

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



Dissertação

Uma Aproximação Analítica Tridimensional para um Problema de Dispersão de Efluentes de Foguetes em uma Nuvem Estabilizada

Jonatas Voese

Pelotas, 2017

Jonatas Voese

**Uma Aproximação Analítica Tridimensional para um Problema de Dispersão de
Efluentes de Foguetes em uma Nuvem Estabilizada**

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^a. Dr^a. Daniela Buske
Coorientador: Prof. Dr. Régis Quadros

Pelotas, 2017

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

V872a Voeze, Jonatas dos Santos

Uma aproximação analítica tridimensional para um problema de dispersão de efluentes de foguetes em uma nuvem estabilizada / Jonatas dos Santos Voeze ; Daniela Buske, orientadora ; Régis Sperotto de Quadros, coorientador. — Pelotas, 2017.

76 f. : il.

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

1. Giltt tridimensional. 2. Dispersão. 3. Nuvem de exaustão. 4. Foguetes. 5. Centro de Lançamento de Alcântara. I. Buske, Daniela, orient. II. Quadros, Régis Sperotto de, coorient. III. Título.

CDD : 551.576

Jonatas Voesé

Uma Aproximação Analítica Tridimensional para um Problema de Dispersão de Efluentes de Foguetes em uma Nuvem Estabilizada

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: 02 de março de 2017

Banca examinadora:

Daniela Buske

Profa. Dra. Daniela Buske (Orientadora)
Doutora em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Régis Sperotto de Quadros

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

Gilberto Fisch

Prof. Dr. Gilberto Fisch
Doutor em Meteorologia pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Brasil

Bardo Ernst Josef Bodmann

Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann
Doutor em Física pelo Friedrich Alexander Universität Erlangen Nürnberg, Alemanha

Glênio Aguiar Gonçalves

Prof. Dr. Glênio Aguiar Gonçalves
Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Jonas da Costa Carvalho

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho
Doutor em Meteorologia pela Universidade de São Paulo, Brasil

Aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

Agradeço

Aos meus pais, Alzirô e Jandira, pelo apoio e incentivo durante a realização deste trabalho, e por tudo que me ensinaram no decorrer da minha vida.

Aos meus colegas de Mestrado (Bruna, Jéssica, Jorge, Juliana e Rodrigo), pelo companheirismo e pelos momentos de diversão vividos.

Aos professores Daniela Buske e Régis Quadros, pelo apoio na construção e desenvolvimento desta dissertação. Em especial a professora Daniela Buske por ter me convidado a participar deste projeto, e pela paciência e tempo dedicados a mim no período de orientação.

À CAPES, pelo apoio financeiro concedido (Projeto Pró-Estratégia), e a todos os professores do GDISP pela colaboração e conhecimentos transmitidos.

A todos os meus amigos.

A Deus.

A Matemática é o alfabeto com o qual Deus escreveu o Universo.
— GALILEU GALILEI

RESUMO

VOESE, Jonatas. **Uma Aproximação Analítica Tridimensional para um Problema de Dispersão de Efluentes de Foguetes em uma Nuvem Estabilizada.** 2017. 77 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2017.

O objetivo da presente dissertação é simular, após o período de estabilização térmica, a dispersão da nuvem de exaustão gerada em lançamento de foguetes. Para isso, será considerado um modelo tridimensional transitório baseado na equação de advecção-difusão e que contém os termos de deposição gravitacional, remoção e decaimento químico. As condições de contorno utilizadas foram o fluxo de calor nulo no topo da camada limite atmosférica e processo de deposição na superfície. A condição de fonte simula o efeito do tempo de emissão do poluente através de uma função de Heaviside. A fonte terá duas abordagens, em um primeiro momento consideraremos uma pontual contínua e, posteriormente, serão realizadas simulações considerando uma fonte volume. As parametrizações de turbulência foram obtidas de trabalhos existentes na literatura sobre dispersão de poluentes. A solução foi encontrada utilizando-se o método GILTT tridimensional descrito em alguns trabalhos utilizados como referência. Para validação do algoritmo foram utilizados os dados do experimento de Copenhagen e, para as simulações de sensibilidade foram utilizados os dados micrometeorológicos do Centro de Lançamento de Alcântara (CLA) obtidos do projeto CHUVA.

Palavras-chave: GILTT tridimensional, dispersão, nuvem de exaustão, foguetes, Centro de Lançamento de Alcântara.

ABSTRACT

VOESE, Jonatas. **A Three-Dimensional Analytical Approximation for a Problem of Rocket Effluents Dispersion in an Stabilized Cloud.** 2017. 77 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2017.

The aim of present master dissertation is to simulate, after a thermal stabilization period, the dispersion of an exhaust cloud generated in rocket and space vehicle launches. For this end, a three-dimensional time-dependent model based at advection-diffusion equation will be considered and contains the terms of gravitational settling and chemical decay. The boundary conditions of heat null flux at the top of atmospheric boundary layer and deposition process in the surface were used. The source condition simulates the pollutant emission time efect through a Heaviside function. Were realised simulations considering a punctual continuos and volume source approach. The eddy parametrizations were obtained from existing works of dispersion pollution literature. The solution was encontered using the three-dimensional GILTT method described in some works used as reference. To validate the algorithm and for sensibility simulations the data of Copenhagen experiments and micrometeorological data of Centro de Lançamento de Alcântara (CLA) obtained from the CHUVA project were used.

Keywords: Three-dimensional GILTT, dispersion, exhaust cloud, rocket, Centro de Lançamento de Alcântara.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Imagen da <i>ground cloud</i> e da <i>contrail cloud</i> geradas no lançamento da TITAN IV (NYMAN, 2009)	19
Figura 2	Processo de liberação, ascensão e dispersão da nuvem de exaustão (NYMAN, 2009)	21
Figura 3	Desenvolvimento da camada limite planetária (STULL, 1988)	30
Figura 4	Centro de Lançamento de Alcântara, com detalhe da falésia (MARINHO et al., 2009)	34
Figura 5	Diagrama de espalhamento entre concentrações preditas e observadas.	58
Figura 6	Concentração <i>versus</i> N_y para 20 autovalores em z , calculados a $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ da fonte e $z = 1,5\text{ m}$	60
Figura 7	Resultados para altura da fonte para condições instáveis (esquerda) e estáveis (direita). Concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$	61
Figura 8	Concentração em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$ para vários tempos de emissão.	61
Figura 9	Resultados para deposição físico-química a 500m da fonte em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$	62
Figura 10	Resultados para deposição físico-química a 1000m da fonte em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$	62
Figura 11	Evolução da concentração para várias distâncias da fonte, calculadas em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$	63
Figura 12	Evolução da concentração para vários tempos de análise após a emissão, em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$. Caso instável (esquerda); caso estável (direita)	64
Figura 13	Isolinhas de concentração para o caso instável (esquerda) e estável (direita), calculadas em $z = 1,5\text{ m}$	65
Figura 14	Comparação de V_d para o caso instável (esquerda) e estável (direita), concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$	66
Figura 15	Evolução da concentração por distância para diversos tempos após liberação, calculadas em $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$	68
Figura 16	Evolução da concentração pelo tempo para diversas distâncias da origem do sistema, em $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$. Caso instável (esquerda) e estável (direita).	68

Figura 17	Concentração por distância com $t = 250\text{ s}$ para vários tempos de emissão considerando fonte volume. Concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$	69
Figura 18	Concentração por distância com $t = 300\text{ s}$ para vários tempos de emissão considerando fonte volume. Concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$	69
Figura 19	Isolinhas de concentração para 3 tempos diferentes. Caso instável (esquerda) e estável (direita).	70

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Índices estatísticos comparados.	58
Tabela 2	Dados micrometeorológicos do projeto CHUVA (adaptado de (BAINY; BUSKE; QUADROS, 2015)).	59
Tabela 3	Relação entre número de fontes e concentração em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$, calculadas 300 s após emissão.	67

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

$3D - GILTTR$	<i>Three-dimensional GILTT for Rocket exhaust Diffusion</i>
A	Raio característico
A_k	Pesos da quadratura gaussiana
$ADMM$	<i>Advection-diffusion multilayer method</i>
$ADPIC$	<i>Atmospheric Diffusion, Particle-in-Cell Model</i>
C	Concentração
CLC	Camada Limite Convectiva
C_c	Fator de Cunningham
CLA	Centro de Lançamento de Alcântara
CLI	Camada Limite Interna
CLP	Camada Limite Planetária
COR	Coeficiente de Correlação
c_p	Calor específico
D	Coeficiente de difusão
D_b	Difusividade browniana
D_p	Diâmetro da partícula
D_s	Difusividade do gás
$DISF$	<i>Model for Diffusion in Shear Flow</i>
$D\nabla^2 C$	Termo de difusão molecular
EDO	Equação diferencial ordinária
$(f_m)_v$	Pico do comprimento de onda do espectro de velocidade
FS	Desvio fracional padrão
g	Aceleração da gravidade
$GILTT$	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
$GILTTR$	<i>GILTT for Rocket exhaust diffusion</i>
$GITT$	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>

h	Altura da camada limite
H_0	Fluxo de calor na superfície
H_s	Altura da fonte
k_b	Constante de Boltzmann
K_x	Coeficiente de difusão turbulenta na direção x
K_y	Coeficiente de difusão turbulenta na direção y
K_z	Coeficiente de difusão turbulenta na direção z
L	Comprimento de Obukhov
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>
L_y	Domínio em y
MDM	<i>Multilayer dispersion models</i>
$METS$	<i>Meteorological Effluent Transport Simulation Model</i>
$MSDEF$	Modelo Simulador da Dispersão de Efluentes de Foguetes
$MSFC$	<i>Marshall Space Flight Center</i>
N_i	Norma de autofunção
$NMSE$	Erro Médio Quadrático Normalizado
P_k	Raízes da quadratura gaussiana
Q	Taxa de emissão
q_v	Função de estabilidade
R	Raio da nuvem de exaustão
r_a	Resistência aerodinâmica
R_i	Número de Richardson
$REEDM$	<i>Rocket Exhaust Effluent Diffusion Model</i>
S	Termo fonte/sumidouro
Sc	Número de Schmidt
S_i	Número de fontes
St	Número de Stokes
T	Temperatura do ar
t_r	Tempo de emissão
u	Velocidade do vento
u_*	Velocidade de fricção
V	Velocidade do vento na direção (x, y, z)
V_d	Velocidade de deposição
v_g	Deposição gravitacional

w_*	Velocidade convectiva
WRF	<i>Weather Research and Forecasting</i>
y_0	Distância de avaliação em y
Y_m	Autofunção de Sturm-Liouville em y
z_0	Rugosidade do terreno
z_i	Altura da camada convectiva
z_{ref}	Altura de referência
$\overline{w'\theta'}$	Fluxo de calor turbulento
α_l	Autovalores de Sturm-Liouville em z
β_m	Autovalores de Sturm-Liouville em y
γ	Ângulo do vetor posição de fonte com o eixo z
δ	Função delta de Dirac
$\delta_{i,j}$	Delta de Kronecker
η	Função degrau de Heaviside
$\bar{\theta}$	Temperatura potencial média
θ_*	Escala de temperatura turbulenta
κ	Constante de Vón Kármán
λ	Coeficiente de deposição físico-química
λ_a	Caminho livre médio das moléculas
μ	Coeficiente de viscosidade dinâmica
ρ	Densidade do ar
σ_v	Desvio padrão da velocidade de turbulência
σ_y	Desvio padrão de concentração na direção y
σ_z	Desvio padrão de concentração na direção z
τ_0	Tensão de cisalhamento
v	Viscosidade cinemática
Φ	Funções de estabilidade
Ψ	Autofunção de Sturm-Liouville em z
ψ_ϵ	Função de dissipação molecular
Ψ_i, Ψ_j	Autofunções do problema de Sturm-Liouville
ξ	Ângulo do vetor posição de fonte com eixo x
\mathcal{L}	Transformada de Laplace
\mathcal{L}^{-1}	Transformada inversa de Laplace

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	19
2.1	Lançamento de Foguetes	19
3	CAMADA LIMITE PLANETÁRIA	28
3.1	Camada Limite Planetária	28
3.2	Centro de Lançamento de Alcântara	34
4	DESENVOLVIMENTO	36
4.1	Equação de Advecção-Difusão Tridimensional Transiente	36
4.2	Modelo de dispersão em lançamento de foguetes	38
4.3	Solução do modelo via GILTT para fonte pontual	40
4.4	Solução do modelo para fonte volume	48
5	PARÂMETROS E DADOS	50
5.1	Parâmetros micrometeorológicos	50
5.2	Deposição seca	51
5.2.1	Resistência aerodinâmica	51
5.2.2	Resistência quase-laminar	52
5.2.3	Resistência superficial	53
5.3	Parametrização da turbulência	53
5.4	Perfil de vento	55
5.5	Dados para validação do modelo	55
5.6	Índices estatísticos	56
6	RESULTADOS	57
6.1	Experimentos de Copenhagen	57
6.2	Testes de sensibilidade	58
6.3	Resultados para Fonte Volume	66
7	CONCLUSÕES	71
	REFERÊNCIAS	73

1 INTRODUÇÃO

Ao longo dos últimos anos têm-se percebido um grande avanço científico e tecnológico em diversos setores da sociedade, entre eles destaca-se o setor de comunicação e transferência de dados. Nestes setores, muitas vezes utilizam-se satélites ou sondas espaciais, que são postas em órbita com o auxílio de foguetes ou veículos espaciais.

Se por um lado todo este desenvolvimento trouxe inúmeros benefícios, não se pode negar que também ocasionou problemas. O principal deles refere-se à liberação de substâncias poluentes na atmosfera, que acabam alterando a qualidade do ar, não apenas nas regiões próximas as fontes poluentes, mas também nas regiões mais afastadas.

Com isto tornou-se premente as pesquisas que buscam compreender a estrutura e o funcionamento da atmosfera e dos processos de dispersão de poluentes. Diversas destas pesquisas desenvolveram modelos que possibilitaram obter a concentração de substâncias poluentes lançadas sobre uma região. A definição de modelo, segundo (MOREIRA et al., 2011) é uma idealização abstrata de um processo envolvendo uma ou mais funções designadas para simplificar a descrição do processo.

Os modelos podem ser classificados de várias maneiras, as mais comuns são aquelas em que os mesmos são classificados quanto ao referencial utilizado e quanto à solução encontrada.

Quanto ao referencial temos os modelos Eulerianos e Lagrangeanos. Sendo que no primeiro o escoamento do fluido é referenciado em um ponto fixo do espaço e são baseados na equação de advecção-difusão; enquanto que no segundo caso, o referencial acompanha o movimento do fluido e são baseados no movimento aleatório das partículas (movimento Browniano). Quanto ao tipo de solução encontrada temos os modelos analíticos e numéricos. Nos modelos analíticos a solução encontrada depende, explicitamente, de todos os parâmetros do modelo enquanto as soluções numéricas são obtidas através de aproximações e, muitas vezes, estão condicionadas à análise de erros cometidos durante o desenvolvimento da solução.

No presente trabalho daremos ênfase aos modelos de dispersão da pluma de eflu-

entes gerada em lançamento de foguetes, após a mesma atingir o equilíbrio térmico com o meio. A escolha deste tema deve-se ao fato de que a exploração espacial vêm aumentando gradativamente e porque o lançamento de foguetes é um processo que libera uma grande quantidade de substâncias poluentes na atmosfera, muitas delas com potencial para afetar, direta ou indiretamente, a saúde das populações nas regiões próximas às plataformas de lançamento. Por isso é necessário investir em modelos para prever a dispersão da nuvem de efluentes liberadas neste processo.

O objetivo deste trabalho é calcular a concentração da nuvem de exaustão após o período de estabilização térmica, tomando como base um modelo Euleriano tridimensional transitório que contém os parâmetros de deposição seca e deposição gravitacional, sendo que o primeiro fenômeno configura um efeito das condições de contorno, enquanto o segundo representa uma propriedade dinâmica do modelo. A solução será obtida com auxílio da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) tridimensional. A aplicação desta técnica, no caso apresentado neste trabalho, reduz o problema a uma EDO linear de primeira ordem cuja solução é obtida com o auxílio da diagonalização e da transformada de Laplace. Denominaremos a solução apresentada como uma representação analítica.

Neste caso dizemos que a solução é analítica a menos de truncamento, pois até a aplicação da transformada de Laplace, a única aproximação usada durante o desenvolvimento da solução é o truncamento do somatório, sendo esta uma das principais vantagens do método, ou seja, é possível controlar a precisão de acordo com o número de termos usados na expansão.

Por fim, a concentração do problema original é obtida resolvendo numericamente a transformada inversa de Laplace por quadratura gaussiana. Para validação do algoritmo desenvolvido utilizou-se os dados do experimento de Copenhagen, obtidos de (GRYNING, 1981). Embora estes dados sejam inadequados para validar o tipo de problema proposto, a inexistência de dados sobre concentração em lançamentos de foguetes impede que o mesmo seja avaliado com dados mais adequados. Enfatizamos aqui que os dados de Copenhagen são utilizados apenas para verificação do algoritmo. Em um segundo momento são realizados testes de sensibilidade com alguns parâmetros do modelo utilizando os dados micrometeorológicos da região do Centro de Lançamento de Alcântara.

Além disso, o modelo é abordado sob duas perspectivas de fonte: primeiramente consideramos o modelo com um fonte pontual, que é, até o presente momento, a abordagem utilizada nos trabalhos atuais sobre o tema; e posteriormente consideramos o modelo com uma fonte volume, mais adequada a descrição do problema proposto.

A presente dissertação encontra-se estruturada em 7 capítulos. No capítulo 2 é feita uma breve revisão bibliográfica sobre os modelos aplicados no cálculo da dispersão da pluma estabilizada e as técnicas de solução dos mesmos. Já no capítulo 3

descreve-se a estrutura e a dinâmica da camada limite planetária, bem como a estrutura da atmosfera sobre o Centro de Lançamento de Alcântara. O capítulo 4 dedica-se ao desenvolvimento da equação de advecção-difusão tridimensional transiente e do modelo de dispersão de efluentes de foguetes com fonte pontual e volumétrica e sua respectiva solução via GILTT . No capítulo 5 são descritos os dados e parâmetros micrometeorológicos. No capítulo 6 são mostrados os resultados das simulações para o Centro de Lançamento de Alcântara e também os resultados iniciais para a abordagem com fonte volume. As conclusões são descritas no capítulo 7.

Apresentamos a seguir uma breve revisão teórica e bibliográfica sobre os modelos de dispersão e suas respectivas técnicas de solução.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Lançamento de Foguetes

A queima de combustíveis no motor de um foguete durante os primeiros segundos, anteriores e posteriores ao lançamento, resulta na formação de uma nuvem de calor e propelentes na altura do solo. Quando o propelente é um material volátil, esta nuvem tende a ascender, devido à diferença de temperatura, até que entre em equilíbrio com as condições ambientais (MOREIRA et al., 2011). Esta nuvem é conhecida como *ground cloud* e é mostrada na Figura (1).

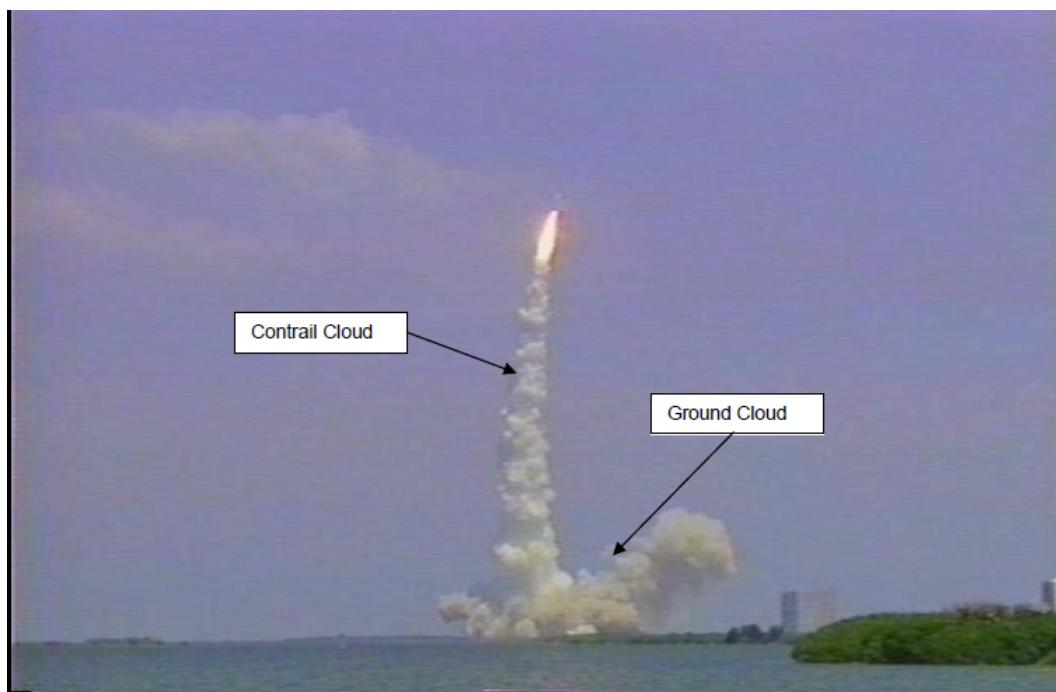


Figura 1: Imagem da *ground cloud* e da *contrail cloud* geradas no lançamento da TITAN IV (NYMAN, 2009).

A *contrail cloud* mostrada na Figura (1) é a nuvem que forma-se quando a pluma gerada pelo foguete não sofre mais reflexão pela interação com a superfície. No presente trabalho daremos ênfase somente a *ground cloud*, pois esta é liberada ao nível

do solo, apresentando altas concentrações de poluentes. Um esquema mais detalhado desta nuvem é apresentado na Figura (2).

A primeira vista pode não parecer importante o estudo da dispersão da *ground cloud*, principalmente por que as bases de lançamento estão localizadas em regiões com baixa densidade demográfica. No entanto, deve-se levar em consideração o crescimento das cidades que, com o passar do tempo, podem aumentar o número de habitantes nestes locais. Nesse sentido é que surge a preocupação em determinar a concentração ao nível do solo dos propelentes, para determinar se os lançamentos têm potencial de afetar a população circundante. (IRIART, 2015) cita o exemplo do Centro de Lançamento Barreira do Inferno (CBLI) em Natal-RN que, devido ao crescimento urbano, tornou-se inviável para lançamentos.

A *ground cloud* ou nuvem de exaustão forma-se durante os primeiros segundos do estágio de queima de combustível, quando o veículo ganha impulso e a base é removida. Nesse período a emissão é conduzida através de um duto. Quando a nave deixa a plataforma, parte da pluma gerada pela queima de combustível é direcionada para fora do ponto de lançamento (NYMAN, 2009), dando origem a nuvem de exaustão.

Segundo relatórios da (NASA, 2009) os principais produtos gerados na queima de combustíveis sólidos são predominantemente: óxido de alumínio (Al_2O_3), monóxido de carbono (CO), ácido clorídrico (HCl), água (H_2O), nitrogênio (N_2), dióxido de carbono (CO_2) e hidrogênio (H_2). São também emitidas pequenas quantidades de dióxido de enxofre (SO_2) e chumbo (Pb). Já combustíveis líquidos geram predominantemente: matéria particulada (PM10), dióxido de enxofre, dióxido de nitrogênio (NO_2), monóxido de carbono e compostos orgânicos voláteis (COV's). Como visto, são gerados compostos com potencial para prejudicar a saúde humana tanto diretamente (inalação) quanto indiretamente (através do aumento do efeito estufa, da precipitação ácida e da depleção de ozônio estratosférico).

Aqui deve ficar claro que os riscos à saúde são potenciais, ou seja, podem ou não ocorrer. Pois embora a quantidade de poluentes liberados durante o lançamento de foguetes seja grande, essas emissões não são frequentes e nem feitas próximas a zonas urbanas. No entanto, a preocupação que se tem é de estabelecer limites de exposição a estas substâncias se, em casos extremos, uma quantidade significativa de poluentes seja transportada para regiões urbanizadas. Nesse sentido (STEWART; GROSE, 1975) afirmam que o modelo é destinado a identificar aquelas situações nas quais a concentração de produtos tóxicos excedem o padrão permitido e fornecer uma base adicional para o desenvolvimento de restrições aos lançamentos de maneira a que tais situações tenham a mínima probabilidade de ocorrer.

Além disso, a concentração superficial é fortemente influenciada pela altura em que a pluma estabiliza. Segundo (SAND, 1996) a ascensão e estabilização da pluma estão diretamente associada ao nível de concentração superficial de substâncias tóxicas.

Após alcançar a altura de estabilização a nuvem dispersa e espalha devido ao vento, diluindo a concentração de toxinas. Eventualmente parte da nuvem alcança o solo, onde os níveis de concentração podem, ou não, apresentar um risco a saúde. Quanto maior a ascensão da nuvem, mais o efluente é disperso, reduzindo a concentração superficial de substâncias tóxicas. Um esquema da evolução da nuvem de exaustão para produtos voláteis é mostrada na figura (2), destacando que este esquema não é válido quando a nuvem gerada contém uma grande quantidade de material particulado. Fazendo uma comparação, é possível perceber na Figura (1) o início do processo de ascensão da pluma.

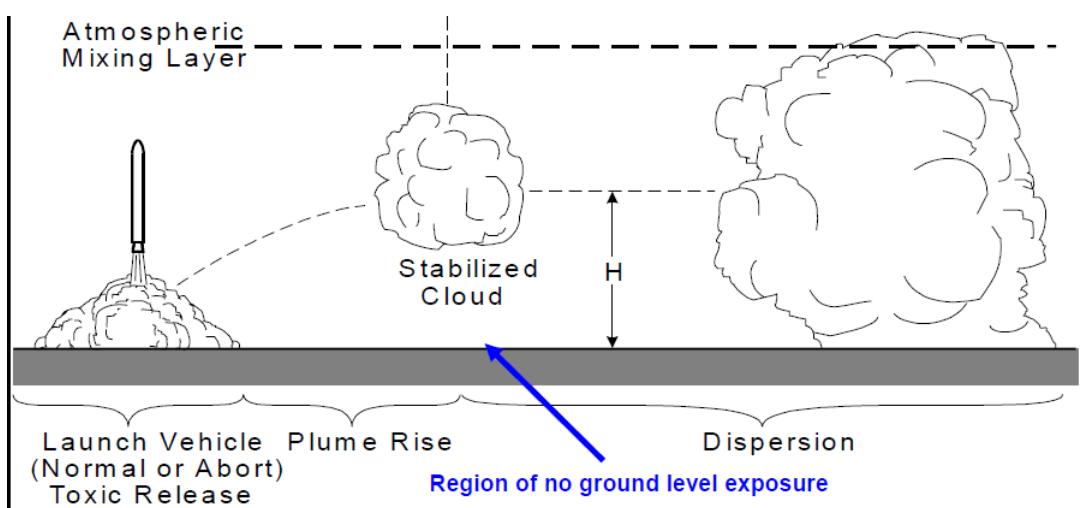


Figura 2: Processo de liberação, ascensão e dispersão da nuvem de exaustão (NY-MAN, 2009).

O autor da presente dissertação não tem conhecimento de trabalhos que descrevam modelos para o fenômeno na íntegra, ou seja, que calculem a concentração de propelentes do início do processo de queima de combustíveis até o processo de dispersão. Isso ocorre por que no início do processo de ignição os propelentes são lançados a uma velocidade e temperatura muito elevadas, fazendo com que existam muitos efeitos a serem considerados, tais como efeitos térmicos, cinéticos, químicos e outros, tornando a modelagem do fenômeno muito complicada. No entanto, já existem pesquisas que levam em consideração os efeitos de ascensão e de movimento do foguete.

Este fato é mais facilmente notado no estágio de liberação, pois neste caso, devido à temperatura e velocidade de liberação do poluente, os efeitos térmicos e cinéticos sobrepõem-se aos efeitos atmosféricos, inviabilizando a utilização dos parâmetros micrometeorológicos até então conhecidos. O que se percebe é que os modelos desenvolvidos desconsideraram estes efeitos iniciais, sendo, portanto, aplicáveis somente após o período de estabilização da nuvem.

Seguindo a mesma linha destas pesquisas, abordaremos aqui uma representação analítica para obter a concentração tridimensional de poluentes após o período de estabilização da pluma liberada em lançamentos de foguetes.

Desde a metade da década de 1960 a NASA e o MSFC (*Marshall Space Flight Center*) vêm desenvolvendo modelos de dispersão para prever o comportamento das nuvens de exaustão na troposfera. Estes modelos servem para medir o impacto dos produtos gerados na queima de combustíveis na qualidade do ar, limite de toxicidade e efeitos bio-ecológicos (BJORKLUND et al., 1982). Os primeiros modelos desenvolvidos e usados pela NASA com esta finalidade foram os modelos multicamadas de dispersão - MDM (*multilayer dispersion models*). Nestes modelos a camada limite planetária é dividida em subcamadas, em cada uma delas considera-se uma distribuição gaussiana e que a estrutura micrometeorológica em cada camada é homogênea. Uma descrição mais detalhada destes modelos pode ser encontrada em (DUMBAULD; BJORKLUND, 1975).

Outros modelos de difusão foram testados e analisados, a fim de verificar sua aplicabilidade no cálculo da dispersão de efluentes. Como exemplos podemos citar: o DISF (*Model for Diffusion in Shear Flow*) e o ADPIC (*Atmospheric Diffusion, Particle-in-Cell model*).

O DISF foi desenvolvido por (HWANG; PESKIN; SO, 1979) com o objetivo de descrever os parâmetros estatísticos que governam a difusão. Para isso, as quantidades Lagrangeanas que descrevem o processo difusivo foram relacionadas a quantidades Eulerianas e estes resultados foram aplicados na equação de difusão. Segundo os autores da obra supracitada, o procedimento de cálculo é consideravelmente mais simples do que aqueles descritos nas teorias de fechamento de ordem mais elevada ou modelos de simulação numérica direta. Os resultados são dados em termos de distribuições gaussianas.

Já o ADPIC é uma aplicação do método *particle-in-cell*, descrito no trabalho de (AMSDEN, 1966), no cálculo da concentração de poluentes sob regime difusivo. O ADPIC é um código em que o domínio de cálculo é dividido em células tridimensionais retangulares de tamanho uniforme. As concentrações são definidas nos centros de cada célula, já os parâmetros necessários aos cálculos (velocidade do vento, velocidade de transporte e outros) são definidos nos vértices de cada célula. Este código possui uma abordagem mista, isto é, cada ciclo do código é dividido em dois passos: um passo Euleriano e um passo Lagrangeano. No passo Euleriano são calculados os parâmetros nos vértices das células e, no passo Lagrangeano, cada partícula em uma dada célula é transportada por um período de tempo a uma velocidade definida, sendo que a nova posição da partícula é determinada por um esquema de volume ponderado. Por fim a nova distribuição de concentração é calculada a partir das novas posições das partículas. Uma descrição mais detalhada deste modelo pode ser

encontrada em (LANGE, 1973).

Os resultados da aplicação destes modelos no cálculo da concentração de poluentes liberados em lançamentos de foguetes podem ser encontrados em (HWANG; GOULD, 1978).

O MDM foi sendo melhorado e revisto, através da análise dos dados obtidos durante lançamentos de foguetes, culminando com o desenvolvimento, em 1982, do REEDM (*Rocket Exhaust Effluent Diffusion Model*) que até hoje é um modelo utilizado nos Estados Unidos. O REEDM é um modelo de dispersão Gaussiana constituído por vários algoritmos projetados para calcular dosagem, picos de concentração e deposição. O REEDM foi desenvolvido considerando-se a nuvem já estabilizada, não sendo aplicável nas fases de liberação e ascensão. Uma revisão deste modelo pode ser encontrada em (BJORKLUND et al., 1982) e (NYMAN, 2009).

Até agora foram apresentados os modelos difusivos que necessitam de algoritmos e esquemas numéricos complexos ou, que pressupõem uma distribuição normal da pluma. Apresentaremos neste trabalho a representação analítica para um modelo Euleriano sem considerar distribuição gaussiana. A vantagem desta abordagem é que, neste caso, não é necessário supor uma distribuição normal para obter a concentração final. Além disso, trataremos de um modelo analítico, ao invés de um conjunto de programas numéricos.

Os modelos Eulerianos são baseados na equação de advecção-difusão, pois os poluentes liberados na atmosfera são dispersos na horizontal por advecção (devido ao vento médio), e na vertical por difusão (devido à difusão turbulenta). Como o presente trabalho baseia-se em uma equação deste tipo, faremos uma breve revisão das técnicas desenvolvidas ao longo dos últimos anos para obter sua solução numérica e analítica.

Há uma vasta literatura a respeito das técnicas numéricas para a este tipo de equação, a principal delas consiste na simulação de larga escala (large eddy simulation-LES). A abordagem LES foi a mais usada para estudar os processos turbulentos e difusivos em camadas limites instáveis e convectivas (ARYA, 2001). As descrições de algumas soluções numéricas podem ser encontradas em (LAMB, 1978), (CARVALHO, 1996) e (NEVES, 2011).

Embora sendo várias as técnicas de solução numérica da equação de advecção-difusão, têm-se uma preocupação em encontrar soluções analíticas para a mesma, isso se deve ao fato de que as soluções analíticas comportam todos os parâmetros explicitamente, facilitando a investigação de suas influências (BUSKE, 2004).

Diversos autores vêm desenvolvendo métodos para obter soluções da equação de advecção-difusão, uma revisão destes trabalhos pode ser encontrada em (BUSKE, 2008) e (WEYMAR, 2016). Daremos ênfase as técnicas que utilizam a Transformada de Laplace.

Um dos métodos que utiliza esta técnica é o ADMM (*Advection-diffusion multilayer method*) que foi abordado nos trabalhos de (VILHENA et al., 1998) e (DEGRAZIA; MOREIRA; VILHENA, 2000). Este método consiste em dividir a camada limite planetária em N subcamadas, em cada uma destas subcamadas considera-se um valor médio para a velocidade do vento e para o coeficiente de difusão e também para as condições de fronteira e de fonte. Com isso, o problema original com coeficiente difusivo variável é substituído por um conjunto de problemas com coeficientes constantes. Em cada um destes problemas aplica-se a Transformada de Laplace, fazendo com que o sistema de equações parciais torne-se um sistema de equações diferenciais ordinárias.

Um estudo-da-arte do método pode ser encontrado em (MOREIRA et al., 2006), onde são apresentados os resultados para os casos uni e bidimensionais, estacionário e transiente. Incluindo também os casos com fechamento não-fickiano.

Mais recentemente, (MOREIRA et al., 2011) desenvolveram um modelo híbrido, com base no ADMM e no REEDM, para calcular a concentração da nuvem de poluentes liberada em um lançamento de foguete. O modelo recebeu a designação de MSDEF ou “Modelo Simulador da Dispersão de Efluentes de Foguetes”. Este modelo baseia-se em uma equação de advecção-difusão tridimensional transiente com coeficiente de deposição gravitacional. Além disso, este modelo considera que a nuvem tenha uma distribuição gaussiana na direção y e as condições de contorno são: fluxo de calor nulo no topo da camada limite e processo de deposição na superfície. Para simular o efeito do tempo de liberação, considerou-se uma função de Heaviside na condição de fonte. As parametrizações usada na descrição da dispersão lateral e do coeficiente de difusão vertical foram as desenvolvidas nos trabalhos de (DEGRAZIA; MANGIA; RIZZA, 1998) e (DEGRAZIA; CAMPOS VELHOS; CARVALHO, 1997), respectivamente.

Uma das características do ADMM é que se faz necessário discretizar a camada limite planetária, isso implica que além de resolver o sistema de equações diferenciais ordinárias resultante seja necessário resolver um sistema linear para determinar as constantes de integração. Uma das técnicas de solução de equações advectivo-difusivas em que não é preciso proceder à discretização do domínio e que vem sendo largamente utilizada é a GITT (*Generalized Integral Transform Technique*).

A GITT é uma técnica que combina uma expansão em série e um operador integral, representando a projeção da variável desconhecida (no nosso caso a concentração) em uma base ortogonal pré-definida. A expansão é feita considerando as autofunções de um problema de Sturm-Liouville auxiliar como componentes da base de expansão. Esta escolha deve-se ao fato de que o espaço formado pelas soluções de um problema

de Sturm-Liouville satisfaz a propriedade de ortogonalidade, isto é:

$$(\Psi_i, \Psi_j) = \delta_{ij} N_i \quad (1)$$

onde Ψ_i e Ψ_j são duas autofunções do espaço de solução do problema de Sturm-Liouville, δ_{ij} é o delta de Kronecker e $N_i^{1/2}$ é chamado de norma da autofunção Ψ_i e é descrita no trabalho de (MIKHAILOV; OZISIK, 1984).

Com base na propriedade descrita acima, constrói-se o operador integral, que ao ser aplicado na equação parcial (já com a concentração expandida em série) transforma-a em um sistema de EDO's. Por fim, trunca-se o somatório da expansão e resolve-se o sistema numericamente.

A GITT faz parte de um conjunto de métodos cuja principal característica é usar expansões truncadas de autofunções (COTTA; MIKHAILOV, 1993), isto equivale a dizer que a única aproximação cometida na técnica consiste no truncamento do somatório da expansão, o que nos permite controlar a precisão de acordo com a ordem de truncamento. Deve-se ficar claro que nestes métodos a ausência de aproximações refere-se a aplicação da expansão e do operador, eventualmente (dependendo do caso) é necessário usar recursos numéricos para obter a solução geral do problema.

É vasta a literatura a respeito da GITT, mas só recentemente ela vem sendo usada no âmbito da poluição atmosférica. (MOURA, 1999) resolveu equações de advecção-difusão estacionária bidimensional e tridimensional com coeficiente de difusividade constante e válido para camada limite convectiva. (CATALDI, 1980) desenvolveu um modelo para fontes pontuais e instantâneas na camada superficial, o modelo descrito baseia-se na equação de advecção-difusão tridimensional transiente e foi resolvido através da técnica da GITT em conjunto com a transformada de Fourier, considerando os coeficientes de difusividade constantes em todas as direções. Posteriormente, (REBEIRO et al., 2002) expandiram os resultados para analisar a concentração de poluentes em toda a camada limite, também usando coeficientes de difusividade constantes.

O autor desta dissertação não tem conhecimento de trabalhos que utilizem a GITT no cálculo da dispersão da *ground cloud*. No entanto, esta técnica trouxe uma vantagem significativa em relação aos modelos anteriores, pois a mesma promove uma redução dimensional do espaço da equação representativa do modelo, facilitando a busca pelas soluções. Como desvantagem podemos citar que esta técnica depende de esquemas numéricos para encontrar a solução do sistema de EDO's resultante.

Pesquisas mais recentes têm considerado os casos com coeficientes de difusão variável, resolvendo-os com a aplicação da GITT, da transformada de Laplace e da diagonalização de matrizes, sendo que estas últimas são usadas para obter a solução da equação transformada resultante da aplicação da GITT. O trabalho de (WORTMANN; MOURA; VILHENA, 2000) foi um dos primeiros a considerar este caso, resol-

vendo analiticamente o problema unidimensional transiente. Esta metodologia ficou conhecida como GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) (WORTMANN et al., 2005). Posteriormente (TIRABASSI et al., 2006) aplicam a GILTT em um problema bidimensional estacionário, cujas condições de contorno incluem a velocidade de deposição gravitacional.

A vantagem da GILTT consiste em não ser necessário recorrer a esquemas numéricos para resolver o sistema de EDO's resultante, permitindo que o mesmo possa ser resolvido analiticamente. Facilitando o estudo da influência dos parâmetros do modelo na solução geral.

(MOREIRA et al., 2009) apresentam um estudo-da-arte do método GILTT, aplicando-os em diversas classes de equações de advecção-difusão, considerando os casos uni e bidimensionais, estacionários e transientes, incluindo também casos que levam em consideração o fenômeno de deposição e a presença de advecção vertical. São considerados os modelos com fechamento fickiano e não-fickiano. A validação foi realizada comparando-se os resultados obtidos com os dados experimentais de Copenhagen, Prairie Grass, Kinkaid e Hanford.

Posteriormente, (BUSKE et al., 2012) apresentaram a solução para o caso tridimensional estacionário, considerando uma camada limite planetária verticalmente não homogênea, com perfil de vento e coeficientes de difusão turbulenta variáveis com a altura.

Mais recentemente têm-se aplicado a GILTT no cálculo da concentração de poluentes em uma nuvem de exaustão estabilizada. (BAINY, 2015) desenvolve a GILTTR (*GILTT for Rocket Exaust Diffusion*) que é uma aplicação da GILTT a modelagem da dispersão da *ground cloud* para um caso bidimensional com distribuição gaussiana em y . Posteriormente (BAINY; BUSKE; QUADROS, 2015) desenvolvem uma análise das influências das diferentes condições de estabilidade no cálculo da concentração. Seguindo a mesma linha de raciocínio, (QUADROS et al., 2015) efetuam uma análise do efeito da altura da fonte no modelo GILTTR.

Segundo (BAINY; BUSKE; QUADROS, 2015), o GILTTR apresenta uma série de limitações, tais como: a fonte é considerada pontual (uma fonte volume seria mais adequada); e a altura de estabilização da *ground cloud* é hipotética (sem bases científicas), pois devido a complexidade do fenômeno há várias incertezas no cálculo da altura real da pluma, o que se faz neste caso, é utilizar essa altura hipotética como a altura da fonte. Embora alguns modelos mais antigos considerem o fenômeno de ascensão da pluma, não há um consenso sobre o mesmo no caso de uma nuvem de exaustão. Estes fatos evidenciam que a técnica só é aplicável a partir do ponto de estabilização da nuvem.

Na presente dissertação expandimos os resultados da GILTTR para o caso tridimensional, por isso chamamos a técnica de 3D-GILTTR (*Three-Dimensional GILTT*

for Rocket exhaust diffusion). Em um primeiro momento, para fins de comparação, apresentamos os resultados considerando uma fonte pontual. Posteriormente serão apresentados os primeiros resultados da pesquisa para fonte volume, considerando o domínio de cálculo como uma esfera. O autor do presente trabalho está ciente das limitações do modelo a ser apresentado, tais como: o modelo desconsidera os efeitos térmicos e de ascensão da pluma e, portanto, é aplicável somente após o período de estabilização (tal como os outros modelos apresentados anteriormente); e a altura da fonte também será hipotética. Em resumo, daremos ênfase ao processo de dispersão da nuvem de exaustão estabilizada e não ao lançamento de foguetes em si.

Para modelar a dispersão de poluentes é necessário conhecer a estrutura e dinâmica da atmosfera, por este motivo, no próximo capítulo, são apresentados alguns conceitos básicos sobre a camada limite planetária, utilizando como referências, principalmente, os trabalhos de (ARYA, 2001), (STULL, 1988) e (KAIMAL; FINNIGAN, 1994). Além disso, será apresentada a estrutura micrometeorológica sob o Centro de Lançamento de Alcântara (CLA), local onde são efetuados os lançamentos de foguetes no Brasil.

3 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

3.1 Camada Limite Planetária

As condições meteorológicas interferem diretamente na concentração de poluentes em um determinado local, por isso, torna-se necessário compreender a dinâmica e estrutura da atmosfera, bem como os fenômenos que possam, eventualmente, influenciar na dispersão de poluentes sob uma determinada região.

A atmosfera é dividida em camadas, a saber: troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera. Dentre estas, a que mais nos interessa é a troposfera, pois é nesta região que o ser humano vive, sendo, consequentemente, a região mais afetada pelo lançamento dos resíduos provenientes das atividades humanas. É nesta camada que ocorrem os fenômenos meteorológicos e, além disso, a troposfera é aquecida por baixo, isto é, a radiação solar aquece a superfície da terra, que por sua vez, ao irradiar calor, aquece o ar nas proximidades da superfície. Esta última característica torna a troposfera a região mais importante no estudo da dispersão de poluentes, pois a diferença de temperatura ocasionada pelo aquecimento solar permite o desenvolvimento dos grandes turbilhões convectivos, característicos do processo de dispersão.

Em latitudes médias a troposfera estende-se do solo até uma altura aproximada de 11 quilômetros, no entanto, os processos de transporte próximos à superfície terrestre modificam a região entre 100 e 3000m da atmosfera, criando o que se chama camada limite. Por isso é comum dividir a troposfera em duas partes: a camada limite planetária, que vai da superfície terrestre até uma altura que varia de 100 a aproximadamente 3000 metros; e a atmosfera livre, que se estende do topo da camada limite até a tropopausa (região de transição entre a troposfera e estratosfera).

(STULL, 1988) define a camada limite como a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da terra, e responde a forçantes superficiais com uma escala de tempo de uma hora ou menos. Estes forçantes incluem: empuxo, evaporação e transpiração, transferência de calor, emissão de poluentes e modificações de fluxo induzidas pelo terreno, tais como orografia e textura da superfície.

Como visto anteriormente, a troposfera é aquecida pela radiação da superfície terrestre, fazendo com que a camada limite tenha uma grande variação de temperatura durante o dia, o que não ocorre a grandes altitudes. Esta variação diurna deve-se principalmente a absorção de energia solar pela superfície terrestre, a qual é responsável por cerca de 90% da absorção térmica. O restante é absorvido diretamente pela camada limite. O solo aquecido, por sua vez, força as mudanças na camada limite via radiação e condução térmica.

Na camada limite planetária (CLP) o transporte de energia, *momentum* e poluentes é dominado na horizontal pelo vento médio e na vertical pela turbulência. São comuns na camada limite ventos horizontais com velocidades variando de 2 a 10 m/s, com ventos mais lentos próximos ao solo devido a fricção, já a turbulência ocorre com frequência nas proximidades da superfície terrestre. Fora da camada limite, a turbulência é encontrada principalmente em proximidades de correntes de jatos onde ventos fortes podem favorecer seu aparecimento.

De acordo com a técnica de fechamento utilizada (técnica para descrever quantidades desconhecidas em termos de valores conhecidos em uma equação), a turbulência pode ser entendida de duas maneiras: para um fechamento local, assume-se que a turbulência é análoga a difusão molecular; e em um fechamento não-local, a turbulência é considerada como a sobreposição de turbilhões com tamanhos que variam de 1 mm até 3000 m de diâmetro. A contribuição destas diferentes escalas de turbilhões formam o que se chama de espectro da turbulência. Maiores detalhes sobre as técnicas de fechamento serão dados no próximo capítulo.

Além da turbulência e do vento médio há uma terceira categoria de vento que pode ocorrer na camada limite: as ondas. Estas são observadas frequentemente na camada limite noturna, transportam pouco calor, umidade e poluentes. Entretanto, são responsáveis pelo efetivo transporte de *momentum* e energia. Podem ser geradas localmente pelo vento médio e pelo fluxo sobre obstáculos (STULL, 1988).

A camada limite planetária apresenta diferentes regimes sobre o solo e sobre o oceano. Sobre o oceano a espessura da CLP varia lentamente no espaço e no tempo, isso porque a água tem um alto calor específico, isto é, tem a capacidade de absorver e armazenar uma grande quantidade de calor proveniente do sol sem apresentar grandes variações de temperatura e, apresenta também, uma razoável condutividade para transferir este calor para camadas inferiores, promovendo uma lenta variação da temperatura do oceano. Essa baixa variação térmica significa uma lenta variação nos forçantes da camada limite sobre a região.

Já sobre o solo, a CLP apresenta uma estrutura e desenvolvimento bem definidos, sendo subdividida em 3 componentes: a camada de mistura, a camada residual e a camada limite estável, como pode-se observar na figura (3).

A camada de mistura, que é uma parte da camada limite convectiva ou CBL (*Con-*

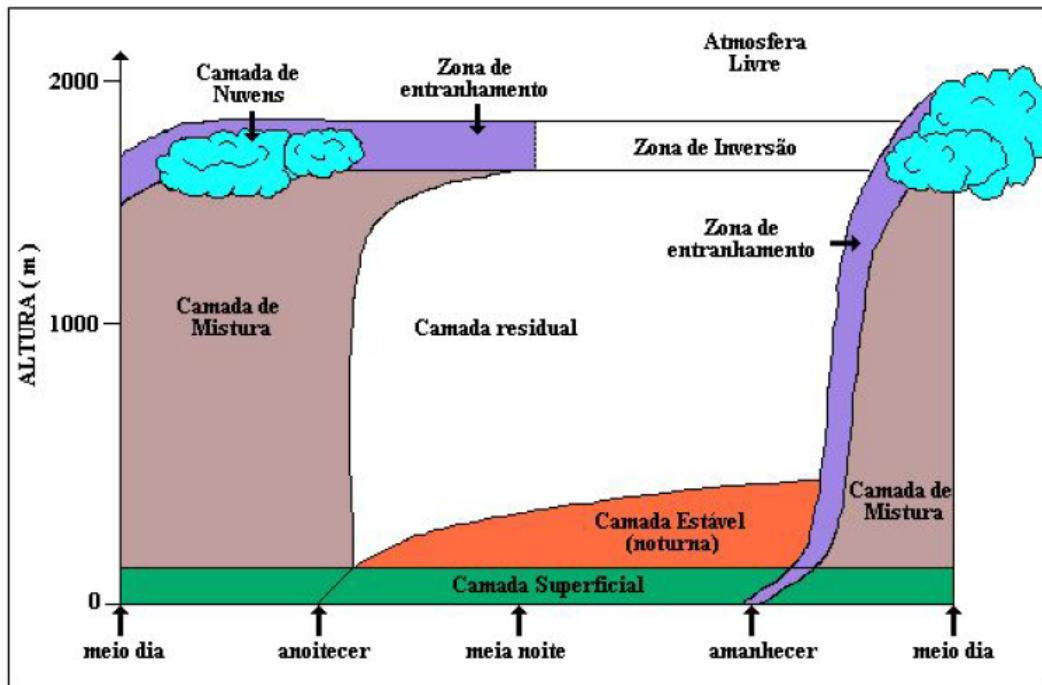


Figura 3: Desenvolvimento da camada limite planetária (STULL, 1988).

*vective Boundary Layer), forma-se meia hora após o nascer do sol, quando o solo aquecido dá origem as correntes termais, que ascendem provocando os turbilhões convectivos na camada limite. A presença destes turbilhões promove uma intensa mistura, na direção vertical, de calor, umidade e momentum. Esta característica também faz com que os poluentes liberados nesta camada apresentem a condição de *looping*, característica de regiões de alta instabilidade. O processo de mistura também pode ser gerado mecanicamente na horizontal pela presença de ventos.*

A escala de tempo é da ordem de 10-20 minutos (STULL, 1988), caracterizando o período de circulação do ar entre a superfície e o topo da camada de mistura. Isso significa que qualquer mudança que ocorra nos forçantes superficiais pode ser transmitida para o resto da camada em um curto período de tempo.

No topo da camada de mistura desenvolve-se uma subcamada estável, chamada de zona de entranhamento, que promove a mistura do ar frio transportado da atmosfera livre com o ar quente que ascende da superfície. Em alguns casos, essa região atua como uma limitante a ascensão das plumas térmicas, restringindo o movimento dos turbilhões convectivos e consequentemente da turbulência.

A zona de entranhamento surge no amanhecer e vai ascendendo na medida em que os turbilhões convectivos alteram o ar nas proximidades do solo, atingindo sua altura máxima perto do meio dia, quando adquire estabilidade, persistindo até o anoitecer. Durante as primeiras horas da manhã, a ascensão ocorre de forma lenta devido a presença de ar frio, proveniente da camada residual. Durante a noite, quando a turbulência na camada de mistura decai, no lugar da zona de entranhamento, forma-se

a zona de inversão, que prevalece até as primeiras horas após o sol nascer, quando novamente ocorre a ascensão da zona de entranhamento.

O entranhamento a que alude o nome da camada refere-se ao processo pelo qual o ar proveniente da base de inversão move-se para o interior da camada convectiva, em regiões de movimentação descendente. Ocasionalmente, termas mais energéticas conseguem adentrar a camada de inversão, mas, na maior parte dos casos, as termas distorcem a interface superior da CBL produzindo convoluções. Vórtices horizontais também podem aparecer se houver condições favoráveis ao seu desenvolvimento aumentando a capacidade de mistura da camada convectiva (KAIMAL; FINNIGAN, 1994).

Entretanto, os maiores gradientes de vento, temperatura e umidade ocorrem nos primeiros 10% ou menos, da camada limite convectiva. Esta região é conhecida como camada superficial, e prevalece durante todo o ciclo, tanto diurno como noturno. Por ter uma altura reduzida (variando de 50 a 100 metros), os fluídos nesta camada não sofrem influência da rotação da terra, sendo que o perfil de vento é determinado pela superfície de fricção e gradiente vertical de temperatura.

Após pôr do sol o solo começa a resfriar rapidamente, perdendo calor para o espaço, e as termas até então presentes, começam a perder energia nas proximidades da superfície. Neste período ocorre um colapso da turbulência, caracterizado pela redução dos vórtices advectivos. Isto ocorre em toda a camada limite, pois o ar sobre a superfície esfria e ascende através da turbulência provocada pela ação dos ventos (STULL, 1988). Isto favorece o desenvolvimento da camada residual, que tem como principal característica o decaimento da turbulência. A camada residual não fica em contato com o solo, pois ela se localiza sobre a camada limite estável.

A camada limite estável forma-se à noite, quando a porção inferior da camada residual interage com o solo. É caracterizada pela estabilidade do ar e ausência de turbulência térmica. Entretanto, pode ocorrer turbulência mecânica, devido a ação do vento, nos fenômenos conhecidos como jatos de baixo nível ou jatos noturnos. Durante os períodos não turbulentos ocorre, essencialmente, a deposição de partículas. Ao contrário da camada convectiva, os poluentes liberados nesta etapa sofrem pouca dispersão vertical, sendo dispersos mais rapidamente na horizontal (STULL, 1988).

Uma importante ferramenta no estudo da camada limite planetária é a teoria de similaridade que permite obter relações entre as variáveis que descrevem o estado da camada limite. Um importante parâmetro, obtido pela teoria da similaridade, no estudo da camada superficial é a velocidade de fricção (u_s), definida como:

$$u_* \equiv \left(\frac{\tau_0}{\rho} \right)^{1/2} \quad (2)$$

onde τ_0 representa a tensão de cisalhamento na superfície e ρ é a densidade do

ar. Esta velocidade varia com natureza da superfície e com a magnitude do vento (KAIMAL; FINNIGAN, 1994).

Entre estas teorias a mais comum é a teoria de similaridade de Monin-Obukhov. Segundo (ARYA, 2001), esta teoria basea-se na hipótese de que em uma camada superficial horizontalmente homogênea, as características do fluxo médio e da turbulência dependem apenas de quatro variáveis independentes: a altura acima da superfície (z); o arrasto superficial (τ_0/ρ); o fluxo de calor turbulento ($H_0/\rho c_p$) e o empuxo ($g/\bar{\theta}$). Aqui H_0 representa o fluxo de calor na superfície, c_p o calor específico, g a aceleração da gravidade e $\bar{\theta}$ a temperatura potencial média.

Entre as constantes de arrasto superficial, fluxo de calor turbulento e empuxo, pode-se estabelecer uma importante relação: o comprimento de Obukhov (L), dado por:

$$L = -\frac{u_*^3}{\kappa \left(\frac{g}{\bar{\theta}}\right) \left(\frac{H_0}{\rho c_p}\right)} \quad (3)$$

onde κ é a constante de Vón Kármán, com valores que variam de 0,35 a 0,42 (STULL, 1988).

A razão z/L é um importante parâmetro de estabilidade e mede a importância relativa entre os efeitos de cisalhamento e os efeitos de empuxo, com isso, se $z \ll |L|$ os efeitos de cisalhamento dominam os efeitos de empuxo, que são praticamente insignificantes nas camadas mais baixas. Por outro lado, se $z \gg |L|$ os efeitos de empuxo sobrepõem-se aos efeitos cisalhantes do vento, gerando a turbulência (ARYA, 2001). Disto podemos concluir que o comprimento de Monin-Obukhov representa a altura acima da superfície na qual o efeito cisalhante do vento possui o mesmo valor que o efeito de empuxo.

Já na camada de mistura uma outra escala gera seus efeitos. Segundo (KAIMAL; FINNIGAN, 1994), nesta região os turbilhões de larga escala forçam uma distribuição quase uniforme de vento e temperatura e o fluido é insensível a presença do solo. Nem o arrasto superficial e nem a altura z exercem alguma influência na turbulência. Aqui os parâmetros de controle são o fluxo de calor turbulento e a altura (z_i) da camada convectiva.

Aqui temos uma nova escala de velocidade e de temperatura, que podem ser escritas em função apenas de z/z_i :

$$w_* = \left[\frac{g}{\bar{\theta}} (\overline{w'\theta'}) z_i \right]^{1/3} \quad (4)$$

$$\theta_* = \frac{(\overline{w'\theta'})}{w_*} \quad (5)$$

onde ($\overline{w'\theta'}$) representa o fluxo de calor turbulento na superfície ¹.

Para mais detalhes sobre parametrizações sugerimos a leitura de (KAIMAL; FINNIGAN, 1994) e (STULL, 1988).

Quanto ao lançamento de foguetes, não há uma escolha específica de horário, ou seja, podem ocorrer lançamentos em qualquer horário do dia ou da noite e, portanto são geradas nuvens de material efluente sob diversas condições micrometeorológicas. Isso deve-se ao fato de que as condições atmosféricas são apenas um dos fatores que impactam no lançamento de foguetes. Segundo especialistas da NASA ² o melhor período para iniciar uma missão é baseado em uma combinação de fatores, tais como: o objetivo e as metas do voo, o tipo de foguete e a trajetória desejada.

Estas variáveis não influenciam apenas o período de lançamento, mas de toda janela de lançamento, a qual pode variar de alguns segundos a várias horas. A janela de lançamento é definida como o período na qual uma determinada missão deve ser iniciada, com o lançamento do foguete. Se a nave pretende encontrar outra nave, um planeta ou outro ponto do espaço, o lançamento deve ser cuidadosamente cronometrado. A dinâmica muda de missão para missão, e determinar a janela de lançamento é uma parte importante do projeto de voo.

Entretanto, se levarmos em consideração apenas as condições micrometeorológicas, percebe-se pelas características de cada camada, que o melhor horário para o lançamento de poluentes (não necessariamente provenientes de lançamento de foguetes), é durante o dia. Neste período prevalece a camada de mistura que, devido a intensa turbulência, promove a rápida dispersão dos poluentes liberados. Por outro lado, o pior horário seria durante a noite, onde a prevalência da camada limite estável e a ausência dos turbilhões impede a rápida dispersão do poluente, podendo o mesmo atingir distâncias maiores e em concentrações mais elevadas.

Além disso, a emissão de poluentes em uma camada estável na proximidade do nascer do sol pode promover o aumento da concentração superficial. Isso ocorre devido ao fenômeno conhecido como *fumigação*, quando uma nova camada de mistura (que forma-se após o nascer do sol) alcança a altura da pluma liberada na camada estável da noite anterior, ocasionando, devido ao entranhamento e intensa turbulência desta nova camada, o transporte de poluentes em direção ao solo (STULL, 1988).

Como mencionado nas seções anteriores, um dos principais centros de lançamento no Brasil é o Centro de Lançamento de Alcântara, no Maranhão. Então, passamos agora, a descrever a estrutura atmosférica sobre a região.

¹A notação apresentada aqui é diferente da encontrada nas obras de referência.

²Disponível em <<https://www.nasa.gov/centers/kennedy/launchingrockets/launchwindows.html>>. Acesso em 27 Jan 2017

3.2 Centro de Lançamento de Alcântara

Inaugurado em 1 de Março de 1993 em substituição ao Centro de Lançamento Barreira do Inferno (recentemente fechado), o Centro de Lançamento de Alcântara (CLA) localiza-se em uma região que apresenta uma série de características que a tornam um local favorável ao lançamento de veículos espaciais. (AVELAR et al., 2012) destacam como exemplos o regime de chuvas bem definido, ventos com intensidade tolerável e ausência de variações significativas de temperatura, além de uma baixa densidade demográfica no local e proximidade ao equador.

Entretanto, a região apresenta características topográficas peculiares, a torre de lançamento localiza-se a 150 metros de uma falésia com altura de aproximadamente 40 metros, como mostrado na Figura 4.



Figura 4: Centro de Lançamento de Alcântara, com detalhe da falésia (MARINHO et al., 2009).

A presença desta variação topográfica é um importante aspecto físico que deve ser considerado, pois o vento inicialmente em equilíbrio com a superfície do oceano, sofre uma mudança de perfil ao atingir a falésia e um novo equilíbrio é alcançado gradualmente. Além disso, o vento interage com a vegetação (árvores de até 3 metros) favorecendo o aparecimento da Camada Limite Interna. A CLI desenvolve-se na presença de variação de rugosidade, isto é, na mudança de uma superfície lisa (oceano) para uma superfície rugosa (continente) (MARINHO et al., 2009).

Foguetes são projetados e construídos para suportarem uma determinada carga pela ação do vento, além do fato de que a sua trajetória, controle e guiagem são determinados pelo perfil do vento próximo à superfície. No Centro de Lançamento de

Alcântara como a rampa de lançamento está numa localização próxima à costa litorânea, os foguetes sofrem influência de intensa turbulência ao ascenderem verticalmente (ROBALLO; FISCH, 2008). Para que o lançamento dos foguetes seja efetuado com segurança e sucesso é necessário conhecer previamente as condições do tempo no momento do lançamento (IRIART, 2015). Além disso, é necessário também, por razões de segurança, determinar os efeitos produzidos pelos resíduos gerados nestes lançamentos.

Ao longo dos últimos anos diversos pesquisadores têm realizados experimentos com túneis de vento para simular as condições da região, como exemplos podemos citar os trabalhos de (ROBALLO; FISCH, 2008), (MARINHO et al., 2009), (FISCH et al., 2010) e (AVELAR et al., 2012). Destacando que o trabalho de (FISCH et al., 2010) tem foco no estudo da camada limite interna. Posteriormente, (NASCIMENTO et al., 2014) simularam numericamente a dispersão de nuvens de exaustão produzidas no centro de lançamento com auxílio do WRF-CMAQ Modeling System. (NASCIMENTO et al., 2015) desenvolvem um modelo para simular nuvens de exaustão baseando-se em uma solução híbrido analítico-numérica da equação de advecção-difusão tridimensional transitória, considerando distribuição Gaussiana e coeficientes de difusividade turbulenta realísticos. Os parâmetros micrometeorológicos foram obtidos com o Weather Research and Forecasting (WRF).

(IRIART, 2015) efetua simulações numéricas de nuvens de exaustão utilizando o sistema WRF com o acoplamento do módulo CHEM que permite a simulação das transformações químicas dos gases gerados na liberação.

Pesquisas mais recentes têm utilizado técnicas de transformada integral. Como mencionado anteriormente, (BAINY, 2015) desenvolve a GILTTR baseando-se no modelo descrito em (MOREIRA et al., 2011) que considera uma distribuição gaussiana em y . No presente trabalho apresentaremos os resultados tridimensionais sem considerar a distribuição normal.

(SCHUCH, 2017) utiliza o modelo WRF na modelagem da nuvem exaustão considerando os efeitos de ascensão da pluma e do movimento do foguete. Realizando estudos na região do CLA.

Como nosso modelo baseia-se na equação de advecção-difusão, passamos ao desenvolvimento da mesma.

4 DESENVOLVIMENTO

4.1 Equação de Advecção-Difusão Tridimensional Transiente

Os modelos Eulerianos de simulação de poluentes são baseados na equação de advecção-difusão que é derivada da equação de conservação de massa dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\mathbf{V} \cdot \nabla c + D\nabla^2 c + S \quad (6)$$

onde c representa a concentração tridimensional $c(x, y, z, t)$; $D\nabla^2 c$ é o termo de difusão molecular com D sendo o coeficiente de difusão; S é o termo fonte/sumidouro; \mathbf{V} é o vetor de velocidade do vento de componentes u , v e w e representam a velocidade nas direções x , y e z respectivamente.

Geralmente o termo de difusão molecular é negligenciado por que a turbulência domina os processos de transporte e dispersão. Com isso, considerando o vetor \mathbf{V} descrito acima, a equação torna-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} - S = 0 \quad (7)$$

Uma das características da camada limite é a presença de turbulência. Com isso, variáveis como temperatura, velocidade e concentração variam irregularmente no tempo e no espaço. Para representar esta irregularidade é comum escrevermos as variáveis em estudo como uma soma de suas médias (representado pela barra superior) com sua parte flutuante (representado pelo asterisco) (ARYA, 1999)¹, ou seja:

$$u = \bar{u} + u^*; \quad v = \bar{v} + v^*; \quad w = \bar{w} + w^*; \quad c = \bar{c} + c^* \quad (8)$$

esta representação é conhecida como decomposição de Reynolds e apresenta uma série de regras, como pode-se observar em (STULL, 1988).

¹Nas obras utilizadas como referências a parte flutuante de uma variável é representada pela linha (u' , v' , etc) na presente dissertação representaremos a flutuação pela estrela (u^* , v^* , etc.), esta mudança de notação faz-se necessária para evitar confusão com a notação de derivada (em que ' representa a derivação) utilizada nas seções posteriores

Aplicando a decomposição de Reynolds na equação (7):

$$\frac{\partial(\bar{c} + c^*)}{\partial t} + (\bar{u} + u^*) \frac{\partial(\bar{c} + c^*)}{\partial x} + (\bar{v} + v^*) \frac{\partial(\bar{c} + c^*)}{\partial y} + (\bar{w} + w^*) \frac{\partial(\bar{c} + c^*)}{\partial z} - S = 0 \quad (9)$$

aplicando as regras da decomposição de Reynolds, segue que:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = -\frac{\partial \bar{u}^* c^*}{\partial x} - \frac{\partial \bar{v}^* c^*}{\partial y} - \frac{\partial \bar{w}^* c^*}{\partial z} + S \quad (10)$$

onde $\bar{u}^* c^*$, $\bar{v}^* c^*$ e $\bar{w}^* c^*$ representam os fluxos turbulentos de c nas direções x , y e z respectivamente.

Entretanto, com esta abordagem, a equação apresenta 4 variáveis desconhecidas (a saber: os fluxos turbulentos e a concentração), tornando o número de variáveis desconhecidas maior do que o número de equações que descrevem o modelo, o que nos leva ao problema de fechamento da turbulência, que impede que a equação possa ser resolvida diretamente. Problemas de fechamento estão associados com a característica não-linear da turbulência (STULL, 1988).

Existem diversas técnicas para contornar o problema de fechamento da equação, a maioria delas consiste em aproximar estes parâmetros em termos de relações similares conhecidas. As principais técnicas de fechamento da turbulência são classificadas de acordo com a ordem dos termos de *momentum* que aparecem na equação e pela utilização de um ou mais pontos na aproximação das variáveis desconhecidas. Neste último caso temos as técnicas de **fechamento local** e de **fechamento não local**.

No fechamento local uma variável desconhecida em algum ponto do espaço é parametrizada por uma variável conhecida no mesmo ponto do espaço. Já no fechamento não local uma variável desconhecida em um ponto do espaço é parametrizada por uma variável conhecida em muitos pontos do espaço. Isto quer dizer que no primeiro caso a turbulência é tratada de forma análoga a difusão molecular enquanto que no segundo a turbulência é tratada como uma superposição de turbilhões.

Nenhuma das duas técnicas de fechamento são exatas, mas ambas podem ser usadas para descrever satisfatoriamente as situações físicas nas quais as parametrizações se fazem necessárias. Nesta dissertação será utilizado um fechamento local de primeira ordem.

No presente modelo aparecem três termos de *momentum* de primeira ordem, a saber, $\bar{u}^* c^*$, $\bar{v}^* c^*$ e $\bar{w}^* c^*$. Segundo (STULL, 1988) um fechamento local de primeira ordem que pode ser usado para reescrever estes termos consiste em reescrevê-los em termos do gradiente de c , ou seja:

$$\bar{u}_j^* c^* = -K \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \quad (11)$$

onde u_j e x_j representas as componentes do vetor \mathbf{V} e (x, y, z) , respectivamente.

Esta técnica de fechamento é conhecida como hipótese de transporte por gradiente ou Teoria K que em analogia a lei de Fick, assume que o fluxo turbulento é proporcional ao gradiente de concentração média. Assim, expandindo a equação (11):

$$\overline{u^* c^*} = -K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (12)$$

$$\overline{v^* c^*} = -K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \quad (13)$$

$$\overline{w^* c^*} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (14)$$

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulenta nas direções x , y e z , respectivamente.

Substituindo (12), (13) e (14) em (10) temos a equação clássica de advecção-difusão tridimensional transiente:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + S \quad (15)$$

Cabe aqui uma observação, os modelos determinísticos para a modelagem da dispersão de poluentes geram resultados para concentração média, como pode-se observar na equação acima em que a variável é a concentração média. Da mesma forma, o modelo apresentado a seguir gera resultados para concentrações médias.

4.2 Modelo de dispersão em lançamento de foguetes

Entre os modelos Eulerianos utilizados na modelagem de poluentes em lançamento de foguetes estão o modelo brasileiro MSDEF, descrito no trabalhos de (MOREIRA et al., 2011) e o GILTTR descrito em (BAINY, 2015) e são baseados na equação:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} - v_g \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) - (\lambda + \Lambda_R) c \quad (16)$$

onde o termo u é o vento médio, v_g é a deposição gravitacional, λ é o coeficiente de deposição físico-química, Λ_R é o coeficiente de remoção e os coeficientes de difusão turbulenta K_y e K_z são funções apenas da altura z .

No MSDEF e na GILTTR, a concentração é obtida considerando-se a distribuição gaussiana da pluma, ou seja:

$$c(x, y, z, t) = f(y) \cdot c(x, z, t) \quad (17)$$

onde a função f é expressa por:

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2}\right] \quad (18)$$

com σ_y representando o parâmetro de dispersão lateral na direção y .

Nos trabalhos, $c(x, z, t)$ é solução da equação de advecção-difusão bidimensional transiente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} - v_g \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) - (\lambda + \Lambda_R) c \quad (19)$$

As condições inicial e de fronteira são dadas por;

$$c(x, z, 0) = 0 \quad (20)$$

$$K_y \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad \text{em} \quad y = y_0, L_y \quad (21)$$

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = V_d c \quad \text{em} \quad z = z_0 \quad (22)$$

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = h \quad (23)$$

onde V_d representa a velocidade de deposição.

Cabe aqui uma observação, o modelo leva em consideração duas deposições: v_g na equação e V_d nas condições de fronteira. A velocidade de deposição gravitacional (v_g) representa uma propriedade dinâmica do modelo, enquanto que a velocidade de deposição seca (V_d) representa o efeito das condições de contorno.

A condição de fonte, é dada por:

$$c(0, z, t) = \frac{Q}{u} [\eta(t_r - t)] \delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0 \quad (24)$$

com Q representando a taxa de emissão do problema bidimensional, t_r o tempo de liberação, η a função degrau de Heaviside, δ a função delta de Dirac e H_s é a altura da fonte.

Neste trabalho, diferentemente dos anteriores, a equação (16) será resolvida sem a necessidade de escrever a solução de forma homogênea em y , utilizando para isso, a técnica 3D-GILTT descrita em (BUSKE et al., 2012). A condição de fonte para o presente modelo, será dada por:

$$c(0, y, z, t) = \frac{Q}{u} [\eta(t_r - t)] \delta(y - y_0) \delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0 \quad (25)$$

4.3 Solução do modelo via GILTT para fonte pontual

Vimos na seção anterior que o modelo considerado no presente trabalho é representado por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} - v_g \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \lambda c \quad (26)$$

com condições inicial, de contorno e de fonte dadas por:

$$c(x, y, z, 0) = 0 \quad (27)$$

$$K_y \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad \text{em} \quad y = y_0, L_y \quad (28)$$

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = V_d c \quad \text{em} \quad z = z_0 \quad (29)$$

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = h \quad (30)$$

$$c(0, y, z, t) = \frac{Q}{u} [\eta(t_r - t)] \delta(y - y_0) \delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0 \quad (31)$$

Note que o modelo utilizado difere do apresentado no MSDEF pelo fato de desconsiderarmos o termo de remoção Λ_R . Procedemos desta forma devido ao fato de que o coeficiente de remoção é constante e possui valores relativamente baixos, ficando o modelo apenas com a constante de decaimento químico como termo sumidouro.

Como o modelo considerado é tridimensional vamos primeiro aplicar a técnica da transformada integral na variável y para reduzir o problema original a um caso bidimensional. Para isso, consideraremos o problema auxiliar de Sturm-Liouville:

$$\begin{aligned} Y_m''(y) + \beta_m^2 Y_m(y) &= 0 \quad \text{em} \quad 0 < y < L_y \\ Y_m'(y) &= 0 \quad \text{em} \quad y = 0, L_y \end{aligned} \quad (32)$$

cujas soluções são as autofunções $Y_m = \cos(\beta_m y)$ com autovalores associados dados por $\beta_m = \frac{m\pi}{L_y}$ (com $m = 0, 1, 2, 3, \dots$).

O próximo passo do método é expandir a concentração tridimensional em termos das autofunções descritas acima, ou seja:

$$c(x, y, z, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \quad (33)$$

Substituindo (33) em (16), segue que:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right) + u \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right) - v_g \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right) = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right) \right) + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right) \right) - \lambda \left(\sum_{m=0}^{\infty} \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right) \end{aligned} \quad (34)$$

Reescrevendo a equação em termos de um único somatório, segue que:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial t} Y_m(y) + u \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} Y_m(y) - v_g \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} Y_m(y) + \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} Y_m(y) \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \bar{c}_m(x, z, t) \frac{d}{dy} [Y_m(y)] \right) + \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} Y_m(y) \right) + \lambda \bar{c}_m(x, z, t) Y_m(y) \right] = 0 \end{aligned} \quad (35)$$

Aplicando a regra de derivação de um produto de funções e utilizando o operador integral $\int_0^{L_y} () Y_n(y) dy$, temos que

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial t} \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy + u \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy + \right. \\ \left. - v_g \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} \right) \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy + \right. \\ \left. - \bar{c}_m(x, z, t) \int_0^{L_y} K'_y Y'_m(y) Y_n(y) dy - \bar{c}_m(x, z, t) \int_0^{L_y} K_y Y''_m(y) Y_n(y) dy + \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} \right) \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy + \right. \\ \left. \lambda \bar{c}_m(x, z, t) \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy \right] = 0 \end{aligned} \quad (36)$$

Lembrando que de (32) segue que $Y''_m(y) = -\beta_m^2 Y_m$ e escrevendo as integrais que aparecem na equação acima da forma:

$$\begin{aligned} \int_0^{L_y} Y_m Y_n dy &= \gamma_{m,n} \\ \int_0^{L_y} K'_y Y'_m(y) Y_n(y) dy &= \zeta_{m,n} \\ \int_0^{L_y} K_y Y_m(y) Y_n(y) dy &= \eta_{m,n} \end{aligned} \quad (37)$$

segue que:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial t} \gamma_{m,n} + u \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} \gamma_{m,n} - v_g \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} \gamma_{m,n} + \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} \right) \gamma_{m,n} - \bar{c}_m(x, z, t) \zeta_{m,n} + \beta_m^2 \bar{c}_m(x, z, t) \eta_{m,n} + \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} \right) \gamma_{m,n} + \lambda \bar{c}_m(x, z, t) \gamma_{m,n} \right] = 0 \quad (38)$$

Para simplificar, algumas hipóteses são feitas, tais como:

- Após a nuvem de exaustão atingir o equilíbrio a advecção na direção x domina os processos dispersivos e portanto o termo difusivo pode ser desconsiderado

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \gg \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \quad (39)$$

- O coeficiente K_y depende apenas de z (BUSKE et al., 2012).

Com estas hipóteses segue que $\zeta_{m,n} = 0$ e $\eta_{m,n} = K_y \gamma_{m,n}$. Aplicando estas relações e dividindo por $\gamma_{m,n}$ temos que:

$$\sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} - v_g \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} + \beta_m^2 K_y \bar{c}_m(x, z, t) + \right. \\ \left. - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} \right) + \lambda \bar{c}_m(x, z, t) \right] = 0 \quad (40)$$

Agrupando os termos semelhantes e truncando a série em M termos, o modelo se resume a um conjunto de $M + 1$ equações advectiva-difusivas bidimensionais transientes, dadas por:

$$\frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial x} - v_g \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}_m(x, z, t)}{\partial z} \right) + \\ \bar{c}_m(x, z, t) (\lambda + \beta_m^2 K_y) = 0 \quad (41)$$

Agora, devemos aplicar o mesmo procedimento para a condição de fonte, ou seja, substituindo (33) em (31), aplicando o operador integral $\int_0^{L_y} () Y_n(y) dy$ e truncando o somatório, temos:

$$\bar{c}_m(0, z, t) \int_0^{L_y} Y_m(y) Y_n(y) dy = \frac{Q}{u} [\eta(t_r - t)] \delta(z - H_s) \int_0^{L_y} \delta(y - y_0) Y_n(y) dy \quad (42)$$

A integral do lado direito, pode ser resolvida usando a propriedade da função delta de Dirac:

$$\int \delta(y - y_0) \phi(y) dy = \phi(y_0) \quad (43)$$

A partir (43) e de (37) podemos escrever a condição de fonte para o problema bidimensional:

$$\bar{c}_m(0, z, t) = \gamma_{m,m}^{-1} \frac{Q}{u} [\eta(t_r - t)] \delta(z - H_s) Y_m(y_0) \quad (44)$$

Para obter a solução das equações bidimensionais que aparecem em (41) utiliza-se a GILTT clássica, cujo primeiro passo consiste em aplicar a Transformada de Laplace em t para transformar o modelo transiente em pseudo-estacionário. Aqui utilizamos a expressão pseudo-estacionário para indicar que a aplicação da transformada de Laplace é usada para reduzir a derivada temporal em uma expressão algébrica, ou seja, a equação continua dependendo implicitamente do tempo no espaço transformado. Então, considere $c_m^*(x, z, r) = \mathcal{L}\{\bar{c}_m(x, z, t); t \rightarrow r\}$.

$$\begin{aligned} rc_m^*(x, y, r) - \bar{c}_m(x, z, 0) + u \frac{\partial c_m^*(x, z, r)}{\partial x} - v_g \frac{\partial c_m^*(x, z, r)}{\partial z} + \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c_m^*(x, z, r)}{\partial z} \right) + c_m^*(x, z, r) (\lambda + \beta_m^2 K_y) = 0 \end{aligned} \quad (45)$$

Pela condição (20) segue que $\bar{c}_m(x, z, 0) = 0$ e a equação reduz-se à:

$$\begin{aligned} u \frac{\partial c_m^*(x, z, r)}{\partial x} - v_g \frac{\partial c_m^*(x, z, r)}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c_m^*(x, z, r)}{\partial z} \right) + \\ c_m^*(x, z, r) (\lambda + \beta_m^2 K_y + r) = 0 \end{aligned} \quad (46)$$

O próximo passo é considerar um problema auxiliar de Sturm-Liouville e expandir a concentração em termos de autofunções. Este problema é descrito em termos das condições de contorno dadas em (29) e (30) e é da forma:

$$\begin{aligned} \Psi_l''(z) + \alpha_l^2 \Psi_l(z) &= 0, \quad 0 < z < h \\ \Psi_l'(z) &= 0, \quad z = h \\ K_z \Psi_l'(z) - V_d \Psi_l(z) &= 0, \quad z = z_d = z_0 \end{aligned} \quad (47)$$

sendo z_0 a rugosidade do terreno e z_d a altura de referência.

A solução deste problema é:

$$\Psi_l(z) = \cos \alpha_l(z - h) \quad (48)$$

onde α_l são os autovalores do problema auxiliar e são dados pela equação transcendental:

$$\frac{V_d}{K_z} = \alpha_l \tan[\alpha_l(h - z_0)] \quad (49)$$

que pode ser avaliada pelo método de Newton-Raphson.

Agora, usamos (48) para reescrever a concentração como uma série da forma:

$$c_m^*(x, z, r) = \sum_{l=0}^{\infty} \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi_l(z) \quad (50)$$

O problema, agora, se reduz a encontrar os valores de $\bar{c}_{m,l}(x, r)$.

Substituindo (50) em (46) tem-se:

$$\begin{aligned} & u \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi_l(z) \right) - v_g \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi_l(z) \right) + \\ & - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi_l(z) \right) \right) + \sum_{l=0}^{\infty} \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi_l(z) (\lambda + \beta_m^2 K_y + r) = 0 \end{aligned} \quad (51)$$

escrevendo como um único somatório:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} \left[u \frac{\partial \bar{c}_{m,l}(x, r)}{\partial x} \Psi_l(z) - v_g \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi'_l(z) - \bar{c}_{m,l}(x, r) \frac{\partial}{\partial z} (K_z \Psi'_l(z)) + \right. \\ & \left. \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi_l(z) (\lambda + \beta_m^2 K_y + r) \right] = 0 \end{aligned} \quad (52)$$

Aplicando o operador integral $\int_0^h () \Psi_j(z) dz$:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{\partial \bar{c}_{m,l}(x, r)}{\partial x} \int_0^h u \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz - v_g \bar{c}_{m,l}(x, r) \int_0^h \Psi'_l(z) \Psi_j(z) dz + \right. \\ & - \bar{c}_{m,l}(x, r) \int_0^h K'_z \Psi'_l(z) \Psi_j(z) dz - \bar{c}_{m,l}(x, r) \int_0^h K_z \Psi''_l(z) \Psi_j(z) dz + \\ & \left. \bar{c}_{m,l}(x, r) (\lambda + r) \int_0^h \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz + \beta_m^2 \bar{c}_{m,l}(x, r) \int_0^h K_y \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz \right] = 0 \end{aligned} \quad (53)$$

Relembrando que do problema de Sturm-Liouville temos que $\Psi''_l(z) = -\alpha_l^2 \Psi_l(z)$, reagrupando a equação pela ordem de derivação de $\bar{c}_{m,l}$ e truncando o somatório, temos:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^L \left[\frac{\partial \bar{c}_{m,l}(x, r)}{\partial x} \int_0^h u \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz + \bar{c}_{m,l}(x, r) \left(-v_g \int_0^h \Psi'_l(z) \Psi_j(z) dz \right. \right. \\ & \left. \left. - \int_0^h K'_z \Psi'_l(z) \Psi_j(z) dz + \alpha_l^2 \int_0^h K_z \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz + \right. \right. \\ & \left. \left. + (\lambda + r) \int_0^h \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz + \beta_m^2 \int_0^h K_y \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (54)$$

Fazendo:

$$C(x, r) = (\bar{c}_{m,l}) \quad (55)$$

$$B = (b_{l,j}) = \int_0^h u \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz \quad (56)$$

$$E = (e_{l,j}) = -v_g \int_0^h \Psi'_l(z) \Psi_j(z) dz - \int_0^h K'_z \Psi'_l(z) \Psi_j(z) dz + \alpha_l^2 \int_0^h K_z \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz + (\lambda + r) \int_0^h \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz + \beta_m^2 \int_0^h K_y \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz \quad (57)$$

podemos reescrever a equação como:

$$BC''(x, r) + EC(x, r) = 0 \quad (58)$$

multiplicando por B^{-1} e chamando $F = B^{-1}E$ segue que:

$$C''(x, r) + FC(x, r) = 0 \quad (59)$$

O problema transformado, descrito em (59), é resolvido utilizando-se transformada de Laplace na variável x . Assim, considere $\bar{C}(s, r) = \mathcal{L}\{C(x, r); x \rightarrow s\}$.

$$s\bar{C}(s, r) - C(0, r) + F\bar{C}(s, r) = 0 \quad (60)$$

O vetor $C(0, r)$ é obtido através da aplicação da GILTT em (44). O que resulta em:

$$C(0, r) \int_0^h \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz = \gamma_{m,m}^{-1} Q \left[\frac{e^{-r.t_r}}{r} \right] Y_n(y_0) \int_0^h (1/u) \delta(z - H_s) \Psi_j(z) dz$$

aplicando a propriedade (43) em z e considerando $A = (a_{l,j}) = \int_0^h \Psi_l(z) \Psi_j(z) dz$ segue que:

$$C(0, r) = A^{-1} \gamma_{m,m}^{-1} Q \left[\frac{e^{-r.t_r}}{r} \right] Y_n(y_0) \frac{\Psi_j(H_s)}{u(H_s)} \quad (61)$$

Pela propriedade de ortogonalidade dos operadores, segue que $A = I$ e $\gamma_{m,m} = 1$, e a condição de fonte torna-se:

$$C(0, r) = Q \left[\frac{e^{-r.t_r}}{r} \right] Y_n(y_0) \frac{\Psi_j(H_s)}{u(H_s)} \quad (62)$$

Cabe lembrar aqui, que a GILTT consiste em aplicar a transformada de Laplace em t , expandir a concentração em termos de autofunções de Sturm-Liouville e aplicar o operador integral ortogonal adequado.

Voltando ao problema (60), vamos supor que F seja não singular e não degene-

rada. Desta forma, podemos decompô-la em termos de autovalores e autovetores da seguinte maneira:

$$F = X.D.X^{-1}$$

onde X e X^{-1} são, respectivamente, a matriz de autovetores e sua inversa e D é a matriz diagonal formada pelo autovalores $d_i (i = 1, 2, \dots, L)$ de F . Assim:

$$s\bar{C}(s, r) + (X.D.X^{-1})\bar{C}(s, r) = C(0, r) \quad (63)$$

ou ainda,

$$(sI + X.D.X^{-1})\bar{C}(s, r) = C(0, r) \quad (64)$$

com I sendo a matriz identidade.

Note que como $I = XX^{-1}$, a matriz dos autovetores e sua inversa podem ser colocadas em evidência de forma que a equação torna-se:

$$X.(sI + D).X^{-1}\bar{C}(s, r) = C(0, r) \quad (65)$$

cuja solução é dada por:

$$\bar{C}(s, r) = X.(sI + D)^{-1}.X^{-1}.C(0, r) \quad (66)$$

Para obter a solução do problema original iniciamos com a inversão da Transformada de Laplace na variável transformada s . Faça $C(x, r) = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{C}(s, r)\}; s \rightarrow x\}$, disto e de (66) segue que:

$$C(x, r) = X.\mathcal{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\}.X^{-1}.C(0, r) \quad (67)$$

Para calcular a inversa que aparece no lado direito da equação acima, vamos determinar a forma da matriz $(sI + D)^{-1}$. Lembrando que D é a matriz diagonal dos autovalores de F .

$$(sI + D) = \begin{bmatrix} s + d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + d_L \end{bmatrix} \quad (68)$$

Da álgebra matricial, segue que:

$$(sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{s+d_L} \end{bmatrix} \quad (69)$$

Por fim, pela teoria da transformada de Laplace, sabemos que:

$$\mathcal{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{-d_L x} \end{bmatrix} = P(x) \quad (70)$$

De (70) e de (67) segue que:

$$C(x, r) = X \cdot P(x) \cdot X^{-1} \cdot C(0, r) \quad (71)$$

De (55), segue que todos os termos da série dada em (50) estão definidos e podemos escrever a concentração do problema bidimensional pseudo-estacionário.

$$c_m^*(x, z, r) = \sum_{l=0}^{\infty} \bar{c}_{m,l}(x, r) \Psi_l(z) \quad (72)$$

Cabe salientar que, até o presente momento, nenhuma aproximação numérica foi feita durante o processo de obtenção da solução, exceto os truncamentos dos somatórios das séries. Ou seja, até agora a solução pode ser considerada analítica a menos de erro de truncamento nos somatórios.

O próximo passo para obter a solução do problema original consiste em aplicar a transformada inversa de Laplace em r na solução bidimensional pseudo-estacionária, para encontrar a solução bidimensional transiente. Então, aplicando a forma complexa da inversa de Laplace em (72), temos que:

$$c_m(x, z, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^h c_m^*(x, z, r) e^{rt} dr \quad (73)$$

Devido à complexidade da expressão acima, não é possível determinarmos as singularidades da integral que aparece no lado direito, inviabilizando desta forma, o uso do Teorema dos Resíduos para avaliar analiticamente o termo. Portanto uma aproximação numérica faz-se necessária para obtermos o valor da integral.

Uma solução aproximada para a integral supracitada pode ser obtida pelo método da quadratura de Gauss-Legendre descrita em (STROUD; SECREST, 1966), que ao

ser aplicada na equação acima, resulta em:

$$c_m(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k c_m^*(x, z, P_k/t) \quad (74)$$

que também pode escrita em termos do somatório (50):

$$c_m(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \sum_{l=0}^L \bar{c}_{m,l}(x, P_k/t) \Psi_l(z) \quad (75)$$

na qual A_k , P_k e M são, respectivamente, os pesos, as raízes e a ordem da quadratura considerada e estão tabulados em vários trabalhos sobre inversão numérica.

Optamos neste trabalho em utilizar a quadratura gaussiana por que a mesma vem sendo largamente utilizada em problemas de dispersão, o que facilita a comparação dos resultados obtidos. Além disso, por ter seus valores tabulados a técnica é facilmente incorporada ao algoritmo, sem necessidade de simular algoritmos auxiliares para o cálculo dos pontos de quadratura.

Por fim, encontrada a solução bidimensional transitente, a solução tridimensional transitente pode ser obtida aplicando-se a relação descrita em (33). Obtendo assim, a representação analítica para o problema proposto.

4.4 Solução do modelo para fonte volume

Para uma fonte volume devemos considerar que a *ground cloud* tenha uma forma específica e bem definida, como por exemplo uma esfera. Após, efetuamos uma discretização desta esfera, ou seja, consideramos S_i pontos nesta esfera e cada um destes pontos é tratado como uma nova fonte.

As coordenadas destas fontes (x_f, y_f, z_f) são dadas pelas relações:

$$\begin{pmatrix} x_f \\ y_f \\ z_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_c \\ y_c \\ z_c \end{pmatrix} + R \begin{pmatrix} \sin(\gamma) \cos(\xi) \\ \sin(\gamma) \sin(\xi) \\ \cos(\gamma) \end{pmatrix} \quad (76)$$

onde $(x_c, y_c, z_c)^T$ é o centro da nuvem, R é o raio, γ e ξ são os ângulos com os eixos z e x respectivamente. Para facilitar os cálculos consideraremos que o centro da nuvem coincide com a origem do sistema coordenado.

Assim, nosso modelo ao considerar um conjunto com S_i fontes torna-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} - v_g \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \lambda c \quad (77)$$

com as condições de contorno e a nova condição de fonte dadas por:

$$c(x, y, z, 0) = 0 \quad (78)$$

$$K_y \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \quad \text{em} \quad y = y_0, L_y \quad (79)$$

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = V_d c \quad \text{em} \quad z = z_0 \quad (80)$$

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = h \quad (81)$$

$$c(0, y_f, z_f, t) = \frac{q_0}{u} [\eta(t) - \eta(t - t_r)] \delta(y_f - y_0) \delta(z_f - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0 \quad (82)$$

onde q_0 representa a quantidade de material existente na nuvem. Uma forma simplificada de determinar este valor é através da fórmula:

$$q_0 = tr * Q \quad (83)$$

onde tr é o tempo de emissão e Q a taxa de emissão.

Note que, de fato, esta é uma forma simplificada uma vez que estamos desconsiderando as possíveis perdas de material ocorridas nos dois estágios anteriores à estabilização térmica.

Para obter a solução deste problema utilizaremos o método descrito na seção anterior e o conceito de superposição de fontes. Então, para cada uma das S_i fontes consideradas resolve-se o modelo utilizando a 3D-GILTTR com a condição de fonte dada em (82) e após, soma-se os resultados obtidos com cada aplicação. Em termos matemáticos:

$$C(x, y, z, t) \propto \sum_{i=1}^{S_i} C(x, y, z, t; x_f, y_f, z_f) \quad (84)$$

Assumiremos aqui que a constante de proporcionalidade do problema acima seja igual a 1, ou seja:

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{S_i} C(x, y, z, t; x_f, y_f, z_f) \quad (85)$$

Cabe aqui uma observação: esta descrição é de um modelo discreto. Entretanto, é possível construir um modelo considerando um conjunto contínuo de fontes. Abordaremos neste trabalho apenas o caso discreto, ficando o caso contínuo como uma ideia para trabalhos futuros.

5 PARÂMETROS E DADOS

5.1 Parâmetros micrometeorológicos

Por representarem processos turbulentos na CLP, os modelos advectivos-difusivos, são dependentes das parametrizações escolhidas, pois estas são elaboradas para descrever alguma condição predominante na atmosfera ou para descrever algum fenômeno em alguma região específica da camada limite. Desta maneira, a forma como as parametrizações são abordadas podem influenciar a forma como o fenômeno de dispersão é tratado.

Na seção (3.1) já abordamos dois importantes parâmetros de estabilidade: o comprimento de Obukhov (L) e a razão z/L , usados para descrever a teoria de similaridade de Monin-Obukhov. Estes dois parâmetros também podem ser escritos em termos de um terceiro parâmetro, conhecido como número de Richardson (R_i), que pode ser encontrado nos trabalhos de (KAIMAL; FINNIGAN, 1994) e (BAINY, 2015).

Em uma teoria baseada em uma hipótese de similaridade busca-se uma função que relate certos parâmetros dimensionais. A análise adimensional, utilizada nestes casos, não nos fornece nenhuma informação sobre a forma que estas relações podem adquirir, sendo necessário determiná-las empiricamente através de observações realizadas durante experimentos específicos para este propósito.

Segundo (ARYA, 2001), as funções de similaridade (gradientes adimensionais de calor e momento) podem ser escritas como:

$$\Phi_m = \Phi_h = \left(1 + 4,7 \frac{z}{L}\right) \quad (86)$$

para condições estáveis ($z/L \geq 0$), e

$$\Phi_m^2 = \Phi_h = \left(1 - 15 \frac{z}{L}\right)^{-1/2} \quad (87)$$

para condições instáveis ($z/L < 0$).

Com estas funções de similaridade podemos escrever as escalas de velocidade de

fricção, velocidade convectiva e temperatura como:

$$u_* = \frac{\kappa z}{\Phi_m} \frac{\Delta u}{\Delta z} \quad (88)$$

$$w_* = \left(\frac{-g u_* \theta_* h}{\bar{\theta}} \right)^{1/3} \quad (89)$$

$$\theta_* = \frac{\kappa z}{\Phi_h} \frac{\Delta \bar{\theta}}{\Delta z} \quad (90)$$

5.2 Deposição seca

Os processos de deposição (seca e úmida) são importantes mecanismos de remoção de poluentes da atmosfera, principalmente poluentes particulados, como poeira, aerossóis e alumínio. Segundo (SEINFELD; PANDIS, 2006) os mecanismos envolvidos no processo de deposição seca são complexos e estão relacionados ao nível de turbulência na atmosfera, a propriedades químicas da espécie (poluente) e a natureza da própria superfície. Ainda de acordo com o mesmo autor supracitado, o processo de deposição pode ter sua interpretação facilitada se o considerarmos de forma análoga ao processo de resistência elétrica. Assim, o processo é avaliado levando-se em consideração 3 resistências em série: a resistência aerodinâmica r_a , a resistência quase-laminar r_b , e a resistência de cobertura r_c (também conhecida como resistência de superfície, e está relacionado a presença de cobertura vegetal sobre a superfície). Matematicamente, a resistência total r_t é a soma das 3 resistências individuais e é equivalente, por definição, ao inverso da velocidade de deposição, ou seja:

$$V_d^{-1} = r_t = (r_a + r_b + r_c) + V_g^{-1} \quad (91)$$

onde V_g é a velocidade de deposição gravitacional.

5.2.1 Resistência aerodinâmica

A resistência aerodinâmica é independente da espécie química ou se um gás ou partícula está envolvida, exceto que a deposição gravitacional deve ser levada em consideração para partículas maiores. Segundo (ZHANG et al., 2001) a resistência aerodinâmica pode ser escrita como:

$$r_a = \frac{\ln(z_{ref}/z_0) - \Psi_h}{k u_*}$$

na qual z_0 é a rugosidade do terreno, z_{ref} é a altura de referência onde o parâmetro está sendo avaliado, k é a constante de Von Karmán e Ψ_h é a função de estabilidade

dada por:

$$\Psi_h = \begin{cases} -5z_{ref} & \text{se } \zeta \geq 0 \\ \exp[0,598 + 0,390 \ln(-z_{ref}/L) - 0,090(\ln(-z_{ref}/L))^2] & \text{se } \zeta \leq 0 \end{cases}$$

5.2.2 Resistência quase-laminar

Relaciona-se a uma suposta camada quase-laminar adjacente a superfície ao longo da qual a resistência depende de propriedades moleculares da substância e de características da superfície. Há diferentes formulações para hipóteses de poluente gasoso ou particulado.

No caso de um poluente gasoso a resistência depende da difusividade do gás. Esta dependência é dada em termos do número de Schmidt:¹

$$Sc = \frac{v}{D_s}$$

onde, v representa a viscosidade cinemática do ar e D_s é a difusividade do gás.

De onde segue que:

$$r_b = \frac{5Sc^{2/3}}{u_*}$$

Já para partículas, tem-se que a resistência quase-laminar é dada por:

$$r_b = \frac{1}{\epsilon_0 u_*(E_B + E_{IM} + E_{IN})R_1}$$

na qual ϵ_0 é uma constante empírica (cujo valor é 3.0); E_B , E_{IM} e E_{IN} são as eficiências de coleta respectivamente, por difusão browniana, impacto e interceptação; e R_1 é o fator de correção que representa a fração de partículas que são devolvidas à atmosfera.

O transporte por difusão browniana depende do número de Schmidt, onde D_b representa a difusividade browniana de partículas, descrito como:

$$D_b = \frac{k_b T C_c}{3\pi\mu D_p}$$

sendo $k_b = 1,38 \times 10^{-23} JK^{-1}$ a constante de Boltzmann; $\mu = 1,8 \times 10^{-5} kgm^{-1}s^{-1}$ o coeficiente de viscosidade dinâmica do ar; T a temperatura do ar; D_p o diâmetro da partícula; e C_c o fator de Cunningham que depende do caminho livre médio das

¹Alguns parâmetros apresentados nesta seção não possuem a mesma notação que nas obras originais de (SEINFELD; PANDIS, 2006) e (ZHANG et al., 2001), esta mudança se faz necessária para evitar confusão com seções anteriores

moléculas do ar ($\lambda_a = 6,7 \times 10^{-8} m$) e do diâmetro das partículas:

$$C_c = 1 + \frac{2\lambda_a}{D_p} (1,257 + 0,4e^{-0,55D_p/\lambda_a})$$

desta forma:

$$E_B = Sc^{-\gamma}$$

onde γ é um valor entre $1/2$ e $1/3$ e depende do uso da terra no local.

O coeficiente de coleta por impacto depende do número de Stokes (St) para superfícies vegetadas que, por sua vez, depende da velocidade de sedimentação particular:

$$\begin{aligned} E_{IM} &= \frac{St^2}{1+St^2} \\ St &= \frac{V_g u_*}{gA} \\ V_g &= \frac{\rho g d^2 C_c}{18\mu} \end{aligned} \tag{92}$$

com g sendo a aceleração da gravidade ($9,81 ms^{-2}$); A é um raio característico tabulado em função do uso do solo e da categoria sazonal; ρ é a densidade da partícula; e d é o diâmetro da partícula.

Por fim, a eficiência de coleta por interceptação depende apenas do diâmetro das partículas e do raio característico (A),

$$E_{IN} = \frac{1}{2} \left(\frac{D_p}{A} \right)^2$$

5.2.3 Resistência superficial

É mais complexa pois depende da natureza da superfície, sendo, de acordo com a superfície considerada, subdividida em três categorias: resistência da água; resistência do solo; e resistência foliar. Neste último caso, a resistência está relacionada a presença de cobertura vegetal.

Para uma discussão mais detalhada deste tópico sugerimos a leitura de (SEINFELD; PANDIS, 2006) e (ZHANG et al., 2001).

5.3 Parametrização da turbulência

Na literatura existem diversas formulações para os coeficientes de difusão vertical e horizontal. Neste trabalho serão usadas as formulações sugeridas por Degrazia:

- Coeficiente de difusão vertical:

- Para condições instáveis (DEGRAZIA; CAMPOS VELHOS; CARVALHO, 1997):

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

- Para condições estáveis (DEGRAZIA et al., 2002):

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

em que h é o topo da camada limite e $\Lambda = L(1 - z/h)^{5/4}$.

- Coeficiente de difusão lateral:

- Para condições instáveis (DEGRAZIA; CAMPOS VELHOS; CARVALHO, 1997):

$$K_y = \frac{\sqrt{\pi} \sigma_v}{16(f_m)_v q_v}$$

onde,

$$\begin{aligned} \sigma_v^2 &= \frac{0,98 c_v}{(f_m)_v^{2/3}} \left(\frac{\psi_\epsilon^{2/3}}{q_v} \right) \left(\frac{z}{h} \right) w_*^2 \\ q_v &= 4,16 \frac{z}{h} \\ (f_m)_v &= 0,16 \\ \psi_\epsilon^{1/3} &= \left[\left(1 - \frac{z}{h} \right)^2 \left(-\frac{z}{L} \right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

sendo w_* a escala de velocidade convectiva, L o comprimento de Monin-Obukhov, σ_v o desvio padrão Euleriano da velocidade de turbulência longitudinal, q_v é a função de estabilidade, ψ_ϵ é a função de dissipação molecular, $(f_m)_v$ é o pico do comprimento de onda do espectro de velocidade turbulenta e $c_v = \alpha_v \alpha_u (2\pi\kappa)^{-2/3}$ com $\alpha_u = 0,50 \pm 0,05$, $\alpha_v = 4/3$ e κ é a constante de Von Karman ($\kappa = 0,4$).

- Para condições estáveis (DEGRAZIA; VILHENA; MORAES, 1996):

$$\begin{aligned} \frac{K_y}{u_* h} &= \frac{2\sqrt{\pi} 0,64 a_v^2 (1 - z/h)^{\alpha_1} (z/h) X'}{[2\sqrt{\pi} 0,64 (z/h) + 16 a_v (f_m)_v (1 - z/h)^{\alpha_1/2} X']^2} \\ &\quad \times [2\sqrt{\pi} 0,64 a_v^2 (z/h) + 8 a_v (f_m)_v (1 - z/h)^{\alpha_1/2} X'] \end{aligned}$$

onde $(f_m)_v = (f_m)_{n,v} (1 + 3,7(z/\Lambda))$ é a frequência do pico espectral, $(f_m)_{n,v} = 0,33$ é a frequência do pico espectral em uma estratificação neu-

tra, $\Lambda = L(1 - z/h)^{1,5\alpha_1 - \alpha_2}$ ($\alpha_1 = 1,5; \alpha_2 = 1$) é o comprimento de Monin-Obukhov local, $a_v = (2,7c_v)^{1/2}/(f_m)_{n,v}^{1/3}$ com $c_v = 0,4$, u_* é a velocidade de fricção e $X' = xu_*/\bar{u}z$ representa a distância adimensional.

5.4 Perfil de vento

O perfil vertical do vento médio empregado neste modelo, segue a lei de potência, descrita em (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

$$\frac{u}{u_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^p$$

onde u e u_1 são as velocidades do vento medidas nas alturas de referência z e z_1 , e p é um expoente que depende da intensidade da turbulência e da estabilidade atmosférica.

5.5 Dados para validação do modelo

Para validação do modelo usaremos os dados do experimento de Copenhagen. Este experimento consistiu na liberação de hexafluoreto de enxofre a uma fonte de 115 metros de altura e as amostras foram colhidas ao nível do solo a distâncias de 2,4 e 6 km da fonte. A região do experimento era majoritariamente urbana, com comprimento de rugosidade de 0,6 m e sob condições convectivas e neutras (GRYNING, 1981). Mais informações sobre estes experimentos e a respectiva tabela com os dados micrometeorológicos podem ser encontrados em (BUSKE, 2004).

O autor da presente dissertação está ciente das limitações e imprecisões cometidas ao utilizar este conjunto de dados na validação no modelo. Como exemplo destas imprecisões podemos citar: a diferença de região na zona de análise, pois o experimento de Copenhagen foi realizado em uma zona predominantemente urbana enquanto que a *ground cloud* é gerada em regiões não urbanas; e o tipo de fonte modelada, já que Copenhagen simula fontes pontuais contínuas enquanto as nuvens de exaustão são melhor representadas por uma fonte volume. Estes dois itens permitem concluir que o experimento de Copenhagen não é adequado a validação do modelo.

No entanto, uma vez que não existem dados experimentais de concentração em lançamentos de foguetes para validação, optou-se em utilizar os dados de Copenhagen apenas para verificação do algoritmo, ou seja, somente para verificar a consistência do algoritmo desenvolvido com dados experimentais. Uma vez concluído que o esquema desenvolvido prove-se adequado para simular situações experimentais bem conhecidas, o mesmo será utilizado para simular a dispersão da *ground cloud* com dados micrometeorológicos do Centro de Lançamento de Alcântara.

5.6 Índices estatísticos

A forma de avaliação e validação de modelos mais utilizada consiste na utilização e análise de índices estatísticos. Usaremos os índices descritos em (HANNA, 1989). Usaremos os subíndices o e p para observado e predito, respectivamente. σ é o desvio padrão e a barra superior indica a média. Destaca-se aqui que estes parâmetros serão utilizados apenas na verificação do algoritmo, já que não existem dados observacionais sobre concentração em lançamentos de foguetes.

Os índices são definidos pelas relações:

- Erro Médio Quadrático Normalizado (Normalized Mean Square Error):

$$\text{NMSE} = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o} \overline{C_p}}$$

é uma medida dos desvios entre as concentrações preditas e observadas. é uma medida adimensional, cujo valor ideal é zero;

- Coeficiente de Correlação:

$$COR = \frac{\overline{(C_o - \overline{C}_o)(C_p - \overline{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p}$$

Descreve o quanto as variações dos valores observados são representados pelo modelo. O valor ideal é 1;

- Desvio fracional padrão (Fractional shift):

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

Compara os desvios-padrão observado e simulado. Para este índice, o valor ideal é zero.

6 RESULTADOS

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos. Como mencionado nas seções anteriores, serão realizadas diversas simulações com o objetivo de validar o algoritmo e analisar a influência de diversos parâmetros do modelo através de testes de sensibilidade. Em cada subseção que se segue são apresentados os valores dos parâmetros utilizados nos testes.

As simulações foram realizadas em um microcomputador com processador Intel Core i3 de 2.1 GHz. O modelo foi programado em linguagem FORTRAN 90 e as simulações levaram poucos minutos tanto na validação quanto nos testes de sensibilidade. Os gráficos foram gerados com auxílio do software *Origin*.

6.1 Experimentos de Copenhagen

Como mencionado na seção anterior os experimentos de Copenhagen serão utilizados apenas para verificação do algoritmo desenvolvido.

Para a simulação foram considerados os valores de validação descritos em (BAINY, 2015), a saber, $V_d = 0,001ms^{-1}$, tempo de liberação de $2400s$ coincidindo com o tempo de análise ($t_r = t$) e altura da fonte determinada em $115m$. No nosso caso, a velocidade de deposição gravitacional foi considerada equivalente à velocidade de deposição ($v_g = V_d$) e a taxa de emissão foi estabelecida em $100mgs^{-1}$. A Tabela (1) mostra os dados estatísticos para o modelo em comparação com os resultados obtidos pelo modelo GILTTR. Já a Figura (5) é apresentado o gráfico de espalhamento entre as concentrações preditas pelo modelo e as concentrações observadas nos experimentos de Copenhagen, nesta figura os pontos apresentados representam o par (C_p, C_o) de concentração predita e observada, respectivamente, para cada experimento. Quanto mais próximos da diagonal estiverem os pontos mais próximos os dados preditos estão dos dados experimentais.

Modelo	NMSE	COR	FS
GILTTR (BAINY, 2015)	0,08	0,86	0,01
3D-GILTTR	0,17	0,91	0,20

Tabela 1: Índices estatísticos comparados.

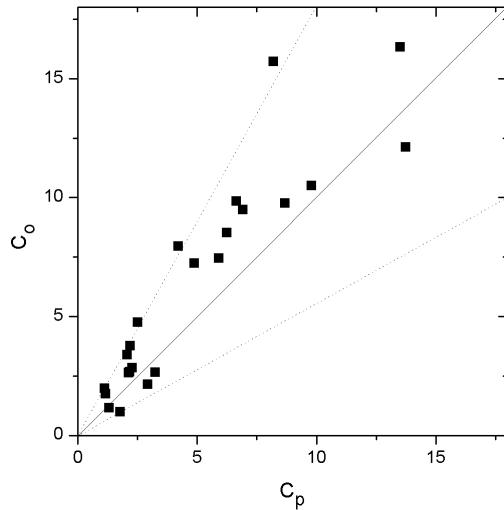


Figura 5: Diagrama de espalhamento entre concentrações preditas e observadas.

Analizando a tabela de índices estatísticos e o gráfico de espalhamento é possível concluir que o modelo é eficiente em representar os fenômenos de dispersão, apresentando uma correlação de aproximadamente 91% com dados experimentais, confirmado que o algoritmo desenvolvido é consistente com os dados de Copenhagen.

No entanto, como o objetivo do presente trabalho é simular a dispersão da nuvem de exaustão estabilizada, passaremos aos resultados obtidos com os dados micrometeorológicos do Centro de Lançamento de Alcântara.

6.2 Testes de sensibilidade

Para os testes de sensibilidade utilizamos os dados micrometeorológicos do Centro de Lançamentos de Alcântara. Estes dados foram obtidos através de radiossondagens realizadas no local durante o Experimento CHUVA¹ no ano de 2010, para o poluente alumínio, visto ser este um produto sólido da combustão.

(BAINY; BUSKE; QUADROS, 2015) apresentam 4 casos do projeto CHUVA. No presente trabalho consideraremos dois casos: um caso instável (01/03/2010) e um caso estável (04/03/2010). Utilizaremos os dados micrometeorológicos descritos na obra supracitada, conforme mostrado na Tabela (2). O tempo de liberação nos testes

¹Dados disponíveis em <http://chuva.project.cptec.inpe.br>

foi estabelecido em 15 s e as concentrações foram calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ (eixo de máxima concentração) e $z = 1,5\text{ m}$, exceto quando especificado outros valores.

Data	Hora	CLP (m)	L (m)	$u_s(\text{m/s})$	$w_s (\text{m/s})$	$v_g(\text{cm/s})$	$V_d(\text{cm/s})$
01/03/2010	18:00	410	-36,02	0,39	1,30	0,08	0,13
04/03/2010	00:02	550	172,60	0,32	NA	0,08	0,17

Tabela 2: Dados micrometeorológicos do projeto CHUVA (adaptado de (BAINY; BUSKE; QUADROS, 2015)).

Para estimar a altura da camada limite em cada caso foram utilizados observacionais de temperatura e pressão, que posteriormente foram utilizados para construção dos gráficos de perfil vertical de temperatura potencial, a altura da camada limite foi tomada como sendo a altura da base de inversão térmica.

A camada limite é maior durante o dia do que a noite, o fato de na tabela o segundo caso (noturno) apresentar uma camada limite maior que a do primeiro (diurno), não indica que na região a CLP noturna seja maior. Cabe observar que as medidas foram realizadas em dias distintos (01/03 e 04/03), ou seja, o segundo caso apresenta uma camada limite maior porque provavelmente, a camada limite durante o dia anterior (03/03) foi maior que a do primeiro caso.

Para determinar a quantidade de termos a serem consideradas nos somatórios da expansão foi realizada uma simulação usando 20 autovalores na expansão em z e variando os termos do somatório em y . Os resultados são apresentados na Figura (6), onde N_y representa o número de termos no somatório em y e N o número de autovalores do problema de Sturm-Liouville em z . Simulações adicionais para outros valores N foram realizadas e confirmaram que a concentração mantém o mesmo comportamento. Além disso, para valores de N muito grandes o tempo computacional torna-se muito elevado, dificultando a rápida análise dos dados obtidos.

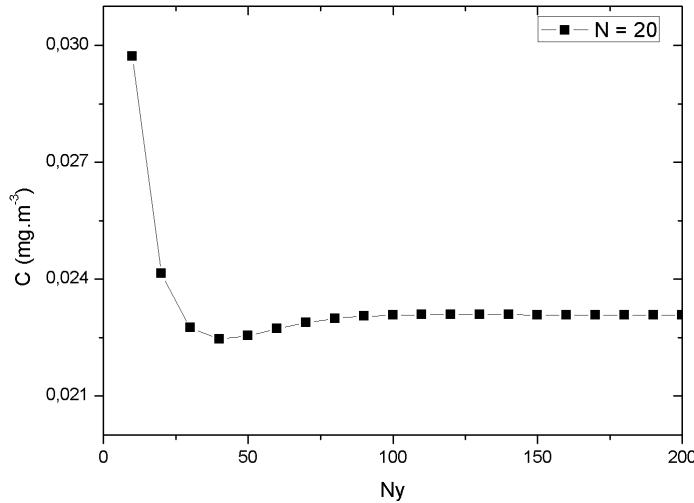


Figura 6: Concentração *versus* N_y para 20 autovalores em z , calculados a $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ da fonte e $z = 1,5\text{ m}$.

É possível perceber que a partir de 80 termos no somatório as concentrações tendem a estabilizar. No entanto, o uso de uma quantidade tão grande de autovalores eleva o tempo computacional da simulação. Então, usaremos 30 termos no somatório em y e 20 autovalores em z . Optou-se por utilizar este conjunto de dados para garantir que as concentrações não sejam muito superestimadas e, ao mesmo tempo, não elevar o tempo computacional das simulações.

Na Figura (7) são mostrados os resultados para o teste de altura da fonte nos dois casos. É possível verificar que quanto maior é a altura da fonte menores são os picos de concentração superficial, característica de casos dispersivos. Além disso, para as três alturas percebe-se que o pico de concentração no caso estável é maior, o que era esperado, uma vez que poluentes liberados sob condições estáveis dispersam mais lentamente, aumentando a concentração superficial. Esta diferença é melhor notada em fontes mais próximas do solo (100 m), para alturas de 150 m e 200 m as diferenças de concentração existem mas não são tão significativas quanto.

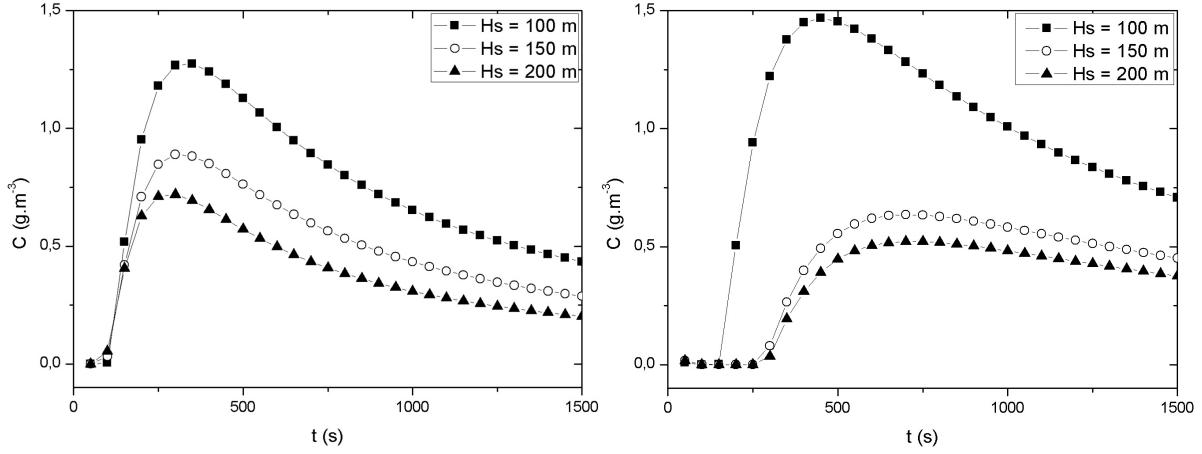


Figura 7: Resultados para altura da fonte para condições instáveis (esquerda) e estáveis (direita). Concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$.

Foi realizado também, no caso instável, um teste com o tempo de liberação (tr), os resultados são mostrados na figura (8). Segundo (BAINY, 2015), não há na literatura muitos exemplos de modelos projetados para tempos de liberação de poluentes curtos, ou seja, para uma única nuvem que contenha elevada concentração de poluentes.

No entanto, os resultados apresentados estão de acordo com o conceito de liberação e dispersão de poluentes, ou seja, quanto maior o tempo de liberação, maior os valores de concentração, e para tempos mais longos, que excedam o tempo de análise ($tr > t$), observa-se que a concentração tende a estabilizar. Além disso, tempos de emissão curtos geram baixas concentrações ao nível do solo.

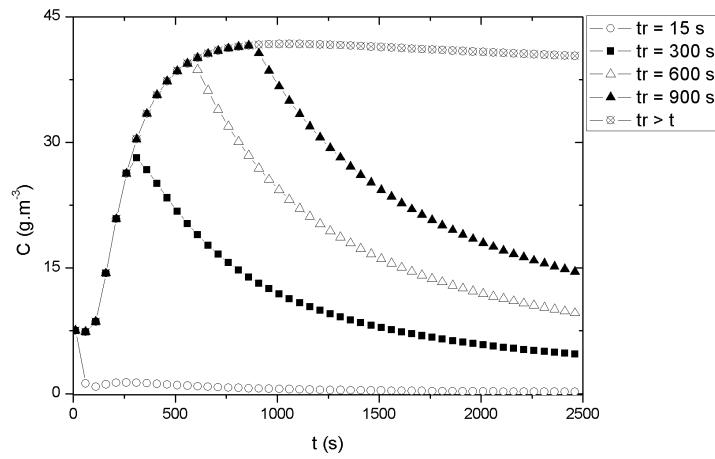


Figura 8: Concentração em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$ para vários tempos de emissão.

Para o coeficiente de deposição físico-química (λ) foram realizados testes para duas diferentes distâncias da fonte (500m e 1000m) para diferentes valores de λ . A fim comparar os resultados obtidos, utilizou-se nas simulações os valores descritos no modelo brasileiro MSDEF, descrito em (MOREIRA et al., 2011). As Figuras (9) e (10)

mostram os resultados. Note que o tempo de liberação utilizado nestas simulações foi de 50 s que foi o tempo utilizado nas simulações do MSDEF.

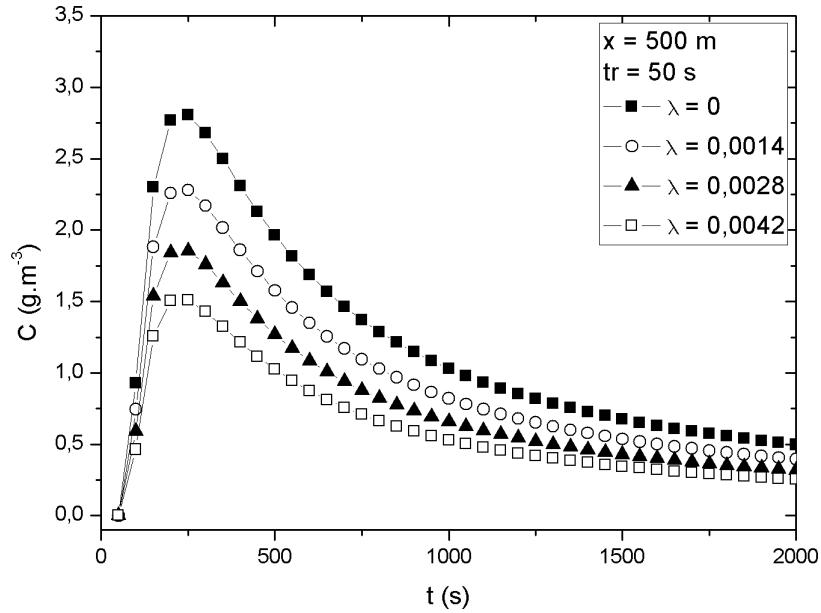


Figura 9: Resultados para deposição físico-química a 500m da fonte em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$.

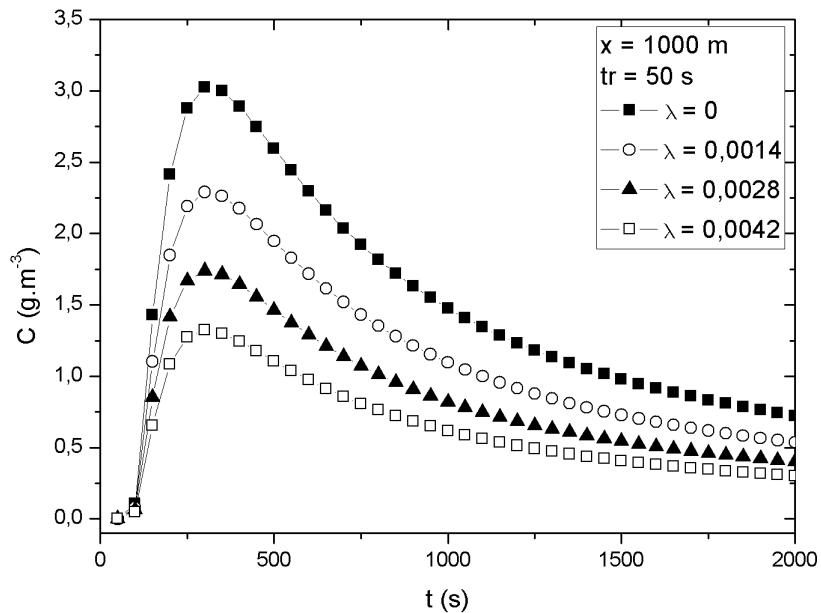


Figura 10: Resultados para deposição físico-química a 1000m da fonte em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$.

Comparando os resultados obtidos com a 3G-GILTTR com os resultados do MSDEF percebe-se que o parâmetro testado apresenta o mesmo comportamento nos dois modelos. No entanto, há uma diferença nos valores dos picos de concentração

que, nos resultados encontrados com a 3D-GILTTR, são um pouco maiores do que os encontrados pelo modelo brasileiro. A hipótese é de que esta diferença deve-se aos valores dos parâmetros, uma vez que nem todos eles têm seus valores explicitados no trabalho citado acima, e na falta destes, utilizou-se, os dados do CLA.

Os resultados para simulação de distância da fonte são encontrados na Figura (11), onde é possível verificar que quanto mais distante da fonte inicia a análise menores são as concentrações obtidas. Isso também indica a influência dos processos de deposição, uma vez que estes são responsáveis pela redução da quantidade de material poluente na atmosfera.

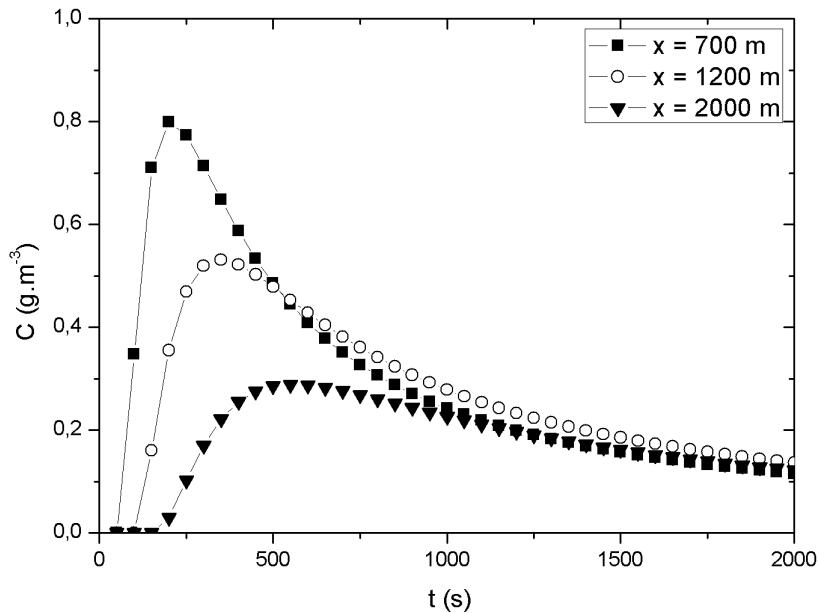


Figura 11: Evolução da concentração para várias distâncias da fonte, calculadas em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$.

Na Figura (12) são mostrados os resultados para a variação da concentração *versus* distância da fonte. Como esperava-se as maiores concentrações ocorrem com tempos de análise pequenos. Verifica-se também que no caso instável os picos de concentração ocorrem mais afastados da fonte, enquanto que no caso estável os picos ocorrem nas proximidades da fonte. Isso deve-se ao fato de que em casos de estabilidade os poluentes sofrem pouca dispersão, afastando-se vagarosamente da fonte, ficando mais concentrados nas proximidades da origem. Por outro lado, a ausência de turbulência térmica e a influência mais acentuada dos fenômenos de deposição (seca e gravitacional) ocasionam a rápida redução da quantidade de poluentes, o que é indicado nos gráficos (caso estável) pelo fato de a concentração tender a 0 mais rapidamente. Simulações adicionais foram realizadas para tempos de análise mais curtos ($t < 300\text{ s}$) confirmando o fato de que a concentração nas proximidades da fonte é mais elevada nos casos de estabilidade do que nos casos de instabilidade. Note a

diferença de escala entre os gráficos. Para este e para o próximo resultado optou-se por um tempo de liberação de 60 s para melhor visualização dos gráficos.

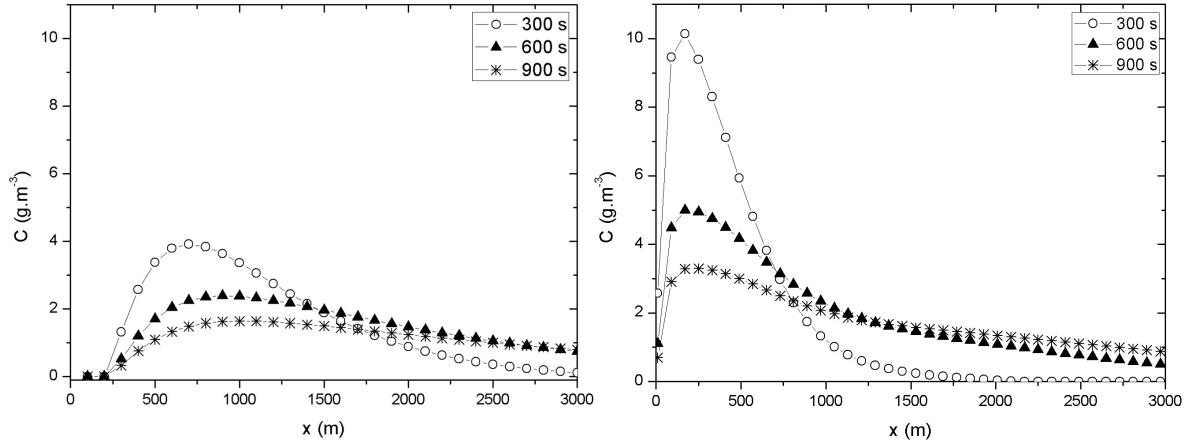


Figura 12: Evolução da concentração para vários tempos de análise após a emissão, em $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$. Caso instável (esquerda); caso estável (direita)

Para complementar estes resultados, mostra-se na Figura (13) as isolinhas de concentração para o caso instável (esquerda) e estável (direita). As simulações foram feitas considerando-se tempos de 300, 600 e 900 s. Aqui percebe-se claramente a redução do nível de concentração a medida em que o tempo cresce. Além disso, percebe-se também que as maiores concentrações ocorrem no caso estável e que o mesmo apresenta uma lenta difusão.

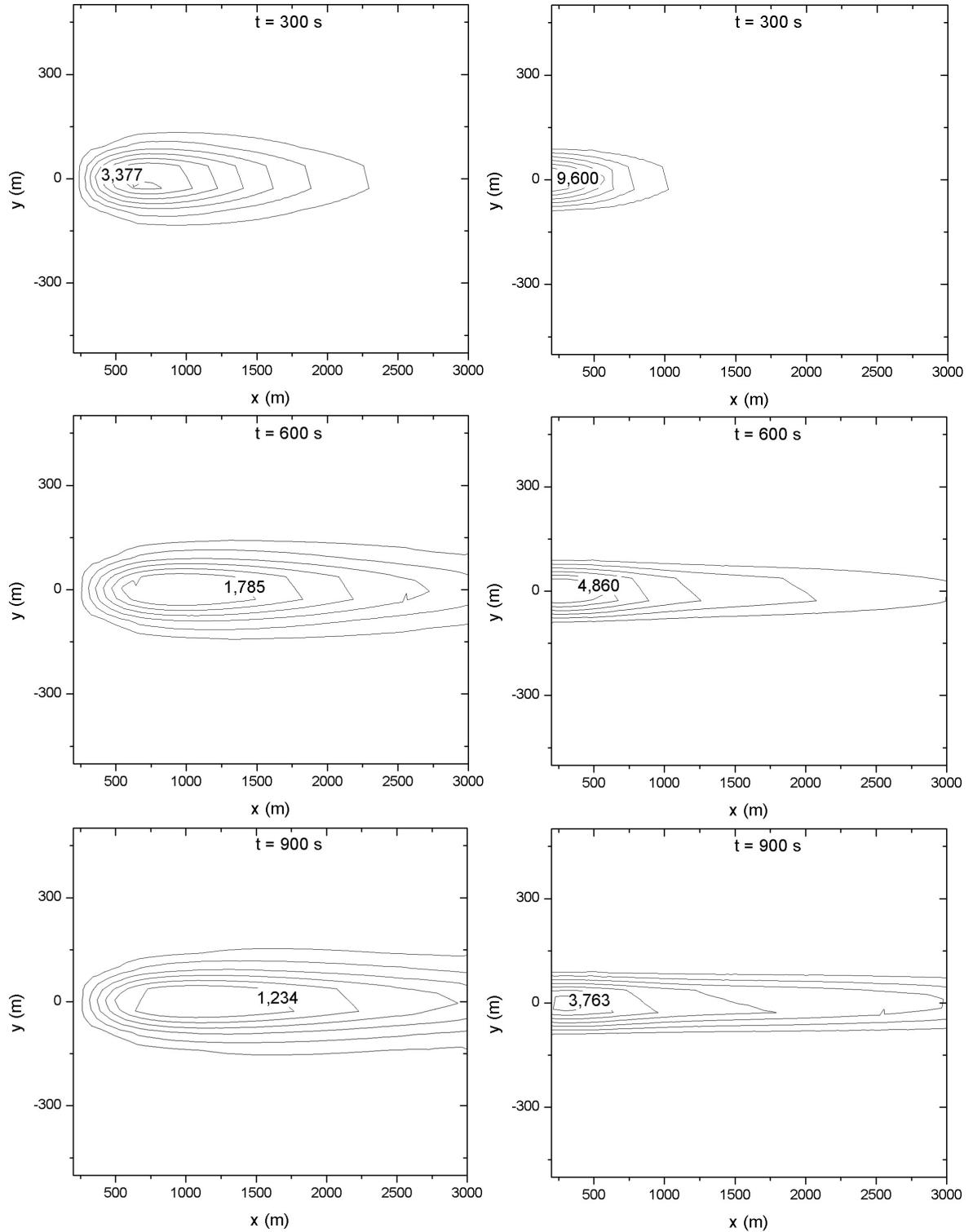


Figura 13: Isolinhas de concentração para o caso instável (esquerda) e estável (direita), calculadas em $z = 1,5\text{ m}$.

Para confirmar a diferença de influência do fenômeno de deposição nos casos considerados mostra-se na Figura (14) a comparação entre os casos instável e estável para diferentes velocidades de deposição. No caso sem deposição ($V_d = 0$) a influência não é muito sentida, visto que nesta situação a concentração tende a esta-

bilizar em valores elevados. Mas, nos outros cenários confirma-se a forte influência deste parâmetro no caso instável.

Além disso, também é possível verificar que quanto maior a velocidade de deposição menor a concentração medida. Este fato era esperado, uma vez que quanto maior o valor de V_d mais rapidamente o poluente deposita e portanto, menor é a quantidade de material ainda disperso e consequentemente, menores são as medidas de concentração.

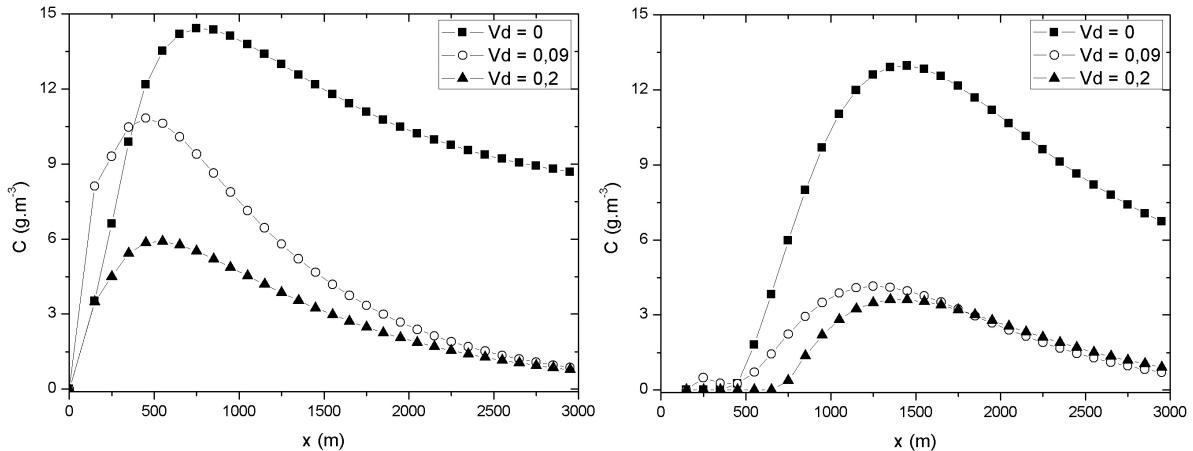


Figura 14: Comparação de V_d para o caso instável (esquerda) e estável (direita), concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0$ e $z = 1,5\text{ m}$.

Estes foram os resultados gerados para o modelo considerando uma fonte pontual contínua. Mostraremos agora, os resultados iniciais da pesquisa do modelo com fonte volume.

6.3 Resultados para Fonte Volume

Para os teste com a fonte volume usamos os dados descritos na Tabela (2). Além disso, vamos supor que a nuvem tenha a forma de uma esfera de raio 20 m e que se localiza a 150 m de altura. Para as simulações utilizaremos um tempo de emissão de 30 s e partitionaremos a esfera em 160 fontes pontuais. Conforme podemos ver na Tabela (3) o número de fontes não provoca grandes variações na concentração.

N_i	$C(g.m^{-3})$
80	21,2870
160	21,5468
320	21,6721
640	21,6056
1280	21,5603
1440	21,5552
1760	21,5479
4960	21,5266
6560	21,5238

Tabela 3: Relação entre número de fontes e concentração em $x = 1000\text{ m}$, $y = 0\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$, calculadas 300 s após emissão.

Na Figura (15) mostra-se os resultados da evolução da concentração pela distância para diversos tempos após a liberação do poluente pelo modelo de fonte volume, considerando o caso instável (esquerda) e estável (direita). É possível verificar que o modelo de fonte volume mostra comportamento semelhante com o modelo de fonte pontual, cujos resultados podem ser encontrados na Figura (12). Como esperado em um caso instável, os picos de concentração encontram-se afastados da origem, enquanto que no caso estável os picos de concentração ficam mais próximos à origem.

De maneira semelhante ao caso para fonte pontual, as picos de concentração afastados devem-se ao fato de que, em casos instáveis, a turbulência térmica sobrepõem-se a turbulência mecânica, dificultando a remoção do poluente pelos processos de deposição seca e gravitacional. Já as concentrações menores para tempos de análise mais elevados se justificam pelo fato de que quanto mais demorado for o início da simulação, maior a quantidade de material depositada e dispersa e, portanto, menor a quantidade a ser medida.

Cabe aqui algumas observações. Primeiramente tem-se a diferença nos valores dos picos de concentração, em comparação com o caso pontual, devem-se a abordagem diferente, uma vez que para fonte volume estamos considerando que todo o material liberado no início do processo de queima de combustível esteja presente na nuvem estabilizada, ou seja, que não há perda de material nos estágios de liberação (em contato com o solo) e ascensão da pluma. Em segundo lugar, nota-se uma oscilação nos resultados para o caso instável, deixaremos para trabalhos posteriores a investigação deste fenômeno. Por fim, deve-se notar a grande diferença nos valores dos picos de concentração entre os dois casos apresentados, devido a essa diferença os gráficos são apresentados em escalas diferentes para melhor visualização.

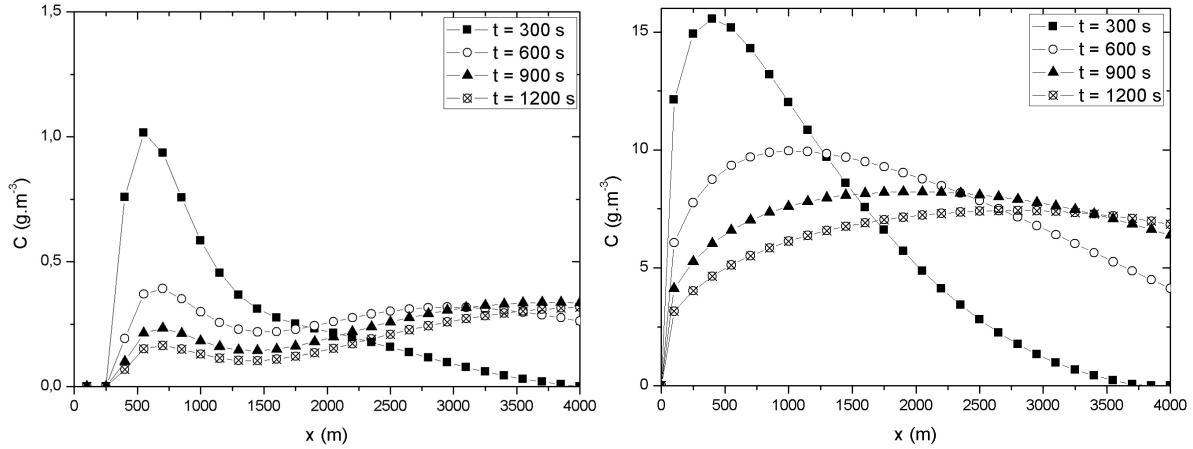


Figura 15: Evolução da concentração por distância para diversos tempos após liberação, calculadas em $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$.

Já na Figura (16) temos os resultados das simulações da evolução da concentração pelo tempo para três distâncias da fonte (700 m , 1200 m e 2000 m). Da mesma forma que mostrado na Figura (15) as maiores concentrações ocorrem no caso estável a 700 m da origem. Novamente, os gráficos são apresentados em escalas diferentes para melhor visualização.

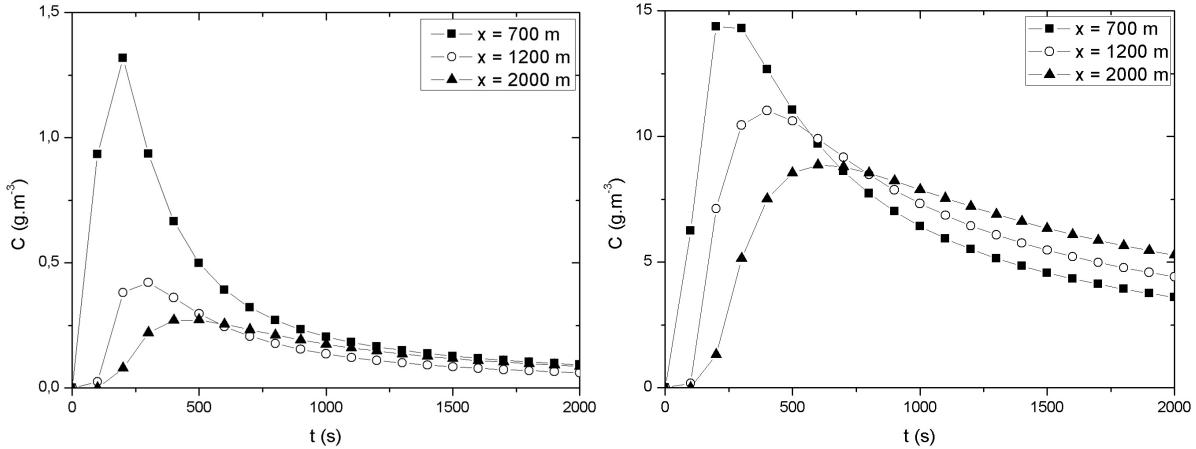


Figura 16: Evolução da concentração pelo tempo para diversas distâncias da origem do sistema, em $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$. Caso instável (esquerda) e estável (direita).

Para verificar a influência do parâmetro tempo de emissão (tr) no caso da fonte volume, realizamos simulações para quatro valores de tr analisadas em dois tempos após o período de liberação. As figuras (17) e (18) mostram os resultados obtidos. Aqui é possível verificar que tempos de emissão mais elevados geram concentrações mais elevadas e também, quanto menor for o tempo de análise, maiores e mais acen-tuados serão os picos de concentração. Além disso, é possível perceber o desloca-mento das concentrações máximas ao longo do eixo x e sua consequente redução com o tempo, mostrando que o modelo foi eficiente em simular o processo dispersivo.

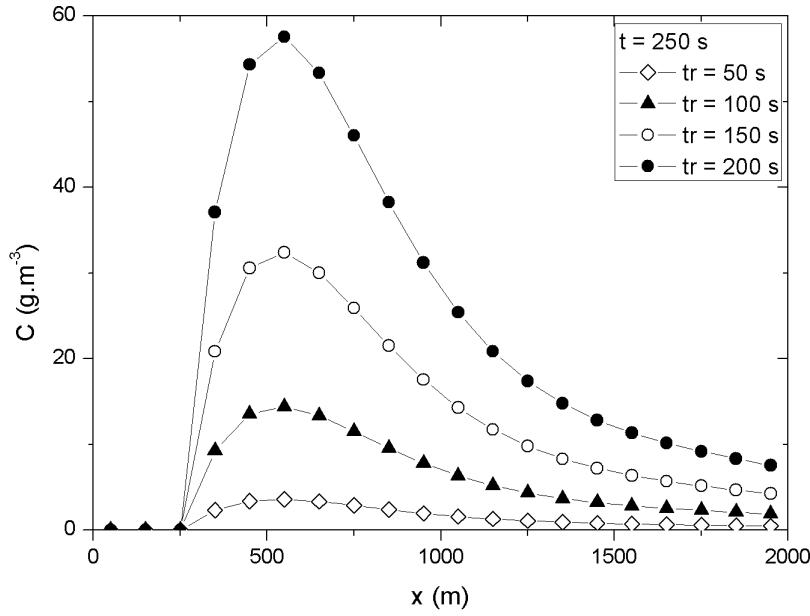


Figura 17: Concentração por distância com $t = 250\text{ s}$ para vários tempos de emissão considerando fonte volume. Concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$.

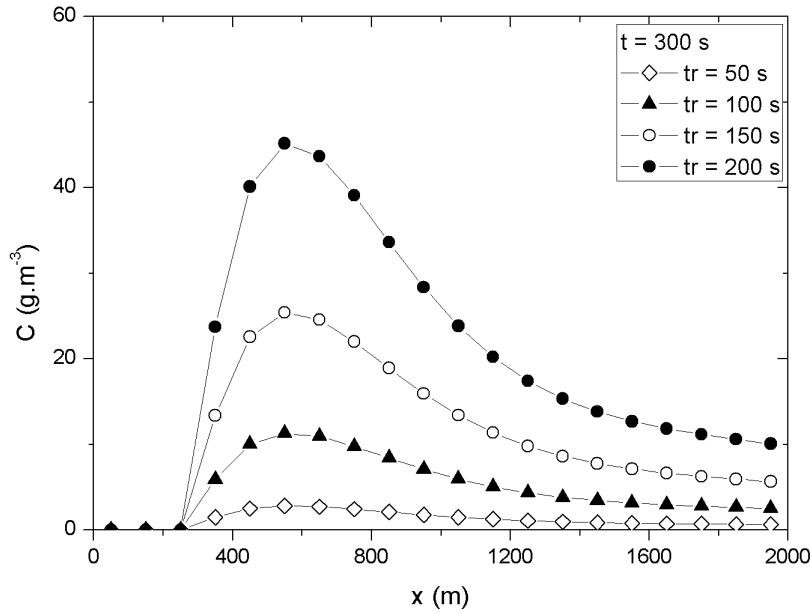


Figura 18: Concentração por distância com $t = 300\text{ s}$ para vários tempos de emissão considerando fonte volume. Concentrações calculadas em $x = 1000\text{ m}$, $y = 1000\text{ m}$ e $z = 1,5\text{ m}$.

Por fim, realizamos simulações para isolinhas. Os resultados podem ser vistos na figura (19). Simulações foram realizadas considerando-se 3 tempos após o período de emissão (300, 600 e 900 s). Aqui é possível perceber a influência dos principais fenômenos que regem a dispersão, a saber, a advecção e a difusão. A advecção

é percebida pelo deslocamento do pico de concentração ao longo do eixo (alinhado com o vento médio) e a difusão pela redução das taxas de concentração de poluentes, que podem ser percebidas pelos valores no centro de cada pluma. Além disso, como esperado os caso estável apresenta concentrações maiores que a do caso instável. Isso evidencia que o modelo de fonte volume mostra-se eficiente em simular os efeitos da advecção-difusão no problema proposto.

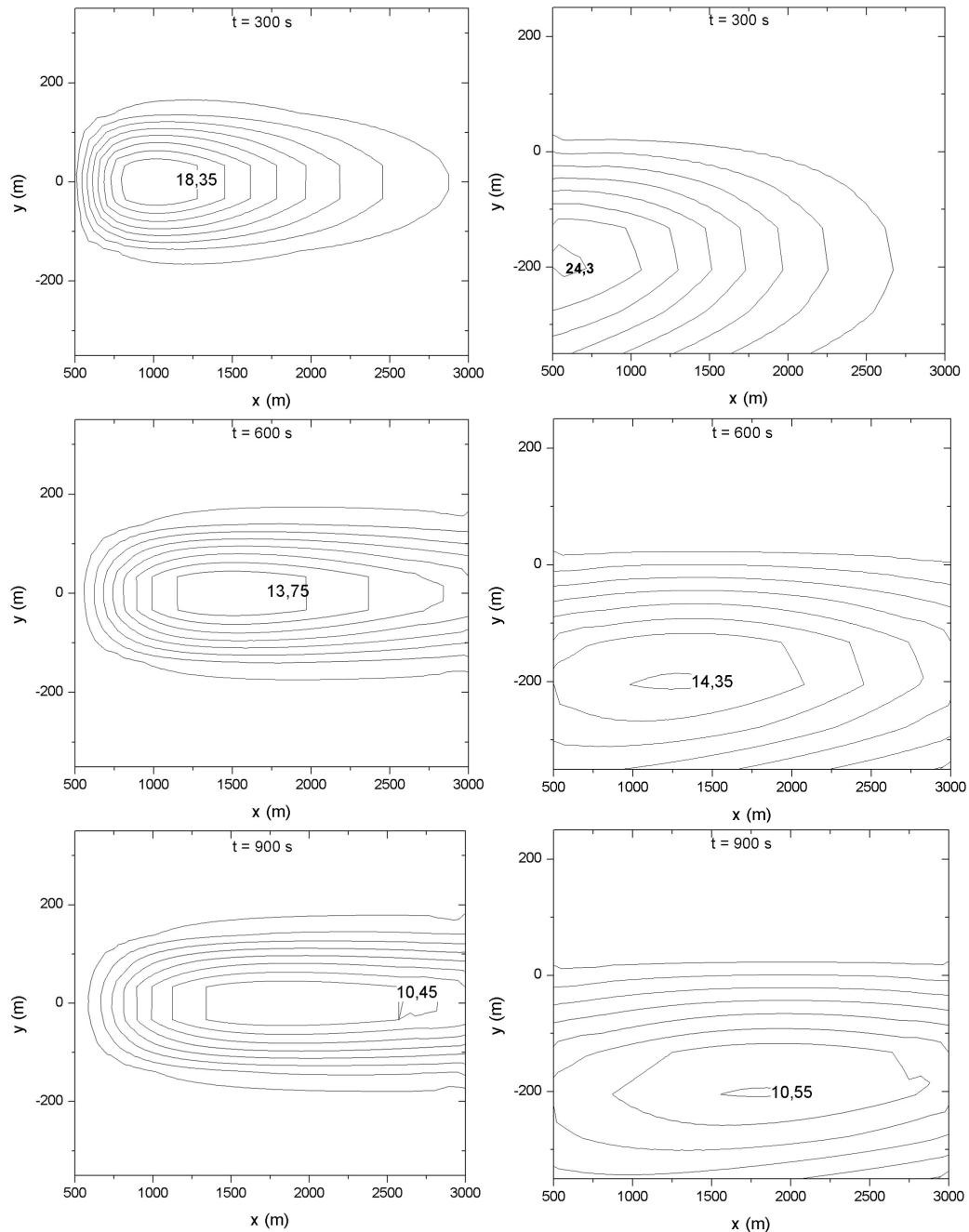


Figura 19: Isolinhas de concentração para 3 tempos diferentes. Caso instável (esquerda) e estável (direita).

7 CONCLUSÕES

O objetivo deste trabalho foi apresentar uma metodologia para obter uma representação analítica da equação de advecção-difusão tridimensional aplicada no cálculo da dispersão de efluentes em lançamento de foguetes. Mas, devido ao fato de que este tipo de fenômeno comporta complexos mecanismos físicos e que alguns parâmetros utilizados nas pesquisas de dispersão apresentam um alto grau de incerteza quando aplicadas nesta situação (por exemplo a altura da fonte), optou-se por abordar apenas uma parte do fenômeno, a saber, a nuvem de exaustão estabilizada. Para isso apresentamos uma breve revisão bibliográfica dos principais modelos e técnicas desenvolvidas para simular a dispersão da pluma estabilizada, incluindo os trabalhos que foram os pioneiros no desenvolvimento da técnica utilizada como base nesta pesquisa. Apresentamos alguns conceitos sobre lançamento de foguetes e dinâmica atmosférica e também, alguns projetos desenvolvidos na região do Centro de Lançamento de Alcântara, tais como o Projeto CHUVA, de onde foram obtidos os dados micrometeorológicos da região.

Algumas limitações foram encontrados durante o desenvolvimento do projeto. Em primeiro lugar podemos citar a não existência de dados experimentais sobre concentração de poluentes em bases de lançamento de foguetes, o que impediu que o modelo fosse validado com dados realísticos sobre o fenômeno. Para contornar este problema utilizou-se os dados do experimento de Copenhagen para testar a validade do algoritmo. Salienta-se que estes dados não condizem com o fenômeno real uma vez que os experimentos de Copenhagen simulam condições diferentes das encontradas em lançamento de foguetes. A utilização destes dados teve o intuito de apenas verificar a validade do algoritmo e também se o mesmo não continha erros significativos.

Uma segunda limitação refere-se a abordagem de fonte utilizada, já que todos os trabalhos que abordam a dispersão da nuvem de exaustão consideraram uma fonte pontual contínua e, no entanto, este tipo de fonte não é mais adequada para modelar o fenômeno de dispersão da *ground cloud*. Por este motivo foram realizadas simulações considerando duas abordagens distintas, a saber, uma fonte pontual contínua e uma

fonte volume. Mesmo não sendo adequada foram realizadas simulações para fonte pontual, pois esta é, até o presente momento, a abordagem utilizada nas pesquisas sobre o fenômeno e para que, quando possível, sejam feitas comparações entre o presente modelo e os existentes na literatura sobre o problema.

Os resultados apresentados, para o caso de fonte pontual mostram que o modelo desenvolvido é eficiente em simular a dispersão da pluma estabilizada, apresentando resultados que condizem com a dinâmica dos processos advectivo-difusivos. Além disso, por se tratar de uma representação analítica, os parâmetros utilizados no modelo têm suas influências facilmente analisadas, permitindo verificar sob que condições a pluma dispersa mais rapidamente.

Apresentamos também os primeiros resultados considerando uma fonte volume, destacando que este trabalho é um dos primeiros a apresentar esta abordagem no cálculo da dispersão da *ground cloud* estabilizada e que os resultados apresentados mostraram-se igualmente satisfatórios.

Por fim, espera-se que esta pesquisa tenha contribuído para o desenvolvimento de outros trabalhos sobre o tema e também que sirva como base para pesquisas mais avançadas sobre fonte volume aplicada no fenômeno descrito e, desta forma aumentar a escassa literatura atual sobre o mesmo.

REFERÊNCIAS

- AMSDEN, A. A. The Particle-in-Cell Method for the Calculation of the Dynamics of Compressible Fluid. **Los Alamos Scientific Laboratory**, 1966.
- ARYA, S. P. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. Academic Press, 1999.
- ARYA, S. P. **Introduction to Micrometeorology**. Academic Press, 2001.
- AVELAR, A. C.; BRASILEIRO, F. L. C.; MARTO, A. G.; MARCIOTTO, E. R.; FISH, G.; FARIA, A. F. Wind Tunnel Simulation of the Atmospheric Boundary Layer for Studying the Wind Pattern at Centro de Lançamento de Alcântara. **Journal of Aerospace Technology and Management**, v.4, p.463–473, 2012.
- BAINY, B. K. **Simulação da Dispersão de Poluentes em Lançamento de Foguetes**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Meteorologia, 2015.
- BAINY, B. K.; BUSKE, D.; QUADROS, R. S. An Analytic Model for Dispersion of Rocket Exhaust Clouds: Specifications and Analysis in Different Atmospheric Stability Conditions. **Journal of Aerospace Technology and Management**, v.7, p.374–385, 2015.
- BJORKLUND, J. R.; DUMBAULD, R. K.; CHENEY, C. S.; GEARY, H. V. User's Manual for the REEDM (Rocket Exhaust Effluent Diffusion Model). **NASA Contractor Report 3646**, 1982.
- BUSKE, D. **Solução Analítica da Equação de Difusão-Advecção Pelo Método GILTT Aplicada à Dispersão de Poluentes Atmosféricos**. Dissertação de Mestrado - UFRGS, 2004.
- BUSKE, D. **Solução GILTT Bidimensional em Geometria Cartesiana: Simulação da Dispersão de Poluentes na Atmosfera**. Programa de Pós-Graduação em Engenharia - UFGRS, 2008.
- 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, p.1124–1134, 2012.

- CARVALHO, D. L. **Um Estudo Numérico da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Convectiva.** Dissertação de Mestrado, Mestrado em Meteorologia, 1996.
- CATALDI, M. Estudo do Transporte de Poluentes na Região da Camada de Superfície sob Diversas Condições de Estabilidade Atmosférica. In **XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, v.1, p.2890–2899, 1980.
- COTTA, R. M.; MIKHAILOV, M. D. Integral Transform Method. **Applied Mathematical Modelling**, v.17, p.156–161, 1993.
- DEGRAZIA, G. A.; CAMPOS VELHOS, H. F.; CARVALHO, J. C. Nonlocal Exchange Coefficients for the Convective Boundary Layer Derived from Spectral Properties. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.70, p.57–64, 1997.
- DEGRAZIA, G. A.; MANGIA, C.; RIZZA, U. A Comparison Between Diferent Methods to Estimate the Lateral Dispersion Parameter Under Convective Conditions. **Journal of Applied Meteorology**, v.37, p.227–231, 1998.
- DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Derivation of an Eddy Diffusivity Depending on Source Distance for Vertically Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer. **Journal of Applied Meteorology**, p.1233–1240, 2000.
- DEGRAZIA, G.; MOREIRA, D.; CAMPOS, C.; CARVALHO, J.; VILHENA, M. Comparison between an integral and algebraic formulation for the eddy diffusivity using the Copenhagen experimental dataset. **Il Nuovo Cimento**, v.25, p.207–218, 2002.
- DEGRAZIA, G.; VILHENA, M.; MORAES, O. An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: A description of near-source diffusion. **Il Nuovo Cimento**, v.19, p.399–403, 1996.
- DUMBAULD, R.; BJORKLUND, J. NASA/MSFC Multilayer Diffusion Models and Computer Programs - Version 5. **Nasa Contractor Report**, v.2631, 1975.
- FISCH, G.; AVELAR, A. C.; PIRES, L. B. M.; GIELOW, R.; GIRARDI, R. M.; SOUZA, L. F. The Internal Boundary Layer at the Alcântara Space Center: Winds Measurements, Wind Tunnel Experiments and Numeric Simulations. In **V International Symposium on Computational Wind Engineering**, 2010.
- GRYNING, S. E. **Elevated source SF6 - tracer dispersion experiments in the Copenhagen area.** Report RISOE-R-446, Risoc National Laboratory, 1981.
- HANNA, S. R. **Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods.** : s.n.], 1989. 1385-1395p. v.23.

- HWANG, B. C.; GOULD, R. K. Rocket Exhaust Ground Cloud / Atmospheric Interactions. **NASA Contractor Report 2978**, 1978.
- HWANG, B. C.; PESKIN, R. L.; SO, R. M. Concentration Distribution in a Turbulent Shear Flow. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.36, p.1955–1966, 1979.
- IRIART, P. G. **Uso do Modelo WRF-CHEM para a simulação da dispersão de gases no Centro de Lançamento de Alcântara**. Dissertação de Mestrado - Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 2015.
- KAIMAL, J. C.; FINNIGAN, J. J. **Atmospheric Boundary Layer Flows: Their Structure and Measurement**. Oxford University Press, 1994.
- 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.
- LANGE, R. ADPIC: A Three-Dimensional Computer Code for the Study of Pollutant Dispersal and Deposition under Complex Conditions. **Lawrence Livermore Laboratory**, 1973.
- MARINHO, L. P. B.; AVELAR, A. C.; FISCH, G.; ROBALLO, S. T.; SOUZA, L. F.; GIELLOW, R.; GIRARDI, R. M. Studies Using Wind Tunnel to Simulate the Atmospheric Boundary Layer at the Alcântara Space Center. **Journal of Aerospace Technology and Management**, v.1, p.91–98, 2009.
- MIKHAILOV, M. D.; OZISIK, M. N. **Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**. John Wiley & Sons, 1984.
- MOREIRA, D. M.; TRINDADE, L. B.; FISCH, G.; MORAES, M. R.; DORADO, R. M.; GUEDES, R. L. A Multilayer Model to Simulate Rocket Exhaust Clouds. **Journal of Aerospacial Technology and Management**, v.3, p.41–52, 2011.
- MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The State-of-art of the GILTT Method to Simulate Pollutant Dispersion in the Atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, p.1–17, 2009.
- 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 Pollution**, v.177, p.411–439, 2006.
- MOURA, A. **Modelos Multidimensionais Analíticos de Dispersão de Contaminantes na Atmosfera**: Coeficientes de Difusão Dependentes da Distância da Fonte. Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, 1999.

- NASA. Final Environmental Assessment Expansion of the Wallops Flight Facility Launch Range. **NASA**, 2009.
- NASCIMENTO, E. G. S.; MOREIRA, D. M.; ALBUQUERQUE, T. T. A.; REIS JR, N. C.; SANTOS, J. M.; GOULART, E. V.; FISCH, G. Atmospheric Dispersion Modeling to Simulate Rocket Exhaust Clouds. In **XVII Internacional Conference on Computational Methods and Experimental Measurements**, v.59, p.481–492, 2015.
- NASCIMENTO, E. G. S.; MOREIRA, D. M.; FISCH, G.; ALBUQUERQUE, T. T. A. Simulation of Rocket Exhaust Clouds at the Centro de Lançamento de Alcântara Using WRF-CMAQ Modeling System. **Journal of Aerospace Technology and Management**, v.6, p.119–128, 2014.
- NEVES, O. A. Numeric Simulation of Pollutant Dispersion by a Control-Volume Based on Finite Element Method. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v.66, p.1073–1092, 2011.
- NYMAN, R. L. Evaluation of Taurus II Static Test Firing and Normal Launch Rocket Plume Emissions. In: **NASA, Final Report: ENVIRONMENTAL ASSESSMENT FOR THE EXPANSION OF THE WALLOPS FLIGHT FACILITY LAUNCH RANGE. Appendix G**, 2009.
- PANOFSKY, H. A.; DUTTON, J. A. **Atmospheric turbulence**. John Wiley & Sons, 1984.
- QUADROS, R. S.; BAINY, B. K.; BUSKE, D.; VOESE, J. S. Avaliação do impacto da altura da fonte em um modelo analítico para dispersão de efluentes de foguetes. In: **IX Workshop Brasileiro de Micrometeorologia**, 2015.
- 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. In: **XII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2002.
- ROBALLO, S. T.; FISCH, G. Escoamento Atmosférico no Centro de Lançamento de Alcântara (CLA): Parte I - Aspectos Observacionais. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.23, p.510–519, 2008.
- SAND, P. F. **An Investigation of Instantaneous Plume Rise From Rocket Exhaust**. Air Force Institute of Technology, 1996.
- SCHUCH, D. A. **Modelo de dispersão e transporte de gases efluentes de lançamento de foguetes no CLA**. Tese de Doutorado - Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA), 2017.

- SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric chemistry and physics**. John Wiley & Sons, 2006.
- STEWART, R. B.; GROSE, W. L. Parametric studies with an atmospheric diffusion model that assesses toxic fuel hazards due to the ground clouds generated by rocket launches. **NASA Technical Note**, 1975.
- STROUD, A.; SECREST, D. **Gaussian quadrature formulas**. Prentice-Hall, 1966.
- STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic Publishers, 1988.
- TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. A Two-Dimensional Solution of the Advection-Diffusion Equation with Dry Deposition to the Ground. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v.47, p.2096–2104, 2006.
- VILHENA, M.; RIZZA, U.; DEGRAZIA, G.; MANGIA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. An analytical air pollution model: Development and evaluation. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315–320, 1998.
- WEYMAR, G. J. **Uma solução da equação multidimensional de advecção-difusão para a simulação da dispersão de contaminantes reativos na camada limite atmosférica**. Tese de Doutorado, Programa de Pós Graduação em Engenharia, 2016.
- WORTMANN, S.; MOURA, A.; VILHENA, M. T. Solução Analítica para o Problema Unidimensional Transiente de Dispersão de Poluentes com Coeficientes de Difusão Variável. **ENCIT**, 2000.
- WORTMANN, S.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; BUSKE, D. A New Analytical Approach to Simulate the Pollutant Dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, n.12, p.2171–2178, 2005.
- ZHANG, L.; GONG, S.; PADRO, J.; BARRIE, L. A size-segregated particle dry deposition scheme for an atmospheric aerosol module. **Atmospheric Environment**, v.35, p.549 – 560, 2001.