correlação (COR), revela a medida da intensidade da relação linear entre duas variáveis, o valor mais próximo a 1 na relação de Co e Cp maior é o grau de ajuste linear entre os conjuntos. O coeficiente é estimado em razão da covariância entre os valores observados e preditos, e divido pela multiplicação dos respectivos desvios.

$$\frac{(\mathrm{cov}_{Cop})}{\sqrt{\sigma_o^2\,\sigma_p^2}} \quad (9)$$

Fator de dois (FA2), valores apresentam uma variação dentro do intervalo: $0.5 \leq \ \leq 2$. Quanto mais próximo de 1, mais próximos estão os dados. É dado por:

$$\frac{\overline{C_p}}{\overline{C_o}} \quad (10)$$

Desvio fracional padrão (FS), informa a tendência do modelo de predição de subestimar e sobreestimar os valores preditos. sendo, que valor ótimo é zero.

$$\frac{2(\sigma_o - \sigma_p)}{(\sigma_o + \sigma_p)} \quad (11)$$

Fração de inclinação (FB), que indica a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero. É dado por:

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

O cálculo da entropia foi realizado utilizando-se a variância dos resíduos entre os dados observados e preditos, pressupondo que os resíduos assumem distribuição normal. A entropia foi estimada pela equação 13:

$$\frac{1}{2}\ln(2\sigma^2\pi e) \quad (13)$$

As análises estatísticas foram realizadas no programa computacional R (2015).

3 Resultados e Discussões

Os dados observados e preditos pelos modelos GILTT estão dispostos na Tabela 1. Foram utilizados os dados de concentração integrados lateralmente para a equação bidimensional estacionária (aqui denominado GILTT-1), dados com uma maior resolução temporal para a equação bidimensional transiente (aqui denominado GILTT-2), dados tridimensionais para a equação tridimensional estacionária que aqui é resolvida assumindo-se que em ***y*** tem-se uma distribuição Gaussiana da pluma como em (MOREIRA et al., 2009) (aqui denominado GILTT-3) e dados tridimensionais do modelo tridimensional analítico (aqui denominado GILTT-4). Podemos observar da Tabela 1 que o modelo GILTT descreve satisfatoriamente os dados observados no experimento de Copenhagen.

Na análise do modelo GILTT-1 para o conjunto de dados observados e preditos as medianas foram de 4.65 e 3.25 em .10-4sm-2. Com relação aos quartis, no primeiro conjunto de dados, verifica-se que o primeiro quartil tem valores 3.27 (.10-4sm-2) para os valores observados e 2.31 (.10-4sm-2) para os valores preditos, ou seja, 25% dos valores estão abaixo desses valores e que 75% deles estão acima, enquanto o terceiro quartil tem valores 6.84 e 5.84 (.10-4sm-2) para os valores observados e preditos, respectivamente.

Para o modelo GILTT-2 os valores das medianas para os dados observados e preditos foram 4.10 e 3.76 (.10-4sm-2). Tem-se no segundo conjunto de dados os valores 2.56 e 2.31 (.10-4sm-2) para o primeiro quartil para os dados observados e preditos, respectivamente e os valores 5.53 e 6.22 (.10-4sm-2) respectivamente, para os dados observados e preditos, para o terceiro quartil.

Com relação ao terceiro e quarto conjunto de dados no modelo GILTT-3 e GILTT-4 para os valores observados e preditos os valores das medianas foram 4.53 e 2.83 (.10-4sm-2). Para os quartis os valores foram de 2.38 e 2.14 (.10-4sm-2) para o primeiro quartil e 5.43 e 7.95 (.10-4sm-2) para o terceiro quartil.

Tabela 1 - Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão (.10-4sm-2), onde Cp são os dados preditos pelos modelos e Co representa as concentrações observadas experimentalmente.

Dados Co1	GILTT-1 Cp1	Dados Co2	GILTT-2 Cp2	Dados Co3	GILTT-3 Cp3	Dados Co4	GILTT-3 Cp4
6,48	6,84	6,48	5,53	10,5	4,53	10,5	12,22
2,31	3,97	2,31	3,4	2,14	1,7	2,14	4,25
5,38	4,65	5,38	3,46	9,85	5,41	9,85	8,23
2,95	3,05	2,95	2,47	2,83	2,12	2,83	2,86
8,2	8,14	8,2	7,47	16,33	8,83	16,33	16,49
6,22	5,19	6,22	4,78	7,95	3,68	7,95	5,66
4,3	3,98	4,3	3,77	3,76	2,26	3,76	3,29
11,66	9,24	11,66	9,02	15,71	14,3	15,71	10,44
6,72	8,58	6,72	8,98	12,11	17,69	12,11	16,24
5,84	6,71	5,84	6,31	7,24	8,55	7,24	7,09
4,97	5,39	4,97	5,04	4,75	5,43	4,75	3,96
3,96	3,51	-	-	7,44	5,75	7,44	6,80
2,22	2,5	-	-	3,37	2,38	3,37	2,39
1,83	1,98	-	-	1,74	1,5	1,74	1,49
6,7	4,67	6,7	3,53	9,48	4,25	9,48	8,66
3,25	2,76	3,25	2,37	2,62	1,53	2,62	2,67
2,23	2,23	2,23	1,95	1,15	1,05	1,15	1,70
4,16	4,83	4,16	4,45	9,76	5,99	9,76	10,04
2,02	3,27	2,02	3,17	2,64	2,75	2,64	4,04
1,52	2,63	1,52	2,56	0,98	1,77	0,98	2,23
4,58	4,45	4,58	3,18	8,52	5,02	8,52	7,83
3,11	2,91	3,11	2,29	2,66	1,95	2,66	2,72
2,59	2,19	2,59	1,8	1,98	1,15	1,98	1,47

Os valores (Tabela 2) para NMSE são aproximadamente zero, COR e FA2 tem valores próximos de 1. FB e FS são próximos de zero, indicando uma boa eficiência dos modelos GILTT, na predição dos valores (HANNA, 1989; PIMENTEL-GOMES, 2009).

Percebe-se também, que os dados observados e preditos possuem valores bastante semelhantes, o que nos remete a ideia da correlação, que demonstra a relação entre os dois conjuntos de dados (observados e preditos). No presente trabalho, remete ao quão próximo estão os resultados do nosso modelo GILTT, com os valores reais observados, as magnitudes das correlações foram consideravelmente elevadas (COR = 0.909) no primeiro conjunto de dados, (COR = 0.848) no segundo, (COR=0,802) terceiro conjunto e (COR = 0,926) no quarto conjunto de dados, que estão muito próximo de 1, garantindo que os dados preditos estão altamente correlacionados com os valores observados. O modelo GILTT de predição pode estimar com bastante precisão o que será observado em coletas futuras, principalmente quando é utilizado o modelo GILTT-4. Os valores para NMSE são baixos, COR e FA2 tem valores próximos de 1 e FB e FS são próximos de zero,

garantindo uma boa performance do modelo utilizado.

Tabela 2 - Avaliação estatística utilizando o experimento de Copenhagen para os quatro modelos GILTT -1, -2, -3 e -4.

	NMSE*	COR	FA2	FB	FS
GILTT -1	0,050	0,909	1,000	-0,005	0,142
GILTT -2	0,090	0,848	1,000	0,107	0,127
GILTT -3	0,330	0,802	0,870	0,281	0,088
GILTT -4	0,070	0,926	0,957	0,019	0,026

*NMSE: erro quadrático médio, COR: coeficiente de correlação, FA2: fator de 2, FB: fator de inclinação e FS: desvio padrão fracional.

Na figura 1 são demonstrados os resultados da análise estatística dos dados referentes aos quatro modelos GILTT dos experimentos de Copenhagen, os quais os dados foram observados, e preditos pelos modelos. Com a análise estatística do conjunto de dados busca-se descrever sobre o grau de posição e variação entre os valores preditos e os dados que de fato foram observados.

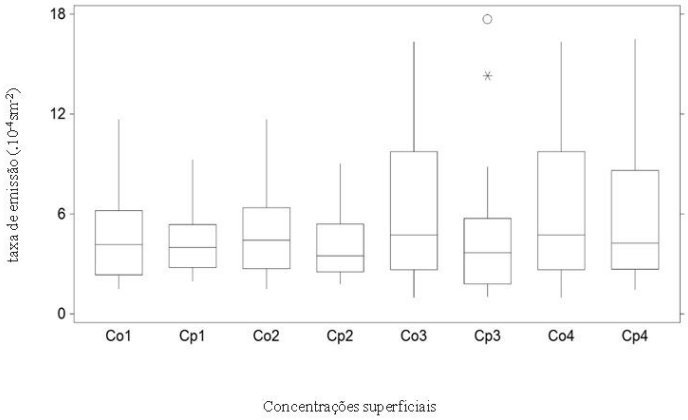


Figura 1. Gráfico box plot referente aos dados de Copenhagen observados e preditos pelos quatro modelos GILTT.

A entropia em estatística se refere a incerteza presente num conjunto de dados. Valores elevados de entropia remetem a presença de maior variabilidade no conjunto de dados, dificultando a obtenção de um modelo o qual melhor se ajusta ao conjunto de dados (Silva, 2014; DEMETRIUS, 1978) . As estatísticas de entropia estimadas foram maiores para os modelos GILTT-3 (2,4493) e GILTT-4 (1,9789), podendo destacar que ocorre maior distorção entre os valores reais e preditos destes modelos (Figura 2), quando comparados com as estatísticas de entropia dos modelos GILTT-1 (1,4403) e GILTT-2 (1,6977) em que esta distorção é reduzida. Porém cabe salientar que para fins de comparação de modelos, estas devem ser realizadas entre os modelos bidimensional e tridimensional, logo a comparação entre os dois modelos bidimensionais indica que o modelo GILTT-1 revelou menor variação que modelo GILTT-2. Na análise comparativa dos modelos tridimensionais o modelo GILTT-4 revelou estimativas de entropia inferiores ao modelo GILTT-3, assim pode-se inferir que a utilização dos modelos GILTT-2 e GILTT-4 são eficientes na predição de poluentes atmosféricos.

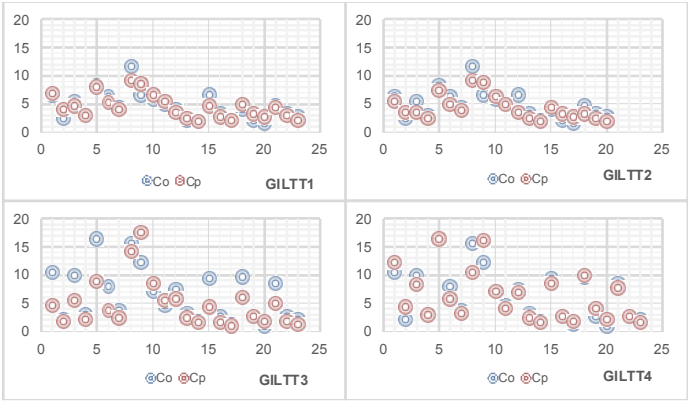


Figura 2 - Dispersão dos dados observados (Co) e preditos (Cp) nos quatro modelos GILTT.

Com relação à Figura 2, que demonstra a dispersão dos dados observados e preditos pelos modelos GILTT, pode-se inferir que para os modelos bidimensionais os ajustes foram semelhantes quanto a dispersão dos dados observados e preditos nos modelos GILTT-1 e GILTT-2. Os modelos GILTT-3 e GILTT-4 relacionados a estrutura de modelos tridimensionais também apresentaram dispersão semelhante entre os valores observados e preditos pelos modelos, mas pode-se inferir que o modelo GILTT-4 demonstrou pouca distorção na predição de valores de componentes da taxa de emissão do poluente hexafluoreto de enxofre em (.10-4sm-2).

4 Conclusões

Nos quatro conjuntos de dados percebe-se que os valores de NMSE, COR, FA2, FS e FB levam-nos a acreditar que o modelo GILTT tem uma boa *performance* e mostrou-se confiável na predição da dispersão de poluentes atmosféricos, o que destaca a grande importância e eficácia no auxílio à prevenção de futuros problemas ligados à dispersão de poluentes na atmosfera. Percebe-se também que os valores observados e preditos apresentaram grande variação para as diferentes

coletas, indicando assim que tais coletas devem ser feitas em locais e horários diferenciados para uma melhor análise geral da dispersão de poluentes atmosféricos.

A estatística da entropia revela que entre os modelos bidimensionais o modelo GILTT-1 apresenta menor variância residual comparativamente ao modelo GILTT-2.

A estatística da entropia revela que entre os modelos tridimensionais o GILTT-4 tem menor variância residual, em comparação ao modelo GILTT-3.

Referências

BUSKE, D. Solução *GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana*: Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2008.

BUSKE, D. et al. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. *Journal of Envir. Protec*, v.4, p.1-10, 2012.

DA SILVA, J. G. C. *Estatística Básica*. Versão preliminar. Universidade Federal de Pelotas-UFPel. Pelotas-RS, 2004.

DEMETRIUS, L. Adaptative value, entropy and survivorship curve. *Nature*, v.275, p. 213–214, 1978.

GRYNING, S. E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison betwenn tracer experiments and model calculations. *Journal of Climate applied Meteorology*, v.23, p. 651-654, 1984.

GRYNING, S. E. et al. Applied dispersion modelling based on metereological scaling parametres. *Atmosferic Environment*, v.21, n.79-89, 1987.

HANNA, S. R. Condence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jacknife resampling methods. *Atmospheric Environment*, v.23, p. 1385-1395, 1989.

MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. *Ambiente & Sociedade*, Campinas, v. 7, n. 2, p. 159-171, 2004.

MOREIRA, D. M. et al. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. *Atmospheric Research*, v.92, p. 1-17, 2009.

NARDINO, M., Ribes, J., Correa, E. R., Quadros, R. S., Barros, W. S., Buske, D. (2016) Caracterização de Modelos para a Predição de Poluentes Atmosféricos. XXXVI Congresso da Sociedade Brasileira de Computação. In: WCAMA - WORKSHOP DE COMPUTAÇÃO APLICADA À GESTÃO DO MEIO AMBIENTE E RECURSOS NATURAIS. 7. 2016. Porto Alegre. *Anais...* Porto Alegre, 2016. p. 1858-1866. ISBN 978-85-7669-322-2.

PIMENTEL-GOMES, F. *Curso de estatística experimental.* Piracicaba, v. 15, p. 451. 2009.

R VERSION 3.2.2. *Fire Safety* Copyright (C) The R Foundation for Statistical Computing, 2015.

WORTMANN, S. et al. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment*. v.39, n.12, p. 2187-2194, 2005.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Uma Análise Estatística de Dados Aplicado ao Estudo da Dispersão de Poluentes Atmosféricos

Jorge Ribes[1]
Willian Barros [2]
Régis Sperotto de Quadros[3]
Daniela Buske [4]
Elisia Rodrigues Corrêa [5]
Maicon Nardino [6]
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat), UFPel, Pelotas, RS

Resumo. Este trabalho baseia-se na análise estatística dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão utilizando-se a combinação da Transformada de Laplace e da técnica GILTT. Os resultados obtidos pelos modelos bidimensional estacionário e transiente e tridimensional aproximado, utilizando os dados do experimento de Copenhagen, foram analisados. As análises estatísticas realizadas mostram que o modelo proposto é eficaz para a predição da concentração de poluentes utilizando o conjunto de dados do experimento de Copenhagen.

Palavras-chave. Advecção-Difusão, GILTT, Dispersão de Poluentes, Modelo Analítico, Análise Estatística

1 Introdução

Nesse trabalho, utiliza-se a solução analítica para a equação de advecção-difusão obtida pelo método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) para os problemas em equações do tipo: bidimensional estacionário, bidimensional transiente e tridimensional (considerando uma Gaussiana na direção transversal). A modelagem do problema se dá na Camada Limite Planetária(CLP) que é definida como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela superfície terrestre e responde aos forçantes superficiais com uma escala de tempo inferior a uma hora, efetuando-se uma análise estatística dos resultados. Aplicaremos alguns conceitos estatísticos de acordo com os resultados encontrados pré conhecidos na literatura [7].

[1]jlbribes@gmail.com
[2]willianbarros@gmail.com
[3]regisquadros@gmail.com, Autor-apresentador
[4]danielabuske@gmail.com
[5]elisiarc@hotmail.com
[6]nardinomn@gmail.com

A técnica GILTT é um método totalmente analítico. Esta técnica compreende os seguintes passos: solução de um problema associado de Sturm-Liouville, expansão da concentração de poluentes em uma série em termos das autofunções, substituição desta expansão na equação de difusão-advecção e finalmente tomar momentos. Esse procedimento nos leva a um conjunto de equações diferenciais ordinárias chamadas de problema transformado. Esse problema é resolvido pela técnica da Transformada de Laplace e diagonalização [10].

A estatística descritiva compreende o conjunto dos métodos estatísticos para resumir e descrever as características proeminentes de conjuntos de dados referentes a observações de fenômenos particulares de uma classe de fenômenos. Nesse sentido, ela inclui a condensação de dados em forma de tabelas, sua representação gráfica e a determinação de indicadores numéricos de centro e de variabilidade [3]. Este trabalho baseia-se na análise estatística dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão utilizando-se a combinação da Transformada de Laplace e da técnica GILTT, descrito acima. Serão apresentados resultados obtidos pelos modelos bidimensional estacionário e transiente e tridimensional aproximado, utilizando os dados do experimento de Copenhagen [4,5].

2 Modelagem Matemática do Problema

A equação de advecção-difusão da poluição do ar é uma representação da conservação de massa na atmosfera. Assumindo um fechamento Fickiano da turbulência, pode-se escrever a equação tridimensional transiente da seguinte forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \overline{u}\frac{\partial c}{\partial x} + \overline{v}\frac{\partial c}{\partial y} + \overline{w}\frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial c}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial c}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial c}{\partial z}\right) + S \qquad (1)$$

onde $c(x, y, z, t)$ representa a concentração média de poluente (g/m^3), $\overline{u}, \overline{v}, \overline{w}$ representam as componentes do vento médio (m/s) nas direções x, y, z, respectivamente, K_x, K_y e K_z são as componentes cartesianas do coeficiente de difusão nas direções x, y, z, respectivamente, S é o termo fonte. Na primeira ordem de fechamento, todas as informações sobre a turbulência do processo estão contidas nos coeficientes de difusividade turbulenta.

A equação (1) está sujeita as condições de contorno de fluxo nulo nos contornos:

$$K_x\frac{\partial \overline{c}}{\partial x} = 0 \ em \ x = 0 \ e \ x = L_x, \qquad (2)$$

$$K_y\frac{\partial \overline{c}}{\partial y} = 0 \ em \ y = 0 \ e \ z = L_y, \qquad (3)$$

$$K_z\frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = 0 \ em \ z = 0 \ e \ z = z_i \qquad (4)$$

É considerado que a atmosfera está limpa no tempo inicial, ie, $c(x, y, z, 0) = 0$.

A condição de fonte é representada por $\overline{u}c(0, y, z, t) = Q\delta(y - y_o)\delta(z - H_s)$, onde Q é a taxa de emissão (g/s), z_i a altura da CLP (m), H_s é a altura da fonte (m), L_x e L_y são distâncias longe da fonte e δ representa a função delta de Dirac.

A solução do problema (1) é obtida aplicando-se a técnica da transformada integral na variável y, transformando o problema $3D$ em um problema $2D$ resolvido em [2]. Aplicando a transformada de Laplace na variável temporal, obtemos um problema estacionário, cuja solução é encontrada pelo método GILTT [7].

3 Resultados e discussões

Os resultados preditos neste trabalho foram obtidos pelo médodo da GILTT à partir de dados coletados em Copenhagen e foi feita uma análise estatística quanto as medidas de posição e dispersão, tais como, média, mediana, desvio padrão, simetria, curtose, variância e coeficiente de variação e uma análise de correlação. Os detalhes do experimento de Copenhagen estão descritos em [1,4,5].

Na Tabela 1 podemos ver as concentrações observadas no experimento e preditas pelo modelo GILTT. Foram utilizados os dados de concentração integrados lateralmente para a equação bidimensional estacionária (aqui denominado GILTT-1), dados com uma maior resolução temporal para a equação bidimensional transiente (aqui denominado GILTT-2), e dados tridimensionais para a equação tridimensional estacionária que aqui é resolvida assumindo-se que em y tem-se uma distribuição Gaussiana da pluma como em [7](aqui denominado GILTT-3).

Na Tabela 2 apresentam-se os resultados dos índices estatísticos, descritos por [6], e definidos como: Erro quadrático médio normalizado ($NMSE$), dado por $\frac{\overline{(C_o-C_p)^2}}{\overline{C_o}\,\overline{C_p}}$ informa sobre todos os desvios das concentrações do modelo e as concentrações observadas. É uma medida adimensional e quanto menor o valor, melhor o modelo. Coeficiente de Correlação (COR), $\frac{\overline{(C_o-\overline{C_o})(C_p-\overline{C_p})}}{\sigma_o\sigma_p}$ Descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. O valor 1 garante uma boa performance. Fator de dois ($FA2$), fração dos dados (% normalizados a 1), que estão entre $0.5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$. Quanto mais próximo de 1, mais próximos estão os dados. Desvio fracional padrão (FS), é dado por $\frac{\sigma_0-\sigma_p}{0{,}5(\sigma_0+\sigma_p)}$. O valor ótimo é zero. Fração de inclinação (FB), é dado por $\frac{\overline{C_o}-\overline{C_p}}{0{,}5(\overline{C_o}+\overline{C_p})}$. Indica a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

Podemos observar das Tabelas 1 e 2 que o modelo GILTT descreve satisfatoriamente os dados observados no experimento de Copenhagen.

A partir de agora serão feitas as análises estatísticas que são o objetivo principal deste artigo.

Analisando a Tabela 3, observam-se algumas propriedades dos dados através resultados estatísticos. Tem-se no primeiro conjunto de dados, no que diz respeito às medidas de tendência central, foram verificadas a média e a mediana. Calculando-se a média encontram-se $\overline{x} = 4.4870$ e $\overline{x} = 4.5074$ para os valores observados e preditos, respectivamente, identificados como C_{o_1} e C_{p_1} para C_{o_2} e C_{p_2}, da mesma forma, tem-se $\overline{x} = 4.7595$ e $\overline{x} = 4.2765$ e ainda $\overline{x} = 6.3265$ e $\overline{x} = 4.7648$, identificados como C_{o_3} e C_{p_3}, estabelecendo-se assim o valor médio de cada conjunto de dados. Encontram-se também as medianas $M_e = 4.65$ e $M_e = 3.25$, $M_e = 4.1$ e $M_e = 3.765$ e $M_e = 4.53$ e $M_e = 2.83$, respectiva-

Tabela 1: Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão ($.10^{-4} sm^{-2}$), onde C_p são os dados preditos pelos modelos e C_o representa as concentrações observadas experimentalmente.

GILTT-1		GILTT-2		GILTT-3	
Dados C_{o_1}	Dados C_{p_1}	Dados C_{o_2}	Dados C_{p_2}	Dados C_{o_3}	Dados C_{p_3}
6.48	6.84	6.48	5.53	10.50	4.53
2.31	3.97	2.31	3.40	2.14	1.70
5.38	4.65	5.38	3.46	9.85	5.41
2.95	3.05	2.95	2.47	2.83	2.12
8.20	8.14	8.20	7.47	16.33	8.83
6.22	5.19	6.22	4.78	7.95	3.68
4.30	3.98	4.30	3.77	3.76	2.26
11.66	9.24	11.66	9.02	15.71	14.30
6.72	8.58	6.72	8.98	12.11	17.69
5.84	6.71	5.84	6.31	7.24	8.55
4.97	5.39	4.97	5.04	4.75	5.43
3.96	3.51	6.70	3.53	7.44	5.75
2.22	2.50	3.25	2.37	3.37	2.38
1.83	1.98	2.23	1.95	1.74	1.50
6.70	4.67	4.16	4.45	9.48	4.25
3.25	2.76	2.02	3.17	2.62	1.53
2.23	2.23	1.52	2.56	1.15	1.05
4.16	4.83	4.58	3.18	9.76	5.99
2.02	3.27	3.11	2.29	2.64	2.75
1.52	2.63	2.59	1.80	0.98	1.77
4.58	4.45			8.52	5.02
3.11	2.91			2.66	1.95
2.59	2.19			1.98	1.15

Tabela 2: Avaliação estatística utilizando o experimento de Copenhagen

Modelo	NMSE	COR	FA2	FB	FS
GILTT-1	0.05	0.909	1.000	-0.005	0.142
GILTT-2	0.090	0.848	1.000	0.107	0.127
GILTT-3	0.330	0.802	0.870	0.281	0.088

Tabela 3: Tabela das análises estatísticas.

	GILTT-1		GILTT-2		GILTT-3	
Parâmetros	C_{o_1}	C_{p_1}	C_{o_2}	C_{p_2}	C_{o_3}	C_{p_3}
Somatório	103.2000	103.6700	95.1900	85.5300	145.5100	109.5900
Média	4.4870	4.5074	4.7595	4.2765	6.3265	4.7648
Mediana	4.65	3.25	4.1	3.765	4.53	2.83
Variância	5.9862	4.5087	6.1965	4.8942	21.1956	17.7735
Desvio Padrão	2.3929	2.0767	2.4263	2.1462	4.5027	4.1232
Coef. de Var.(%)	42.5145	67.4847	48.6700	64.3100	84.5600	81.4540
Simetria	0.5616	1.9128	0.9412	1.4240	2.1897	1.1734
Curtose	-0.6280	4.2911	0.1362	2.1650	5.5724	1.0927
Quartil 1	3.2700	2.3100	2.5600	2.3100	2.3800	2.1400
Quartil 3	6.8400	5.8400	5.5300	6.2200	5.4300	7.9500
Correlação	0.9096		0.8016		0.8016	

mente para (C_{o_1} e C_{p_1}),(C_{o_2} e C_{p_2}), (C_{o_3} e C_{p_3})que determinam, em cada conjunto, o valor central. Quanto às medidas de dispersão, verificaram-se a variância, o desvio padrão e o coeficiente de variação, o desvio padrão (dado por $S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n-1}}$, devido aos dados serem brutos), e a variância (dada por $S^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{n-1}$), sendo que estes últimos indicam, respectivamente, a distância que os valores se encontram da média e o quanto de variação tem dentro desse conjunto. Ainda, o coeficiente de variação (dado por $CV = \frac{S}{\bar{x}}.100$), indica, em termos percentuais, qual a variação dos dados, que tanto nos dados observados quanto nos preditos é bastante alto nas três observações, mostra que possuem realmente uma grande diferença entre os seus valores. Nota-se que a variância dos dados, observados e preditos nos dão a nítida percepção de que a variância dos primeiros é maior que a dos preditos em todas as observações, garantindo assim, que a técnica GILTT é eficiente, gerando bons resultados. Percebe-se ainda, que os dados observados e preditos possuem valores bastante semelhantes, o que nos lembra a correlação que demonstra a relação entre os dois conjuntos de dados, ou seja, no presente trabalho, remete ao quão próximo estão os resultados do nosso modelo GILTT, com os valores reais observados, as magnitudes das correlações foram consideravelmente elevadas ($COR = 90,96\%$) no primeiro conjunto de dados e ($COR = 80,16\%$) nos outros dois, que estão muito próximo de 100%, garantindo que os dados preditos estão perto dos observados, isto é, que o modelo GILTT de predição pode estimar com bastante precisão o que será observado em coletas futuras. Os valores para $NMSE$ são bastante pequenos, COR e $FA2$ tem valores próximos de 1 e FB e FS são próximos de zero, garantindo uma boa performance do modelo.

Observando-se os gráficos da Figura 1 percebe-se para quantidade de cada valor eixo **x** varia uma certa quantidade no valor do eixo **y**, o que lembra-nos a regressão linear, que neste caso é positiva e mostra que toda vez que se modificar um valor observado o valor predito deverá acompanhar essa alteração. Isso acontece para todos, indicando assim a

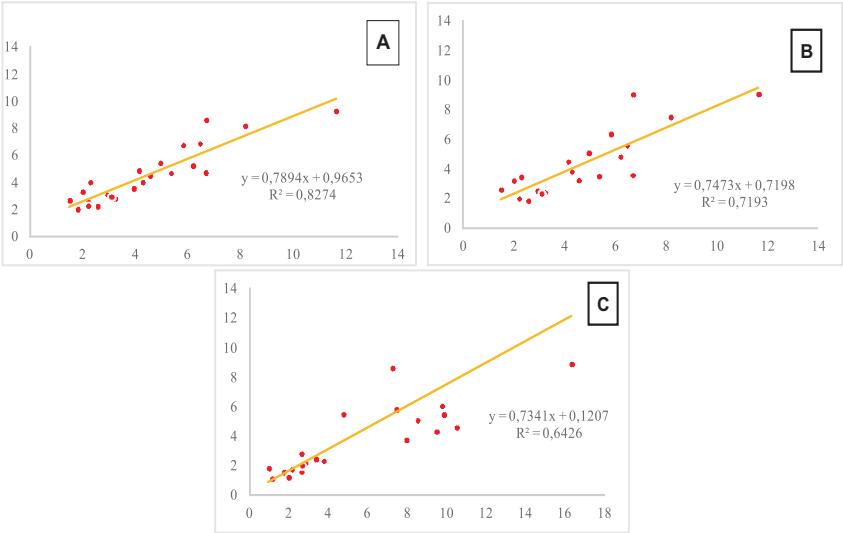


Figura 1: Análise de regressão entre os valores observados e os valores preditos em A (primeira coleta de dados), B (segunda coleta de dados) e C (terceira coleta de dados), referentes as coletas em Copenhagen.

estabilidade do modelo para esse experimento.

Pode-se também observar os quartis, sendo o primeiro quartil (Q_1) o valor que divide o conjunto em duas partes, tais que um quarto ou vinte e cinco por cento (25%) dos valores sejam menores do que ele e três quartos ou setenta e cinco por cento (75%) dos restantes sejam maiores. O elemento que indica a ordem ou posição do primeiro quartil é determinado, para dados agrupados em classes, pela expressão $E_{Q_1} = \frac{n}{4}$, em que n é o número de valores do conjunto, ou número de observações. O terceiro quartil é o valor que divide o conjunto em duas partes tais que um quarto ou vinte e cinco por cento (25%) dos valores sejam maiores do que ele e três quartos ou setenta e cinco por cento (75%) dos restantes sejam menores. O elemento que indica a ordem ou posição do primeiro quartil é determinado, para dados agrupados em classes, pela expressão $E_{Q_3} = \frac{3n}{4}$, em que n é o número de valores do conjunto, ou número de observações. Na Tabela 3, no primeiro conjunto de dados, verifica-se que o primeiro quartil tem valores 3.2700 para para os valores observados e 2.3100 para os valores preditos, ou seja, 25% dos valores estão abaixo desses valores e que 75% deles estão acima, enquanto o terceiro quartil tem valores 6.8400 e 5.8400 para os valores observados e preditos, respectivamente, indicando assim que 75% dos valores estão abaixo e que 25% dos valores estão acima desses números. Indicando tal observação, tem-se no segundo conjunto de dados os valores 2.5600 e 2.3100 para o primeiro quartil para os dados observados e preditos, respectivamente e os valores 5.5300 e 6.2200 respectivamente, para os dados observados e preditos, para o terceiro quartil. Analogamente, no terceiro conjunto de dados tem-se 2.3800 e 2.1400 para o primeiro quartil e 5.4300 e 7.9500 para o terceiro quartil, na ordem dos conjuntos de dados anteriores.

4 Conclusões

Utilizou-se a solução analítica para a equação de advecção-difusão obtida pelo método GILTT para os problemas, com modelagem do problema na CLP e efetuou-se uma análise estatística dos resultados. A estatística descritiva foi utilizada para resumir e descrever as características dos conjuntos de dados, fundamentando-se na análise estatística dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão combinando o método da Transformada de Laplace e da técnica GILTT com os dados do experimento de Copenhagen.

Nos três conjuntos de dados percebe-se que os valores de $NMSE$, COR, $FA2$, FS e FB levam-nos a acreditar que o modelo GILTT tem uma boa performance e mostrou-se confiável na predição da dispersão de poluentes atmosféricos e também percebe-se que os valores observados e preditos apresentaram grande variação para as diferentes coletas.

Referências

[1] D. Buske, Solução GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana: Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, Dissertação de Mestrado, UFRGS, 2008.

[2] D.Buske, M.T. Vilhena, T. Tirabassi, and B. Bodmann. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. *Journal of Envir. Protec.*, 4:1-10, 2012.

[3] J. G. C. da Silva, Estatística Básica. Versão preliminar. Universidade Federal de Pelotas-UFPel. Pelotas-RS. 2004.

[4] S.E. Gryning and E. Lyck. Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison betwenn tracer experiments and model calculations. *Journal of Climate applied Meteorology*, 23: 651-654, 1984.

[5] S.E. Gryning, A.M.M. Holtslag, J. Irwin, B. Sivertsen. Applied dispersion modelling based on metereological scaling parametres. *Atmosferic Environment*, 21: 79-89. 1987.

[6] S.R. Hanna. Condence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jacknife resampling methods. *Atmospheric Environment*, 23: 1385-1395, 1989.

[7] D. M. Moreira, M. T. Vilhena, D. Buske, and T. Tirabassi. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. Atmospheric Research 92: 1-17. 2009

[8] H.A. Panofsky, J.A. Dutton,*Atmospheric Turbulence. John Wiley and Sons, New York.* 1984.

[9] F. Pimentel-Gomes. Curso de estatística experimental. Piracicaba, v. 15: 451. 2009.

[10] S. Wortmann, M.T. Vilhena, D.M. Moreira, and D. Buske, A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. *Atmospheric Environment.* 39 (12): 2187-2194. 2005.

Caracterização de Modelos para a Predição de Poluentes Atmosféricos

Maicon Nardino, Jorge Ribes, Elisia R. Correa, Régis S. Quadros, Willian Barros, Daniela Buske

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat - UFPel)
Pelotas – RS – Brasil

{nardinomn, jlbribes, regisquadros, willianbarros, danielabuske}@gmail.com, {elisiarc}@hotmail.com

Abstract. *The objective of this study is based on statistical analysis of results obtained in the analytical development of the advection-diffusion equations using the combination of the Laplace transform and GILTT technique. The results obtained by four different models, using the Copenhagen experimental data, were analyzed. The performed statistical analyzes show that the proposed model is able to predict the concentration of pollutants using the Copenhagen experiment data set.*

Resumo. *O objetivo do trabalho baseia-se na análise estatística dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão utilizando-se a combinação da Transformada de Laplace e da técnica GILTT. Os resultados obtidos por quatro modelos, utilizando os dados do experimento de Copenhagen, foram analisados. As análises estatísticas realizadas mostram que o modelo proposto é eficaz para a predição da concentração de poluentes utilizando o conjunto de dados do experimento de Copenhagen.*

1. Introdução

A qualidade do ar das cidades é um fator fundamental para a qualidade de vida da população e do meio ambiente. Devido a isso, diferentes grupos de pesquisa trabalham na modelagem de fenômenos atmosféricos e em sua simulação computacional. O grande desafio tem sido desenvolver ferramentas numéricas eficazes para estimar o nível de concentração de poluentes na atmosfera provenientes das inúmeras fontes de emissão, tanto antropogênicas como naturais. A partir da estimativa do nível de concentração próximo da fonte, pode-se realizar uma avaliação do impacto ambiental gerado e agir na tentativa de uma solução o mais conveniente possível para o problema.

A estatística descritiva compreende o conjunto dos métodos estatísticos para resumir e descrever as características proeminentes de conjuntos de dados referentes a observações de fenômenos particulares de uma classe de fenômenos. Nesse sentido, ela inclui a condensação de dados em forma de tabelas, sua representação gráfica e a determinação de indicadores numéricos de centro e de variabilidade [da Silva, 2004], [Pimentel-Gomes, 2009].

Este trabalho baseia-se na análise estatística dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão utilizando-se a combinação da Transformada de Laplace e da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Esta técnica compreende os seguintes passos para a resolução de um problema bidimensional estacionário, por exemplo: solução de um problema associado de Sturm-Liouville, expansão da concentração de poluentes em uma série em termos das autofunções, substituição desta expansão na equação de difusão-advecção e finalmente tomar momentos. Esse procedimento nos leva a um conjunto de equações diferenciais ordinárias chamadas de problema transformado. O problema transformado é resolvido pela técnica da Transformada de Laplace e diagonalização [Wortmann et al., 2005]. A técnica GILTT é um método totalmente analítico, no sentido de que nehuma aproximação é feita ao longo da sua derivação exceto pelo erro de truncamento.

A modelagem do problema se dá na Camada Limite Planetária (CLP) que é definida como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela superfície terrestre e responde aos forçantes superficiais com uma escala de tempo inferior a uma hora, efetuando-se uma análise estatística dos resultados. Aplicaremos alguns conceitos estatísticos de acordo com os resultados encontrados pré-conhecidos na literatura e encontrados em [Moreira et al., 2009] e [Buske et al., 2012].

Serão apresentados resultados obtidos utilizando a solução analítica da equação de advecção-difusão do tipo: bidimensional estacionário, bidimensional transiente, tridimensional considerando uma Gaussiana na direção transversal e, tridimensional totalmente analítico, utilizando os dados do experimento de Copenhagen [Gryning and Lick, 1984] [Gryning et al., 1987].

Quanto às medidas de dispersão, o valor central do conjunto de dados, sendo uma estatística de posição, o desvio padrão e o coeficiente de variação. O desvio padrão (em dados brutos) e a variância são dados, respectivamente por:

$$S=\frac{\sum_1^n (x_i-\bar{x})^2}{n-1} \text{ e } S^2=\frac{\sum_1^n (x_i-\bar{x})^2}{n-1},$$

sendo, que estes indicam, respectivamente, a distância que os valores se encontram da média e o quanto de variação tem dentro desse conjunto. Ainda, o coeficiente de variação, que indica em termos percentuais, qual a variação dos dados, é dado por:

$$CV=\frac{\sum_1^n S}{\bar{x}}\ .100$$

Dos dados obtidos através das coletas e dos resultados obtidos com a técnica GILTT associado com a técnica da Transformada de Laplace e diagonalização, serão feitas análises como *NMSE*, *COR*, *FB*, *FS*, além de média, variância, desvio padrão, correlação e distribuição de frequências, com a avaliação dos modelos com relação aos estimadores estatísticos analisados.

2. Modelagem Matemática do Problema

A equação de advecção-difusão da poluição do ar é uma representação da conservação de massa na atmosfera. Assumindo um fechamento Fickiano da turbulência, a equação de advecção-difusão pode ser escrita como [Buske, 2008]:

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\bar{u}\frac{\partial c}{\partial x}+\bar{v}\frac{\partial c}{\partial y}+\bar{w}\frac{\partial c}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(K_x\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_y\frac{\partial c}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z\frac{\partial c}{\partial z}\right)+S \qquad (1)$$

onde c (x,y,z,t) representa a concentração média do poluente em g/m^3, $\bar{u}$, $\bar{v}$, $\bar{w}$ representam as componentes do vento médio em m/s nas direções x,y e z, respectivamente, K_x, K_y e K_z são as componentes cartesianas do coeficiente de difusão nas direções x, y e z, respectivamente e S é o termo fonte. Na primeira ordem de fechamento, todas as informações sobre a turbulência do processo estão contidas nos coeficientes de difusividade turbulenta.

A equação (1) está sujeita as condições de contorno de fluxo nulo nos contornos:

$$K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = 0 \text{ em } x = 0 \text{ e } x = L_x \quad (2)$$

$$K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0 \text{ em } y = 0 \text{ e } x = L_y \quad (3)$$

$$K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = 0 \text{ em } z = 0 \text{ e } x = L_z \quad (4)$$

É considerado que a atmosfera está limpa no tempo inicial, ou seja, c (x,y,z,0)=0. A condição de fonte é representada por $\bar{u}c\,(0, y,z,t)=Q\delta(y-y_0)\delta(z-H_s)$, onde Q é a taxa de emissão em g/s, z_i a altura da CLP em metros, H_s é a altura da fonte em metros, L_x e L_y são as distâncias longe da fonte e δ representa a função delta de Dirac.

A solução do problema é obtida aplicando-se a técnica da transformada integral na variável $\boldsymbol{y}$, transformando o problema 3D em um problema 2D resolvido em [Buske et al., 2012]. Aplicando a transformada de Laplace na variável temporal, obtemos um problema estacionário, cuja solução é encontrada pelo método GILTT [Moreira et al., 2009].

3. Resultados e Discussões

Os resultados preditos neste trabalho foram obtidos pelo método da GILTT à partir de dados coletados em Copenhagen e foi feita uma análise estatística quanto as medidas de posição e dispersão, tais como, média, mediana, desvio padrão, simetria, curtose, variância e coeficiente de variação e uma análise de correlação, além de uma análise de distribuição de frequência. Os detalhes do experimento de Copenhagen estão descritos em [Buske, 2008], [Gryning and Lick, 1984], [Gryning et al., 1987].

Na Tabela 1 podemos ver as concentrações observadas no experimento e preditas pelo modelo GILTT para os quatro casos estudados. Foram utilizados os dados de concentração integrados lateralmente para a equação bidimensional estacionária (aqui denominado GILTT-1), dados com uma maior resolução temporal para a equação bidimensional transiente (aqui denominado GILTT-2), dados tridimensionais para a equação tridimensional estacionária que aqui é resolvida assumindo-se que em $\boldsymbol{y}$ tem-se uma distribuição Gaussiana da pluma como em [7] (aqui denominado GILTT-3) e dados tridimensionais do modelo tridimensional analítico (aqui denominado GILTT-4). Podemos observar da Tabela 1 que o modelo GILTT descreve satisfatoriamente os dados observados no experimento de Copenhagen.

Tabela 1. Concentrações superficiais integradas lateralmente normalizadas pela taxa de emissão (.10^{-4}sm^{-2}), onde *Cp* são os dados preditos pelos modelos e *Co* representa as concentrações observadas experimentalmente.

Dados Co_1	GILTT-1 Cp_1	Dados Co_2	GILTT-2 Cp_2	Dados Co_3	GILTT-3 Cp_3	Dados Co_4	GILTT-3 Cp_4
6,48	6,84	6,48	5,53	10,5	4,53	10,50	12,22
2,31	3,97	2,31	3,4	2,14	1,7	2,14	4,25
5,38	4,65	5,38	3,46	9,85	5,41	9,85	8,23
2,95	3,05	2,95	2,47	2,83	2,12	2,83	2,86
8,2	8,14	8,2	7,47	16,33	8,83	16,33	16,49
6,22	5,19	6,22	4,78	7,95	3,68	7,95	5,66
4,3	3,98	4,3	3,77	3,76	2,26	3,76	3,29
11,66	9,24	11,66	9,02	15,71	14,3	15,71	10,44
6,72	8,58	6,72	8,98	12,11	17,69	12,11	16,24
5,84	6,71	5,84	6,31	7,24	8,55	7,24	7,09
4,97	5,39	4,97	5,04	4,75	5,43	4,75	3,96
3,96	3,51	6,7	3,53	7,44	5,75	7,44	6,80
2,22	2,5	3,25	2,37	3,37	2,38	3,37	2,39
1,83	1,98	2,23	1,95	1,74	1,5	1,74	1,49
6,7	4,67	4,16	4,45	9,48	4,25	9,48	8,66
3,25	2,76	2,02	3,17	2,62	1,53	2,62	2,67
2,23	2,23	1,52	2,56	1,15	1,05	1,15	1,70
4,16	4,83	4,58	3,18	9,76	5,99	9,76	10,04
2,02	3,27	3,11	2,29	2,64	2,75	2,64	4,04
1,52	2,63	2,59	1,8	0,98	1,77	0,98	2,23
4,58	4,45			8,52	5,02	8,52	7,83
3,11	2,91			2,66	1,95	2,66	2,72
2,59	2,19			1,98	1,15	1,98	1,47

Na Tabela 2 apresentam-se os resultados dos índices estatísticos, descritos por [Hanna, 1989], [Pimentel-Gomes, 2009], e definidos como:

Erro quadrático médio normalizado (*NMSE*), dado por:

$$\frac{\overline{(C_o-C_p)^2}}{\overline{C_o}\,\overline{C_p}}$$

que informa sobre todos os desvios das concentrações do modelo e as concentrações observadas. É uma medida adimensional e quanto menor o valor, melhor o modelo.

Coeficiente de Correlação (*COR*):

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

que descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. O valor 1 garante uma boa performance.

Fator de dois (*FA2*), fração dos dados (% normalizados a 1), entre 0.5 e 2, ou seja, $0.5 \leq \frac{C_o}{C_p} \leq 2$. Quanto mais próximo de 1, mais próximos estão os dados.

Desvio fracional padrão (*FS*), é dado por:

$$\frac{\sigma_o - \sigma_p}{0.5(\sigma_o + \sigma_p)}$$

sendo, que valor ótimo é zero.

Fração de inclinação (*FB*), é dado por:

$$\frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}$$

que indica a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo é zero.

Tabela 2. Avaliação estatística utilizando o experimento de Copenhagen para os quatro modelos GILTT -1, -2, -3 e -4.

	NMSE*	COR	FA2	FB	FS
GILTT -1	0,050	0,909	1,000	-0,005	0,142
GILTT -2	0,090	0,848	1,000	0,107	0,127
GILTT -3	0,330	0,802	0,870	0,281	0,088
GILTT -4	0,070	0,926	0,957	0,019	0,026

*NMSE: erro quadrático médio, COR: coeficiente de correlação, FA2: fator de 2, FB: fator de inclinação e FS: desvio padrão fracional.

A partir de agora serão feitas as análises estatísticas descritivas que são o objetivo principal deste artigo.

Tabela 3. Tabela de análises estatísticas dos dados de Copenhagen observados e preditos (Co_1, Cp_2) para experimento 1, 2, 3 e 4.

	Experimento 1		Experimento 2		Experimento 3		Experimento 4	
Parâmetros	Co_1	Cp_1	Co_2	Cp_2	Co_3	Cp_3	Co_4	Cp_4
Somatório	103,20	103,67	95,19	85,53	145,51	109,59	145,51	142,77
Média	4,48	4,50	4,75	4,27	6,32	4,76	6,33	6,21
Mediana	4,65	3,25	4,1	3,765	4,53	2,83	4,53	2,83
Var*	5,98	4,50	6,19	4,89	21,19	17,77	21,20	20,12
DP	2,39	2,07	2,42	2,14	4,50	4,12	4,50	4,39
Coef. Var (%)	42,51	67,48	48,67	64,31	84,56	81,45	84,56	70,68
Simetria	0,56	1,91	0,94	1,42	2,18	1,17	2,19	1,17
Curtose	-0,62	4,29	0,13	2,16	5,57	1,09	5,57	1,09
Quartis 1	3,27	2,31	2,56	2,31	2,38	2,14	2,38	2,14
Quartis 3	6,84	5,84	5,53	6,22	5,43	7,95	5,43	7,95
Correlação	0,9096		0,8016		0,8016		0,93	

*Var: variância, DP: desvio padrão e Coef. Var (%): coeficiente de variação.

Analisando a Tabela 3, observam-se algumas propriedades dos dados através resultados estatísticos. No primeiro conjunto de dados, no que diz respeito às medidas de tendência central, foram verificadas a média e a mediana. Calculando-se a média encontram-se $\overline{x}$ = 4.4870 e $\overline{x}$ = 4.5074 para os valores observados e preditos, respectivamente, identificados como Co_1 e Cp_1 para Co_2 e Cp_2, da mesma forma, tem-se $\overline{x}$ = 4.7595 e $\overline{x}$= 4.2765, $\overline{x}$ = 6.3265 e $\overline{x}$ = 4.7648, identificados como Co_3 e Cp_3, e ainda $\overline{x}$ = 6.33 e $\overline{x}$ = 6.21, identificados como Co_4 e Cp_4, estabelecendo-se assim o valor médio de cada conjunto de dados. Encontram-se também as medianas M_e = 4.65 e M_e = 3.25, M_e = 4.1 e M_e = 3.765, M_e = 4.53 e M_e = 2.83 e M_e = 4.53 e M_e = 2.83, respectivamente para (Co_1 e Cp_1), (Co_2 e Cp_2), (Co_3 e Cp_3) e (Co_4 e Cp_4), que determinam, em cada conjunto, o valor central.

Pelas medidas de dispersão (Tabela 3) observa-se que a variância para o experimento 1 foi de 5.9862 para os dados observados e 4.5087 para os preditos, no experimento 2, 6.1965 para os dados observados e 4.8942 para os preditos, no experimento 3, 21.1956 para os dados observados e 17.7735 para os preditos e no modelo 4, 21.20 para os dados observados e 20.12 para os preditos, o que é bastante alto nos quatro experimentos, mostrando que possuem realmente uma grande diferença entre os seus valores. Nota-se que a variância dos dados, observados e preditos nos dá a nítida percepção de que a variância dos primeiros é maior que a dos preditos em todas as observações. Quanto ao desvio padrão, tem-se para os dados observados e preditos, nos quatro experimentos, respectivamente, 2.3929 e 2.0767, 2.4263 e 2.1462, 4.5027 e 4.1232, 4.50 e 4.39, e na mesma ordem os valores percentuais aproximados respectivos ao coeficiente de variação, 42.51 e 67.48, 48.67 e 64.31, 84.56 e 81.45, 84.56 e 70.68, garantindo assim, que a técnica GILTT é eficiente, gerando bons resultados. Percebe-se também, que os dados observados e preditos possuem valores bastante semelhantes, o que nos remete a ideia da correlação, que demonstra a relação entre os dois conjuntos de dados (observados e preditos), ou seja, no presente trabalho, remete ao quão próximo estão os resultados do nosso modelo GILTT, com os valores reais observados, as magnitudes das correlações foram consideravelmente elevadas (*COR* = 90,96%) no primeiro conjunto de dados e (*COR* = 80,16%) no segundo e terceiro conjuntos e (*COR* = 93%) no quarto conjunto de dados, que estão muito próximo de 100%, garantindo que os dados preditos estão perto dos observados, isto é, que o modelo GILTT de predição pode estimar com bastante precisão o que será observado em coletas futuras. Os valores para *NMSE* são bastante pequenos, *COR* e *FA2* tem valores próximos de 1 e *FB* e *FS* são próximos de zero, garantindo uma boa performance do modelo utilizado.

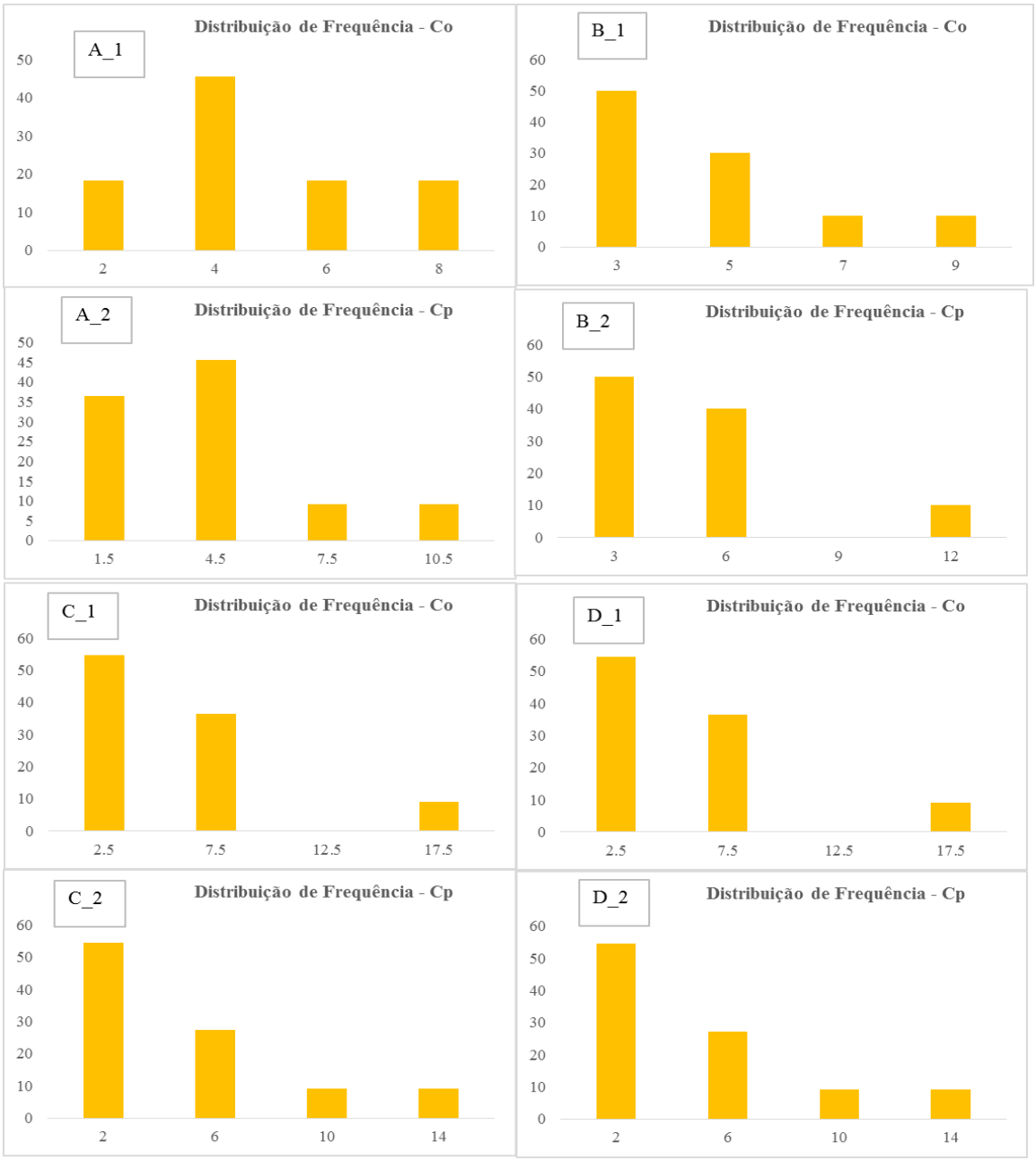


Figura 1. Análise da distribuição de frequência para os dados observados (A1 e preditos (A2) pelo modelo GILTT 1, GLITT 2 (B1 e B2), GLITT 3 (C1 e C2) e GLITT (D1 e D2).

Pode-se também observar os quartis, sendo o primeiro quartil (Q_1) o valor que divide o conjunto em duas partes, tais que um quarto ou vinte e cinco por cento (25%) dos valores sejam menores do que ele e três quartos ou setenta e cinco por cento (75%) dos restantes sejam maiores. O elemento que indica a ordem ou posição do primeiro quartil é determinado, para dados agrupados em classes, pela expressão $E_{Q1} = n/4$, em que *n* é o número de valores do conjunto, ou número de observações. O terceiro quartil é o valor que divide o conjunto em duas partes tais que um quarto ou vinte e cinco por cento (25%) dos valores sejam maiores do que ele e três quartos ou setenta e cinco por cento

(75%) dos restantes sejam menores. O elemento que indica a ordem ou posição do primeiro quartil é determinado, para dados agrupados em classes, pela expressão E_{Q3} = 3n/4, em que *n* é o número de valores do conjunto, ou número de observações.

Na Tabela 3, no primeiro conjunto de dados, verifica-se que o primeiro quartil tem valores 3.2700 para os valores observados e 2.3100 para os valores preditos, ou seja, 25% dos valores estão abaixo desses valores e que 75% deles estão acima, enquanto o terceiro quartil tem valores 6.8400 e 5.8400 para os valores observados e preditos, respectivamente, indicando assim que 75% dos valores estão abaixo e que 25% dos valores estão acima desses números. Indicando tal observação, tem-se no segundo conjunto de dados os valores 2.5600 e 2.3100 para o primeiro quartil para os dados observados e preditos, respectivamente e os valores 5.5300 e 6.2200 respectivamente, para os dados observados e preditos, para o terceiro quartil. Analogamente, no terceiro conjunto de dados tem-se 2.3800 e 2.1400 para o primeiro quartil e 5.4300 e 7.9500 para o terceiro quartil, bem como no quarto conjunto de dados tem-se 2.3800 e 2.1400 para o primeiro quartil e 5.4300 e 7.9500 para o terceiro quartil, na ordem dos conjuntos de dados anteriores.

Com relação a análise de distribuição de frequência, como pode ser visto na Figura 1, onde os dados obtidos através das coletas são indicados por *A1*, *B1*, *C1* e *D1* e os dados obtidos pelas técnicas são indicados por *A2*, *B2*, *C2* e *D2*, observa-se que houve a formação de quatro classes para os dados observados e também preditos. A classe com maior percentual de observações para modelo GILTT-1 reúne aproximadamente 45% das informações, tanto observadas como preditas, para o modelo GILTT-2 a classe com maior percentual de observações reúne 30% das informações observadas e preditas, para o modelo GILTT-3 a classe com maior percentual de observações reúne em torno 35% das informações observadas e preditas e para o modelo GILTT-3 a classe com maior percentual de observações reúne aproximadamente 25% das informações observadas e preditas.

4. Conclusões

Utilizou-se neste trabalho a solução analítica para a equação de advecção-difusão obtida pelo método GILTT para quatro problemas, com modelagem do problema na CLP e efetuou-se uma análise estatística dos resultados. A estatística descritiva foi utilizada para resumir e descrever as características dos conjuntos de dados, fundamentando-se na análise estatística dos resultados obtidos no desenvolvimento analítico das equações de advecção-difusão combinando o método da Transformada de Laplace e da técnica GILTT com os dados do experimento de Copenhagen.

Nos quatro conjuntos de dados percebe-se que os valores de *NMSE*, *COR*, *FA2*, *FS* e *FB* levam-nos a acreditar que o modelo GILTT tem uma boa performance e mostrou-se confiável na predição da dispersão de poluentes atmosféricos, o que leva-nos a entender que se de grande importância e eficácia no auxílio à prevenção de futuros problemas ligados à dispersão de poluentes na atmosfera. Percebe-se também que os valores observados e preditos apresentaram grande variação para as diferentes coletas, indicando assim que tais coletas devem ser feitas em locais e horários diferenciados para uma melhor análise geral da dispersão de poluentes atmosféricos.

5. Referências

Buske, D. (2008) Solução GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana: Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Buske, D., Vilhena, M. T., Tirabassi, T. and Bodmann, B. (2012) "Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution". *Journal of Envir. Protec*, 4:1-10.

da Silva, J. G. C. (2004) "Estatística Básica". Versão preliminar. Universidade Federal de Pelotas-UFPel. Pelotas-RS.

Gryning, S. E. and Lyck, E. (1984) "Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison betwenn tracer experiments and model calculations". *Journal of Climate applied Meteorology*, 23: 651-654.

Gryning, S. E., Holtslag, A.M.M., Irwin, J. and Sivertsen, B. (1987) "Applied dispersion modelling based on metereological scaling parametres". *Atmosferic Environment*, 21: 79-89.

Hanna, S. R. (1989) "Condence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jacknife resampling methods". *Atmospheric Environment*, 23: 1385-1395.

Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Buske, D. and Tirabassi, T. (2009) "The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere". *Atmospheric Research* 92: 1-17.

Pimentel-Gomes, F. (2009) "Curso de estatística experimental". Piracicaba, v. 15: 451.

Wortmann, S., Vilhena, M. T., Moreira, D. M. and Buske, D. (2005) "A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL". *Atmospheric Environment*. 39 (12): 2187-2194.