

MODELAGEM ESTOCÁSTICA DAS FLUTUAÇÕES TURBULENTAS DE CONCENTRAÇÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS

Reginaldo Rosa Cotto de Paula

Centro Federal de Educação Tecnológica do Espírito Santo
COFIS - Av. Vitória, 1729, Jucutuquara, Vitória -E.S., CEP 29444030
rcotto@bol.com.br

Jane Méri Santos

Universidade Federal do Espírito Santo
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental - Av. Fernando Ferrari S/N, Goiabeiras, Vitória -E.S.CEP 29060970
janemeri@npd.ufes.br

Valdério Anselmo Reisen

Universidade Federal do Espírito Santo
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental - Av. Fernando Ferrari S/N, Goiabeiras, Vitória -E.S.CEP 29060970
valderio@cce.ufes.br

Resumo. Este trabalho estuda a aplicação de séries temporais para descrever o comportamento das concentrações "instantâneas" de poluentes atmosféricos nas superfícies de uma edificação isolada em condições atmosféricas neutra e instável. Os dados para o desenvolvimento deste trabalho foram obtidos a partir de experimentos de campo realizados por Santos (2000). Foram utilizados detectores de foto-ionização com alta frequência (50Hz) para se obter as flutuações turbulentas de concentração. Na região do fluxo incidente, as séries temporais de concentração apresentaram episódios de concentração nula seguidos de altos valores "instantâneos" de concentração, sugerindo que nesta região existem vórtices de escalas da turbulência de tamanhos maiores ou comparáveis ao tamanho da pluma. A estratificação térmica influenciou os valores da intensidade das flutuações turbulentas de concentração na região de esteira. Os valores encontrados nesta região foram em média 50% maiores no caso instável. Quanto a qualidade estatística dos modelos que se ajustaram aos dados experimentais, os resultados obtidos pela metodologia Box-Jenkins satisfazem os principais critérios de verificação. A elevada variabilidade da variância das séries originais levou os modelos ARMA (p,q) ajustados as séries medidas na região do fluxo incidente a serem rejeitados no teste Ljung-Box, entretanto, as previsões estimadas pelos modelos ARMA (p,q) tendem para a média e intensidade de flutuações de concentração do processo. Portanto, pode-se concluir que a metodologia Box-Jenkins conseguiu captar o comportamento das séries temporais de concentração.

Palavras chave: flutuações de concentração, turbulência atmosférica, séries temporais.

1. Introdução

O comportamento da pluma de poluentes lançada nas proximidades de edificações é um tópico de interesse para arquitetos, órgãos ambientais reguladores e meteorologistas da poluição do ar. Este problema preocupa particularmente os habitantes das edificações (industriais, residenciais ou comerciais) que podem ser afetados pela infiltração ocasional de gases ou pela exposição prolongada a concentrações de contaminantes acima dos padrões de qualidade do ar. O conhecimento dos valores médios de concentração é muito importante, por exemplo, no caso de exposição à substâncias radioativas, em que o tempo total de exposição tem maior influência no impacto da saúde humana do que os valores "instantâneos" de concentração (Higson et al., 1996). Entretanto, em alguns problemas ambientais, torna-se necessário prever as flutuações dos valores de concentração em torno da média que ocorrem devido à turbulência atmosférica; como por exemplo na exaustão de gases odoríferos, onde o pico de concentração (ao longo de poucos segundos) pode ser mais importante do que a concentração média (ao longo de horas) e na ignição de gases inflamáveis que é dependente de taxas de mistura ar/combustível "instantâneas", onde a escala de tempo do processo de ignição e dos vórtices turbulentos ocorrem numa pequena fração de segundo.

Assim, o progresso no entendimento da dispersão de contaminantes atmosféricos nas proximidades de obstáculos isolados requer a caracterização não somente de concentrações médias, mas também das flutuações turbulentas de concentração. Em consequência, vários experimentos de campo foram realizados para simular o lançamento de poluentes nas proximidades de obstáculos isolados nos últimos anos a fim de investigar o comportamento das flutuações de concentração (Higson et al. 1995, Santos et al., 1998, Mavroidis e Griffiths, 1999). Estes estudos conduziram a um avanço substancial no entendimento das características estatísticas das flutuações turbulentas de concentração de plumas emitidas nas proximidades de um obstáculo isolado.

Neste contexto, os modelos estatísticos de séries temporais constituem uma ferramenta importante para o estudo das concentrações “instantâneas” de plumas no fenômeno da dispersão de poluentes nas proximidades de obstáculos, proporcionando uma maior agilidade operacional e auxiliando na redução dos altos custos relacionados aos experimentos de campo. Uma revisão da literatura dos estudos da poluição do ar nas proximidades de obstáculos mostra que alguns trabalhos utilizaram gráficos de séries temporais de concentração (Haward e Lamb, 1995 e Oikawa e Meng, 1997) para investigar o comportamento das flutuações turbulentas. Entretanto, estes autores não utilizaram modelos de séries temporais para estudar o fenômeno.

Este trabalho objetiva a aplicação da modelagem de séries temporais através da metodologia Box-Jenkins para investigar a influência das condições de estabilidade atmosférica nas flutuações turbulentas de concentração nas superfícies de um obstáculo isolado de geometria complexa. Os dados para o desenvolvimento deste trabalho são provenientes dos experimentos de campo realizados por Santos (2000).

2. Metodologia Box-Jenkins

A metodologia Box-Jenkins consiste do processo de escolha do modelo que melhor se ajusta ao conjunto de observações $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ das concentrações medidas e está dividida nas seguintes etapas:

I – A identificação da ordem do modelo é a primeira etapa desta metodologia. Nesta etapa, realiza-se a escolha de um modelo ARMA (p, q) que possa descrever a série temporal. Geralmente, as séries temporais associadas aos fenômenos ambientais, não são estacionárias sendo necessário aplicar os conceitos de estabilização da variância e da diferenciação para tornar a série original em um processo estacionário. Então, após estes procedimentos, seleciona-se um modelo em potencial através dos diagramas das funções de autocorrelação e de autocorrelação parcial.

II - A segunda etapa consiste do processo de estimação dos parâmetros desconhecidos e da verificação do diagnóstico. Quando um modelo é rejeitado durante o processo de verificação, deve-se voltar à fase de identificação numa nova tentativa de escolher outros modelos.

III - Nesta última etapa as previsões estimadas são utilizadas para avaliar a qualidade dos modelos ajustados aos dados originais.

3. Detalhes Experimentais

Para fazer a modelagem das concentrações de contaminantes atmosféricos na superfície de um obstáculo isolado de geometria complexa, utilizaram-se dados obtidos em experimentos de campo realizados no Campo de Prova Dugway em Salt Lake City, Utah, USA em Agosto de 1998 por Santos (2000) sob diferentes condições de estabilidade atmosférica.

Os experimentos envolveram lançamentos de gás propileno (C_3H_6) como traçador através de um tubo de 1cm de diâmetro com uma taxa de vazão de 50 l/min para uma fonte fixa localizada a distância de $3,5H_o$, à montante do obstáculo e a altura de $0,5H_o$ acima do nível do solo, onde H_o é a altura do obstáculo. Para as medidas das concentrações “instantâneas” nas superfícies laterais e no telhado do obstáculo utilizou-se detectores de foto-ionização (PID), com alta frequência de aquisição dos dados (50Hz), para se obter dados de concentração em escalas de tempo inferiores às escalas de tempo da turbulência atmosférica.

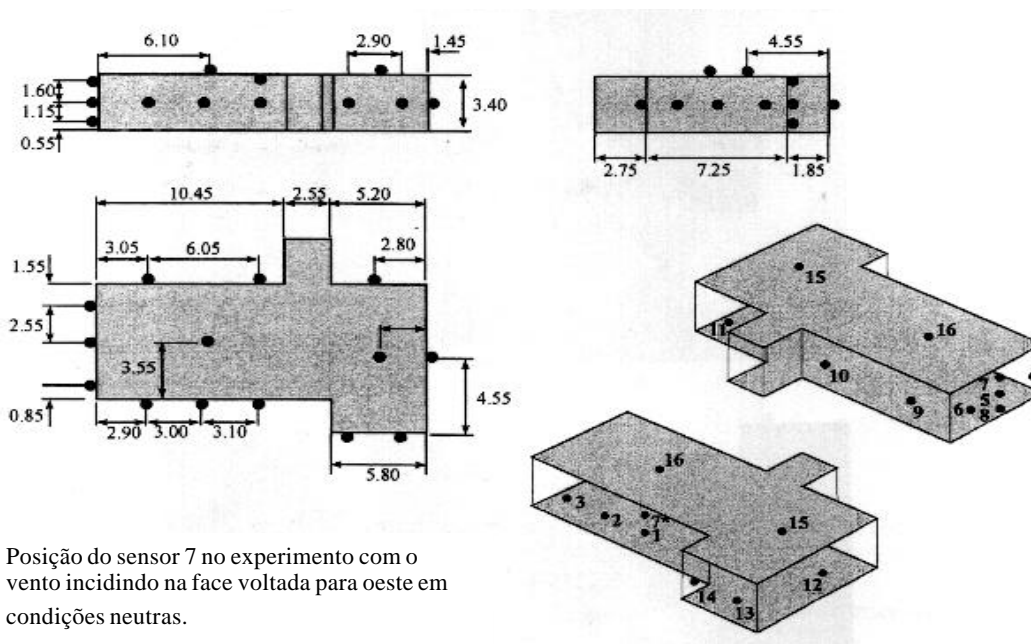
Os sensores e a fonte estavam localizados para alturas de $0,5H_o$ acima do solo, exceto o sensor 7 localizado a uma altura de $0,97H_o$, o sensor 8 localizado próximo do solo ($0,25H_o$ acima do solo) e os sensores 15 e 16 localizados no telhado do obstáculo, conforme ilustrado na Fig. (1). Os dados meteorológicos foram obtidos utilizando-se três anemômetros ultra-sônicos localizados nas seguintes alturas do solo: $0,44H_o$, $0,88H_o$ e $1,76H_o$ a uma distância de 30 m a oeste do obstáculo. Estes instrumentos forneceram as três componentes ortogonais do vetor velocidade do vento e a velocidade do som no ar ambiente na frequência de 21 Hz.

Neste trabalho serão estudadas as seguintes condições experimentais: vento incidindo na face maior ($L_{oeste}/H_o = 5,35$), voltada para oeste em condições atmosféricas: neutra e instável, denominados, respectivamente, experimentos OESTE-NEUTRA e OESTE-INSTÁVEL.

Para verificar o comportamento das flutuações turbulentas de concentração, gráficos da concentração em função do tempo foram construídos para as condições experimentais investigadas. Cada gráfico tem 5 minutos de duração e as concentrações são apresentados na forma adimensional (K_c) conforme equação abaixo.

$$K_c = \frac{C \bar{U} H_o^2}{Q_e} \quad (1)$$

onde C é a concentração em ppm, \bar{U} é a velocidade média do vento à montante do obstáculo na altura H_o em m/s, H_o é a altura do obstáculo em metros e Q_e é a taxa de vazão volumétrica do gás na fonte em m^3/s . Os dados meteorológicos para os cenários escolhidos são mostrados na Tab. (1) \bar{J} é a direção média do vento, σ_J é o desvio padrão da direção do vento na lateral, L é o comprimento de Monin-Obukov, Ri é o número de Richardson fluxo e \bar{T}_c é a temperatura.



Posição do sensor 7 no experimento com o vento incidindo na face voltada para oeste em condições neutras.

Figura 1– Representação esquemática da localização dos sensores PID nas superfícies do obstáculo. As dimensões do obstáculo estão expressas em metros (Santos, 2000).

Tabela 1 – Dados meteorológicos obtidos dos experimentos de campo (Santos, 2000).

EXPT. NO.	ESTABILIDADE	TEMPO DE MÉDIA (min)	\bar{u} (m/s)	\bar{J} (graus)	s_J	L (m)	Ri	\bar{T}_c (°C)
1	OESTE-NEUTRA	5	6,15	180,7	8,30	-50,84	$5,9 \times 10^{-2}$	41,25
2	OESTE-INSTÁVEL	5	2,48	265,1	21,38	-0,98	-3,70	40,36

4. Resultados

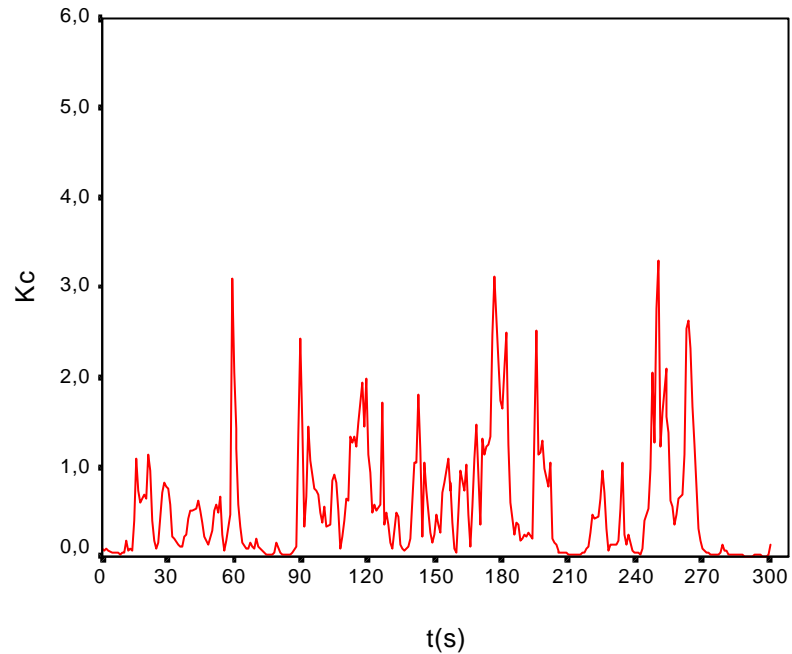
Séries temporais de concentrações são apresentadas na forma adimensional e são analisadas a fim de investigar os principais efeitos das diferentes condições de estabilidade atmosférica na dispersão de poluentes. As Fig. 2(a) e 2(b) mostram os registros do sensor 1 localizado na superfície do obstáculo na região do fluxo incidente, as Fig. 3(a) e 3(b) apresentam os registros do sensor 10 na região de esteira próxima

Para ambas as condições de estabilidade analisadas e para a condição de lançamento do experimento, ocorreram baixos níveis de concentração na região de esteira próxima, Fig. 3(a) e 3(b), quando comparados com as concentrações medidas na região do fluxo incidente, Fig. 2(a) e 2(b). A pluma é bastante afetada pelos vórtices ferraduras e pelo escoamento incidente, respectivamente na parte superior e inferior da superfície frontal, assim, parte dos contaminantes são transportados pelos vórtices ferraduras nas laterais do obstáculo na região próxima ao solo e parte é transportada sobre o telhado para então penetrarem na zona de cavidade (ou região de esteira próxima).

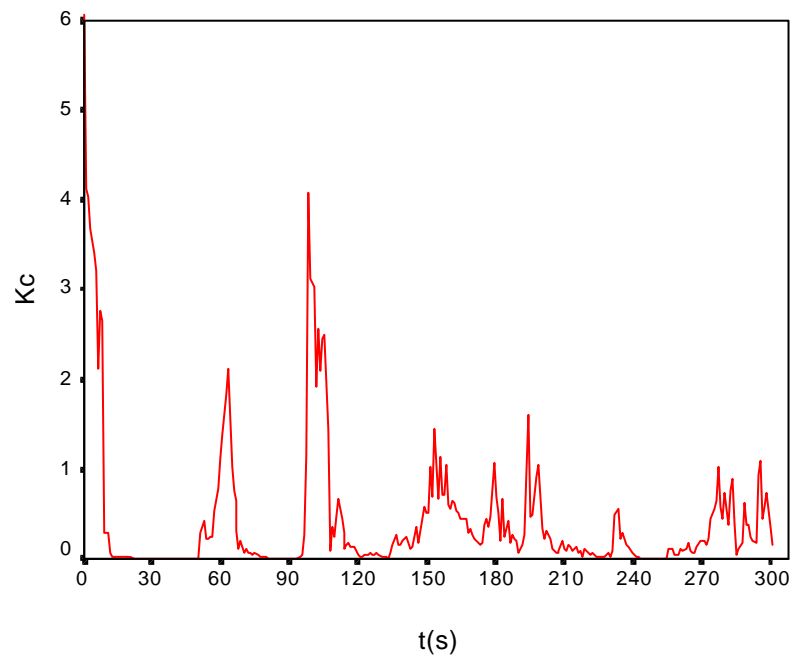
Os gráficos das séries temporais observadas para os sensores localizados na região de fluxo incidente, Fig. 2(a) e 2(b), são completamente diferentes das séries temporais dos sensores localizados na superfície à jusante, Fig. 3(a) e 3(b). As diferentes escalas da turbulência podem contribuir para esse comportamento diferente das séries temporais (Higson et al., 1996). Os vórtices turbulentos de escala de comprimento maiores que a largura da pluma causam as oscilações da direção da pluma em escalas de segundos a minutos, conduzindo a períodos de concentração nula, enquanto os vórtices de pequenas escalas com tamanhos menores ou comparáveis a largura da pluma, permitem a entrada de ar limpo e saída de contaminantes. O sensor 1 da região do fluxo incidente para os experimentos OESTE-NEUTRA e OESTE-INSTÁVEL, Fig. 2(a) e 2(b), apresentou episódios de concentração nula, sendo esses episódios bem definidos. Este comportamento sugere que nesta região existem vórtices de escalas de comprimento maiores ou comparáveis ao comprimento da pluma, em ambas as condições de estabilidade investigadas. Higson et. al. (1996) também realizaram experimentos de campo para investigar as influências da estratificação térmica em condições instáveis e estáveis nas flutuações de concentração. Para o caso instável observaram o mesmo comportamento identificado neste trabalho. Em condições estáveis não observaram períodos de concentração nula na região do fluxo incidente.

Observa-se através dos gráficos das Fig. 3(a) e 3(b) que não existiram episódios de concentração nula para os sensores localizados na região de esteira próxima, não ocorrendo diferenças significativas em condições neutras e instáveis. Esta mesma conclusão foi proposta por Snyder (1994). A região de esteira próxima é caracterizada por velocidade média baixa do escoamento e alta intensidade da turbulência, assim, tem-se uma contínua presença de poluentes nos locais medidos resultando numa boa mistura de contaminantes.

Os valores das concentrações médias obtidas foram cerca de 44% menores no caso instável em relação ao caso neutro, Tab. (2). Entretanto, na parede lateral esquerda, não ocorreram diferenças significativas entre os casos neutro e instável (4% menor no caso instável), este comportamento pode ser atribuído a direção do vento incidente para as condições convectivas, Tab. (1). Pode-se observar na Tab. (2), que os valores das flutuações turbulentas de concentração (\hat{c}) no caso instável para os sensores localizados na região de fluxo incidente e no telhado foram, respectivamente, cerca de 21% e 23% maiores, não apresentando assim, diferenças significativas em relação ao caso neutro. Entretanto, para os sensores localizados na superfície do obstáculo na região de esteira próxima os valores de (i) foram cerca de 50% maiores, na parede lateral esquerda 31% maiores e na parede lateral direita 60% maiores no caso instável. Este comportamento sugere que a estratificação térmica tem influência nos valores de (i) na região de esteira próxima.

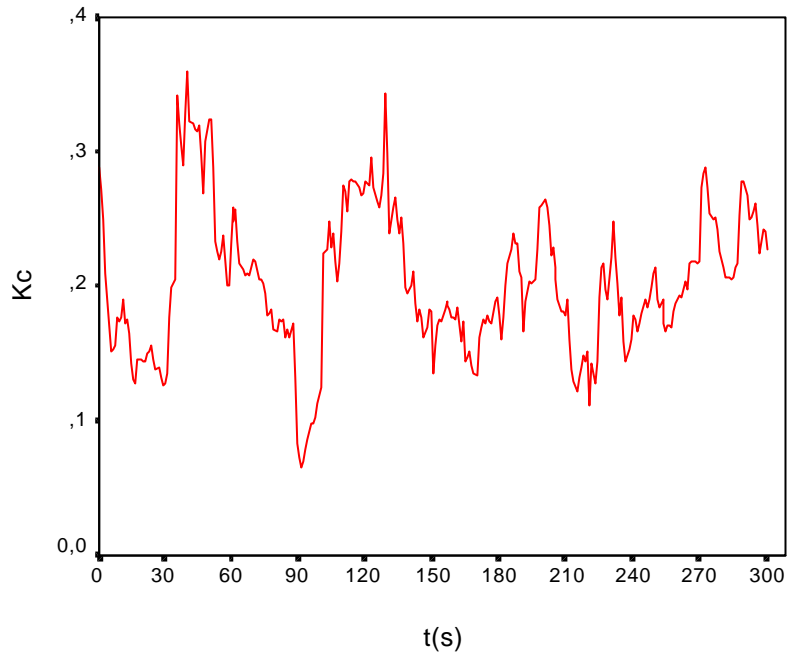


(a)

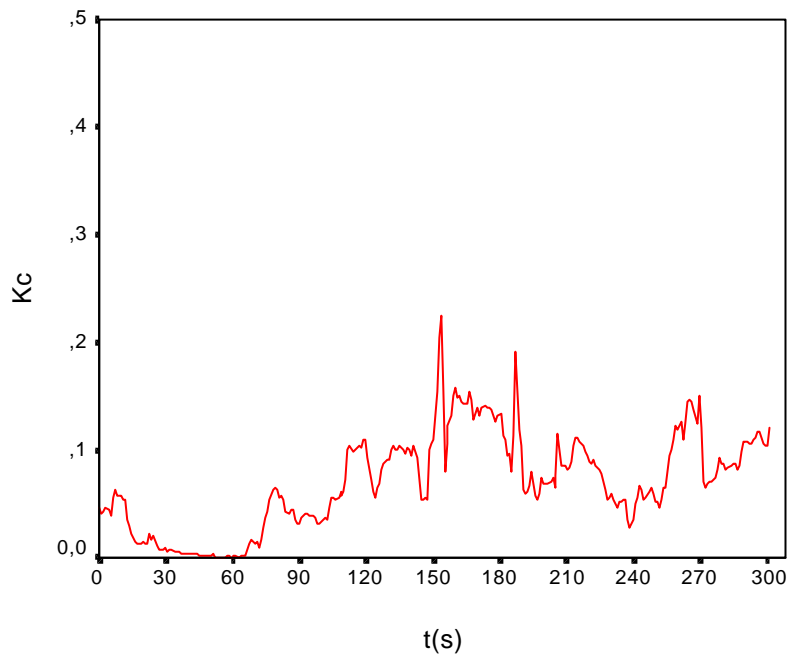


(b)

Figura 2 – Série temporal das concentrações medidas na região do fluxo incidente para o sensor PID-1 nos experimentos: (a) OESTE-NEUTRA e (b) OESTE-INSTÁVEL.



(a)



(b)

Figura 3 – Série temporal das concentrações medidas na região de esteira próxima para o sensor PID-10 nos experimentos: (a) OESTE-NEUTRA e (b) OESTE-INSTÁVEL.

Através dos gráficos das séries originais $\{X_t\}$, Fig. 2(a), 2(b), 3(a) e 3(b), observa-se que as médias da concentração são variáveis com o tempo. Este resultado era esperado devido ao fenômeno investigado estar relacionado com uma turbulência não-estacionária. Este comportamento sugere que os processos estudados não são estacionários na média. É importante ressaltar que uma série não estacionária na média também não é estacionária em variância. Os diagramas das funções de autocorrelação das séries originais, observadas nas Fig. 4(a), mostram um decaimento muito lento para zero e em “lags” distantes apresentam picos que ultrapassam o intervalo de confiança. Os diagramas das funções de autocorrelação parcial destas séries observados nestas Fig. 4(b), apresentam um único e elevado pico para $k = 1$ e em “lags” distantes apresentam valores que ultrapassam o intervalo de confiança. Este comportamento das FAC e FACP também indicam que as séries originais não são estacionárias.

Tabela 2 - Concentração adimensional média $\{\bar{X}_t\}$, intervalo de confiança da média (I.C.) e intensidade das flutuações turbulentas de concentração (i) das concentrações medidas nas superfícies do obstáculo.

REGIÃO	OESTE-NEUTRA				OESTE-INSTÁVEL			
	PID	\bar{X}_t	I.C.	i	PID	\bar{X}_t	I.C.	i
REGIÃO DO FLUXO INCIDENTE	1	0,568	0,494 ≤ μ ≤ 0,643	1,158	1	0,426	0,337 ≤ μ ≤ 0,516	1,852
	2	0,450	0,393 ≤ μ ≤ 0,506	1,108	2	0,407	0,326 ≤ μ ≤ 0,487	1,737
	3	0,354	0,299 ≤ μ ≤ 0,408	1,347	3	0,308	0,248 ≤ μ ≤ 0,367	1,708
	7	0,594	0,504 ≤ μ ≤ 0,684	1,331				
	13	0,153	0,119 ≤ μ ≤ 0,187	1,967	13	0,217	0,163 ≤ μ ≤ 0,270	2,170
	14	0,239	0,194 ≤ μ ≤ 0,284	1,665	14	0,171	0,140 ≤ μ ≤ 0,202	1,585
REGIÃO DE ESTEIRA PRÓXIMA	9	0,181	0,175 ≤ μ ≤ 0,187	0,283	9	0,089	0,082 ≤ μ ≤ 0,096	0,662
	10	0,204	0,197 ≤ μ ≤ 0,210	0,266	10	0,070	0,065 ≤ μ ≤ 0,075	0,641
	11	0,129	0,121 ≤ μ ≤ 0,136	0,519	11	0,034	0,031 ≤ μ ≤ 0,037	0,794
PAREDE LATERAL ESQUERDA	4	0,166	0,148 ≤ μ ≤ 0,184	0,940	4	0,181	0,157 ≤ μ ≤ 0,204	1,132
	5	0,164	0,146 ≤ μ ≤ 0,181	0,933	5	0,171	0,148 ≤ μ ≤ 0,194	1,199
	6	0,132	0,120 ≤ μ ≤ 0,145	0,848	6	0,150	0,128 ≤ μ ≤ 0,171	1,267
					7	0,118	0,099 ≤ μ ≤ 0,136	1,381
	8	0,193	0,175 ≤ μ ≤ 0,211	0,834	8	0,177	0,154 ≤ μ ≤ 0,200	1,148
PAR. LATERAL DIREITA	12	0,078	0,064 ≤ μ ≤ 0,091	1,526	12	0,061	0,041 ≤ μ ≤ 0,080	2,836
TELHADO	15	0,183	0,151 ≤ μ ≤ 0,216	1,563	15	0,112	0,085 ≤ μ ≤ 0,140	2,152
	16	0,279	0,249 ≤ μ ≤ 0,310	0,953	16	0,113	0,094 ≤ μ ≤ 0,132	1,478

A análise dos gráficos das séries originais, das FAC e FACP indicam a necessidade de processo de transformação e diferenciação que permitem transformar uma série não estacionária para um série estacionária. Os diagramas das FAC também sugerem uma possível aplicação de modelos de longa dependência.

Os processos que estabilizam a variância foram generalizados por Box e Cox (Brocwell e Davis, 1996). Pode-se estimar o valor do parâmetro de transformação I pelo método de máximo verossimilhança dado pela soma dos quadrados residuais:

$$S(I) = \sum_{t=1}^n [X_t(I) - \bar{X}]^2 \tag{2}$$

onde \bar{X} é a média amostral da série transformada. O parâmetro de transformação foi escolhido no intervalo [-1,+1] de modo a minimizar $S(I)$. Os valores mais correntes correspondem às transformações da Tab. (3).

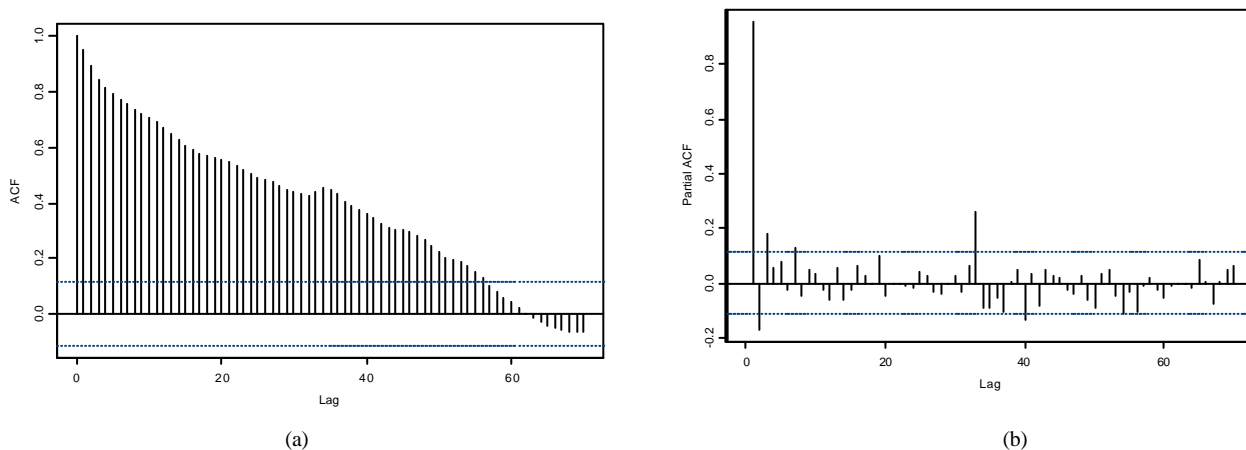


Figura 4 – Sensor PID-10 localizado na região de esteira próxima: (a) FAC e (b) FACP

Tabela 3 – Transformações Box e Cox, para alguns valores de I .

VALORES DE I	TRANSFORMAÇÃO
-1,0	$1/X_t$
-0,5	$1/\sqrt{X_t}$
0,0	$\ln X_t$
0,5	$\sqrt{X_t}$
1,0	X_t

Para a maioria dos sensores, o valor que minimiza $S(I)$ foi $I = 1,0$. Porém, o valor que minimiza $S(I)$ foi $I = 0,5$, para os seguintes sensores: no experimento OESTE-NEUTRA, PID-1, PID-2, PID-3, PID-7, PID-13 e PID-14 e no experimento OESTE-INSTÁVEL, PID-1, PID-2, PID-3, PID-13 e PID-14. Estes sensores estão localizados na região do fluxo incidente e são aqueles que apresentaram maiores valores da intensidade das flutuações turbulentas de concentração (i), Tab. (2) e maiores valores da variância, Tab. (4), em relação aos demais sensores.

Tabela 4 – Variâncias amostrais das séries originais de concentração (X_t), das séries transformadas (Z_t) e das séries diferenciadas (Y_t).

REGIÃO	OESTE-NEUTRA				OESTE-INSTÁVEL			
	PID	X_t	Z_t	Y_t	PID	X_t	Z_t	Y_t
REGIÃO DO FLUXO INCIDENTE	1	$4,3 \times 10^{-1}$	$1,7 \times 10^{-1}$	$5,3 \times 10^{-2}$	1	$6,2 \times 10^{-1}$	$1,9 \times 10^{-1}$	$8,2 \times 10^{-2}$
	2	$2,5 \times 10^{-1}$	$1,4 \times 10^{-1}$	$6,1 \times 10^{-2}$	2	$5,0 \times 10^{-1}$	$1,9 \times 10^{-1}$	$3,8 \times 10^{-2}$
	3	$2,3 \times 10^{-1}$	$1,1 \times 10^{-1}$	$4,5 \times 10^{-2}$	3	$2,8 \times 10^{-1}$	$1,4 \times 10^{-1}$	$8,1 \times 10^{-2}$
	7	$6,3 \times 10^{-1}$	$2,0 \times 10^{-1}$	$1,2 \times 10^{-1}$				
	13	$1,0 \times 10^{-1}$	$0,7 \times 10^{-1}$	$3,2 \times 10^{-2}$	13	$2,2 \times 10^{-1}$	$1,4 \times 10^{-1}$	$1,8 \times 10^{-2}$
	14	$1,6 \times 10^{-1}$	$1,1 \times 10^{-1}$	$5,3 \times 10^{-2}$	14	$7,3 \times 10^{-2}$	$9,5 \times 10^{-2}$	$1,1 \times 10^{-2}$
REGIÃO DE ESTEIRA PRÓXIMA	9	$2,6 \times 10^{-3}$		$3,6 \times 10^{-4}$	9	$3,0 \times 10^{-3}$		$1,3 \times 10^{-4}$
	10	$2,9 \times 10^{-3}$		$4,0 \times 10^{-4}$	10	$2,0 \times 10^{-3}$		$3,2 \times 10^{-4}$
	11	$4,6 \times 10^{-3}$		$3,9 \times 10^{-4}$	11	$1,0 \times 10^{-3}$		$2,5 \times 10^{-4}$
PAREDE LATERAL ESQUERDA	4	$2,1 \times 10^{-2}$		$4,1 \times 10^{-3}$	4	$3,5 \times 10^{-2}$		$2,4 \times 10^{-3}$
	5	$1,9 \times 10^{-2}$		$2,4 \times 10^{-3}$	5	$4,2 \times 10^{-2}$		$3,4 \times 10^{-3}$
	6	$1,3 \times 10^{-2}$		$1,7 \times 10^{-3}$	6	$3,6 \times 10^{-2}$		$6,0 \times 10^{-3}$
					7	$1,6 \times 10^{-2}$		$4,6 \times 10^{-3}$
	8	$2,6 \times 10^{-2}$		$6,1 \times 10^{-3}$	8	$4,1 \times 10^{-2}$		$3,1 \times 10^{-3}$
PAREDE LATERAL DIREITA	12	$1,4 \times 10^{-2}$		$3,4 \times 10^{-3}$	12	$3,0 \times 10^{-2}$	$3,9 \times 10^{-2}$	$2,7 \times 10^{-3}$
TELHADO	15	$7,6 \times 10^{-2}$		$2,9 \times 10^{-2}$	15	$3,4 \times 10^{-2}$		$8,8 \times 10^{-3}$
	16	$5,1 \times 10^{-2}$		$1,3 \times 10^{-2}$	16	$2,4 \times 10^{-2}$		$9,6 \times 10^{-3}$

Realizada a transformação Box eCox, $\sqrt{X_t}$, os sensores localizados na região do fluxo incidente ainda apresentaram variância maior em relação aos demais sensores dentro de cada condição experimental investigada, Tab. (4). Pode-se observar através das Fig. (5) que as séries transformadas $\{Z_t = \sqrt{X_t}\}$ sugere um comportamento que não pode-se ser considerado estacionário. Este resultado sugere que mesmo após o processo de transformação ainda não foram eliminadas as influências dos vórtices de escalas da turbulência de tamanhos maiores ou comparáveis ao tamanho da pluma.

Para estacionarizar as séries foi necessário aplicar o processo de diferenciação. Seja ∇ o operador diferença: $\nabla^d X_t = (1 - B)^d X_t$, para qualquer inteiro $d \geq 0$, o inteiro d é a ordem das diferenças ou da diferenciação e B é o operador defasagem. As séries $\{Y_t\}$ obtidas após a filtragem através de ∇ sugere um comportamento que pode ser considerado estacionário, Fig. (6).

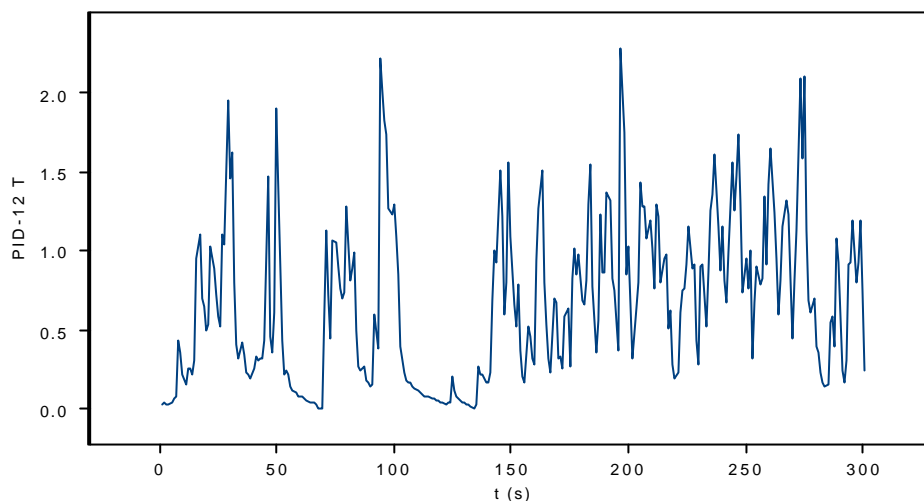


Figura 5 – Série obtida após o processo de transformação Box-Cox para o sensor PID-1 no experimento OESTE-INSTÁVEL.

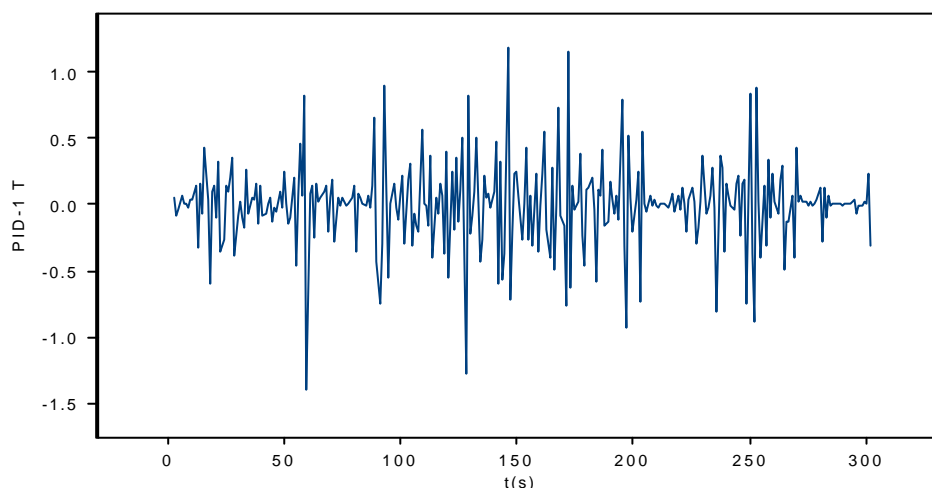


Figura 6 – Série estacionária obtida após o processo de diferenciação para o sensor PID-1 no experimento OESTE-INSTÁVEL.

A etapa seguinte da metodologia Box-Jenkins consiste da escolha de modelos estacionários ARMA (p,q) que melhor se ajustam aos dados de concentração provenientes dos experimentos de campo e que representam o comportamento das séries estacionárias nos diferentes pontos físicos do obstáculo. As Tab. (5) e (6), apresentam os resultados dos modelos que se ajustaram aos processos de verificação da qualidade estatística dos parâmetros estimados. As Tab. (5) e (6), também, apresentam os modelos que se ajustaram os dados de concentração. Os modelos que não foram rejeitados no teste Ljung-Box apresentaram a estatística (\tilde{Q}) inferior ao quantil 0,95 da distribuição Qui-quadrado. Portanto considerar que as séries \tilde{Y}_t representam um modelo estacionário e homogêneo. Os modelos que foram rejeitados no teste Ljung-Box apresentaram a estatística (\tilde{Q}) superior ao quantil 0,95 da distribuição Qui-quadrado.

Para avaliar a qualidade dos modelos ajustados aos dados originais utiliza-se o processo de previsão. Para este cálculo utilizou-se os 301 valores iniciais das séries e previsões de um passo à frente. No estudo dos modelos estacionários as previsões estimadas tendem a se aproximar da média do processo. A Tab. (8) apresenta a média amostral e a intensidade das flutuações de concentração das séries simuladas através da previsão. Os resultados da Tab.

(7) mostram que as previsões estimadas pelos modelos ARMA (p,q) tendem para a média e intensidade de flutuações turbulentas de concentração das séries originais.

Tabela 5 – Parâmetros estimados dos modelos que melhor se ajustaram as séries estacionarizadas do experimento OESTE-NEUTRA.

PID	TRANS./DIF.	MODELO	TESTE LJUNG-BOX			PARÂMETRO ESTIMADO	D. P. PARAMÉTRO ESTIMADO	TESTE t	I. C. PARAMÉTRO ESTIMADO
			G.L.	Q_c	\hat{Q}				
1	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (1,2)	13	24,7	9,04	$\hat{f}_1 = 0,7967$	0,045	17,57	$0,708 \leq \phi_1 \leq 0,885$
						$\hat{q}_1 = 0,8103$	0,298	2,72	$0,226 \leq \theta_1 \leq 1,394$
						$\hat{q}_2 = 0,1894$	0,081	2,34	$0,031 \leq \theta_2 \leq 0,348$
2	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (0,2)	14	26,1	28,00	$\hat{q}_1 = 0,1874$	0,056	3,34	$0,078 \leq \theta_1 \leq 0,297$
						$\hat{q}_2 = 0,2572$	0,056	4,58	$0,147 \leq \theta_2 \leq 0,367$
3	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (1,2)	13	24,7	9,59	$\hat{f}_1 = 0,4674$	0,091	5,18	$0,289 \leq \phi_1 \leq 0,670$
						$\hat{q}_1 = 0,3223$	0,083	3,89	$0,160 \leq \theta_1 \leq 0,485$
						$\hat{q}_2 = 0,4921$	0,053	9,29	$0,388 \leq \theta_2 \leq 0,596$
4	$(1-B) X_t$	ARMA (1,0)	15	27,5	24,54	$\hat{f}_1 = 0,1122$	0,056	1,94	$-0,148 \leq \phi_1 \leq 0,244$
5	$(1-B) X_t$	ARMA (1,2)	13	24,7	10,11	$\hat{f}_1 = 0,8950$	0,035	25,81	$0,826 \leq \phi_1 \leq 0,964$
						$\hat{q}_1 = 0,5534$	0,081	6,82	$0,395 \leq \theta_1 \leq 0,712$
						$\hat{q}_2 = 0,4438$	0,057	7,76	$0,332 \leq \theta_2 \leq 0,555$
6	$(1-B) X_t$	ARMA (0,2)	14	26,1	18,65	$\hat{q}_1 = -0,2857$	0,058	-4,96	$-0,399 \leq \theta_1 \leq -0,172$
						$\hat{q}_2 = -0,1252$	0,058	-2,16	$-0,239 \leq \theta_2 \leq -0,011$
7	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (0,2)	14	26,1	17,49	$\hat{q}_1 = 0,3257$	0,056	5,78	$0,216 \leq \theta_1 \leq 0,435$
						$\hat{q}_2 = 0,2387$	0,056	4,23	$0,129 \leq \theta_2 \leq 0,348$
8	$(1-B)^2 X_t$	ARMA (1,2)	13	24,7	12,54	$\hat{f}_1 = 0,8519$	0,039	21,62	$0,775 \leq \phi_1 \leq 0,928$
						$\hat{q}_1 = 0,5240$	0,202	2,59	$0,128 \leq \theta_1 \leq 0,920$
						$\hat{q}_2 = 0,4751$	0,100	4,73	$0,279 \leq \theta_2 \leq 0,671$
9	$(1-B) X_t$	ARMA (1,0)	15	27,5	20,70	$\hat{f}_1 = 0,2121$	0,057	3,75	$0,100 \leq \theta_1 \leq 0,324$
10	$(1-B) X_t$	ARMA (1,0)	15	27,5	7,94	$\hat{f}_1 = 0,1175$	0,057	2,04	$0,006 \leq \phi_1 \leq 0,229$
11	$(1-B) X_t$	ARMA (1,0)	15	27,5	23,33	$\hat{f}_1 = 0,1902$	0,057	3,34	$0,078 \leq \phi_1 \leq 0,302$
12	$(1-B)^2 X_t$	ARMA (0,2)	14	26,1	17,70	$\hat{q}_1 = 0,8488$	0,098	8,68	$0,657 \leq \theta_1 \leq 1,0413$
						$\hat{q}_2 = 0,1483$	0,059	2,51	$0,033 \leq \theta_2 \leq 0,264$
13	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (0,2)	14	26,1	22,49	$\hat{q}_1 = 0,1569$	0,058	2,70	$0,043 \leq \theta_1 \leq 0,271$
						$\hat{q}_2 = 0,2237$	0,058	3,85	$0,110 \leq \theta_2 \leq 0,337$
14	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (1,2)	13	27,5	35,28	$\hat{f}_1 = 0,6366$	0,066	9,59	$0,507 \leq \phi_1 \leq 0,766$
						$\hat{q}_1 = 0,7083$	0,079	8,99	$0,553 \leq \theta_1 \leq 0,863$
						$\hat{q}_2 = 0,2587$	0,071	3,63	$0,119 \leq \theta_2 \leq 0,398$
15	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (0,2)	14	26,1	20,88	$\hat{q}_1 = 0,1321$	0,057	2,31	$0,020 \leq \theta_1 \leq 0,244$
						$\hat{q}_2 = 0,2098$	0,057	3,65	$0,098 \leq \theta_2 \leq 0,321$
16	$(1-B) X_t$	ARMA (1,2)	13	26,1	18,63	$\hat{f}_1 = 0,7911$	0,044	18,12	$0,705 \leq \phi_1 \leq 0,877$
						$\hat{q}_1 = 0,5449$	0,168	3,24	$0,216 \leq \theta_1 \leq 0,874$
						$\hat{q}_2 = 0,4534$	0,086	5,25	$0,285 \leq \theta_2 \leq 0,622$

Tabela 6 – Parâmetros estimados dos modelos que melhor se ajustaram as séries estacionarizadas do experimento OESTE-INSTÁVEL.

PID	TRANS./ DIF.	MODELO	TESTE LJUNG- BOX			PARÂMETRO ESTIMADO	D. P. PARAMÉTRO ESTIMADO	TESTE t	I. C. PARAMÉTRO ESTIMADO
			G.L.	ϱ_c	$\hat{\varrho}$				
1	$(1-B)^2\sqrt{X_t}$	ARMA (2,0)	14	26,1	61,64	$\hat{f}_1 = -0,6488$	0,055	-11,76	$-0,757 \leq \phi_1 \leq -0,541$
						$\hat{f}_2 = -0,3183$	0,055	-5,75	$-0,426 \leq \phi_2 \leq -0,210$
2	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (2,0)	14	26,1	10,48	$\hat{f}_1 = 0,1887$	0,057	3,29	$0,077 \leq \phi_1 \leq 0,300$
						$\hat{f}_2 = -0,1602$	0,057	-2,79	$-0,272 \leq \phi_2 \leq -0,048$
3	$(1-B)^2\sqrt{X_t}$	ARMA (0,2)	14	26,1	35,74	$\hat{q}_1 = 0,6012$	0,061	9,84	$0,482 \leq \theta_1 \leq 0,721$
						$\hat{q}_2 = 0,3356$	0,061	5,54	$0,216 \leq \theta_2 \leq 0,455$
4	$(1-B)X_t$	ARMA (1,2)	13	24,7	23,95	$\hat{f}_1 = 0,6883$	0,148	4,63	$0,398 \leq \phi_1 \leq 0,978$
						$\hat{q}_1 = 0,8497$	0,148	5,72	$0,560 \leq \theta_1 \leq 1,190$
						$\hat{q}_2 = -0,2645$	0,056	-4,70	$-0,374 \leq \theta_2 \leq -0,155$
5	$(1-B)X_t$	ARMA (2,0)	14	26,1	25,91	$\hat{f}_1 = 0,2470$	0,057	4,31	$0,135 \leq \phi_1 \leq 0,359$
						$\hat{f}_2 = -0,1522$	0,057	-2,65	$-0,264 \leq \phi_2 \leq -0,040$
6	$(1-B)X_t$	ARMA (2,0)	14	26,1	26,10	$\hat{f}_1 = 0,1105$	0,055	2,02	$0,003 \leq \phi_1 \leq 0,218$
						$\hat{f}_2 = -0,3349$	0,055	-6,13	$-0,443 \leq \phi_2 \leq -0,227$
7	$(1-B)^2X_t$	ARMA (0,2)	14	26,1	33,18	$\hat{q}_1 = 0,7643$	0,105	7,31	$0,558 \leq \theta_1 \leq 0,970$
						$\hat{q}_2 = 0,2325$	0,064	3,61	$0,107 \leq \theta_2 \leq 0,358$
8	$(1-B)X_t$	ARMA (1,0)	15	27,5	30,15	$\hat{f}_1 = 0,1514$	0,057	2,64	$0,040 \leq \phi_1 \leq 0,263$
9	$(1-B)X_t$	ARMA (0,2)	14	26,1	16,71	$\hat{q}_1 = 0,7520$	0,245	3,07	$0,272 \leq \theta_1 \leq 1,232$
						$\hat{q}_2 = 0,2470$	0,090	2,75	$0,071 \leq \theta_2 \leq 0,423$
10	$(1-B)X_t$	ARMA (1,2)	13	24,7	12,42	$\hat{f}_1 = 0,6187$	0,117	5,29	$0,389 \leq \phi_1 \leq 0,848$
						$\hat{q}_1 = 0,4558$	0,116	3,93	$0,228 \leq \theta_1 \leq 0,683$
						$\hat{q}_2 = 0,3321$	0,056	5,92	$0,222 \leq \theta_2 \leq 0,442$
11	$(1-B)^2X_t$	ARMA (2,0)	14	26,1	60,48	$\hat{f}_1 = -0,6774$	0,058	-11,71	$-0,791 \leq \phi_1 \leq -0,564$
						$\hat{f}_2 = -0,2375$	0,058	-4,07	$-0,351 \leq \phi_2 \leq -0,124$
12	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (0,2)	14	26,1	46,74	$\hat{q}_1 = -0,2581$	0,051	-5,00	$-0,358 \leq \theta_1 \leq -0,158$
						$\hat{q}_2 = -0,4620$	0,051	-8,96	$-0,562 \leq \theta_2 \leq -0,362$
13	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (2,2)	12	23,3	26,91	$\hat{f}_1 = -0,4493$	0,088	-5,09	$-0,622 \leq \phi_1 \leq -0,277$
						$\hat{f}_2 = -0,8012$	0,086	-9,35	$-0,970 \leq \phi_2 \leq -0,633$
						$\hat{q}_1 = -0,4602$	0,117	-3,91	$-0,689 \leq \theta_1 \leq -0,231$
						$\hat{q}_2 = -0,600$	0,116	-5,16	$-0,827 \leq \theta_2 \leq -0,373$
14	$(1-B)\sqrt{X_t}$	ARMA (1,1)	14	26,1	21,96	$\hat{f}_1 = -0,6218$	0,138	-4,51	$-0,892 \leq \phi_1 \leq -0,351$
						$\hat{q}_1 = -0,7903$	0,108	-7,31	$-1,002 \leq \theta_1 \leq -0,520$
15	$(1-B)^2X_t$	ARMA (0,2)	14	26,1	71,72	$\hat{q}_1 = 0,6377$	0,103	6,20	$0,436 \leq \theta_1 \leq 0,839$
						$\hat{q}_2 = 0,3560$	0,071	5,03	$0,217 \leq \theta_2 \leq 0,495$
16	$(1-B)X_t$	ARMA (1,2)	13	24,7	64,94	$\hat{f}_1 = 0,2932$	0,128	2,29	$0,042 \leq \phi_1 \leq 0,554$
						$\hat{q}_1 = 0,3085$	0,120	2,57	$0,073 \leq \theta_1 \leq 0,544$
						$\hat{q}_2 = 0,3813$	0,060	6,35	$0,264 \leq \theta_2 \leq 0,499$

Tabela 7- Concentração adimensional média $\{\bar{X}_t\}$, intervalo de confiança da média (I.C.) e intensidade das flutuações turbulentas de concentração (i) das séries originais e de previsão de um passo à frente.

REGIÃO	OESTE-NEUTRA					OESTE-INSTÁVEL				
	PID	SÉRIE ORIGINAL		PREVISÃO		PID	SÉRIE ORIGINAL		PREVISÃO	
		\bar{X}_t	i	\bar{X}_t	i		\bar{X}_t	i	\bar{X}_t	i
REGIÃO DO FLUXO INCIDENTE	1	0,568	1,158	0,573	1,694	1	0,426	1,852	0,368	1,973
	2	0,450	1,108	0,453	1,077	2	0,407	1,737	0,388	1,691
	3	0,354	1,347	0,356	1,520	3	0,308	1,708	0,311	2,723
	7	0,594	1,331	0,600	1,338					
	13	0,153	1,967	0,154	2,026	13	0,217	2,170	0,219	2,173
	14	0,239	1,665	0,242	1,563	14	0,171	1,585	0,172	1,535
REGIÃO DE ESTEIRA PRÓXIMA	9	0,181	0,283	0,180	0,289	9	0,089	0,662	0,089	0,697
	10	0,204	0,266	0,203	0,266	10	0,070	0,641	0,070	0,671
	11	0,129	0,519	0,129	0,527	11	0,034	0,794	0,034	0,853
PAREDE LATERAL ESQUERDA	4	0,166	0,940	0,166	0,940	4	0,181	1,132	0,181	1,132
	5	0,164	0,933	0,164	0,933	5	0,171	1,199	0,171	1,199
	6	0,132	0,848	0,132	0,848	6	0,150	1,267	0,150	1,267
						7	0,118	1,381	0,118	1,381
	8	0,193	0,834	0,194	1,015	8	0,177	1,148	0,178	1,140
PAR. LATERAL DIREITA	12	0,078	1,526	0,078	1,846	12	0,061	2,836	0,061	2,770
TELHADO	15	0,183	1,563	0,183	1,563	15	0,112	2,152	0,112	2,152
	16	0,279	0,953	0,279	0,953	16	0,113	1,478	0,113	1,478

5. Conclusões

Na região do fluxo incidente, os gráficos das séries temporais de concentração apresentaram episódios de concentração nula seguidos de altos valores “instantâneos” de concentração, sugerindo que nesta região existem vórtices de escalas da turbulência de tamanhos maiores ou comparáveis ao tamanho da pluma em condições neutras e instáveis. Na região de esteira próxima, os gráficos não apresentaram episódios em que as concentrações foram nulas, não ocorrendo diferenças significativas para as condições de estabilidade atmosférica analisadas. Nesta região tem-se uma presença contínua de poluentes nos locais medidos resultando numa boa mistura de contaminantes. O escoamento nas proximidades do obstáculo no caso instável contribuiu para uma dispersão mais rápida de contaminantes. Chega-se a esta conclusão através dos menores valores das concentrações médias calculadas e pela visualização dos gráficos das séries temporais para esta condição de estabilidade.

A estratificação térmica influenciou os valores da intensidade das flutuações turbulentas de concentração na região de esteira. Os valores encontrados nesta região foram em média 50% maiores no caso instável quando comparado com o caso neutro. Na região do fluxo incidente não ocorreram diferenças significativas nos valores de (i) entre os casos neutro e instável.

Através de uma análise estatística do fenômeno pode se concluir que os gráficos das séries originais apresentaram médias variáveis com o tempo. Indicando que os processos investigados não são estacionários em média. Os diagramas das funções de autocorrelação e autocorrelação parcial também indicaram este comportamento. Quanto a qualidade estatística dos modelos que se ajustaram aos dados experimentais, os resultados obtidos pela metodologia Box-Jenkins satisfazem os principais critérios de verificação. Foram verificados que: os parâmetros estimados são significativamente diferentes de zero, encontram-se afastados das regiões de não estacionaridade e de não invertibilidade e estão notoriamente não correlacionados.

Os valores da variância indicam as escalas da turbulência que contribuem para a dispersão de poluentes na atmosfera. Os resultados mostram que os sensores localizados na região do fluxo incidente apresentaram valores da variância maiores que os sensores localizados em outras regiões do escoamento. Neste caso foi necessário aplicar a transformação Box-Cox $\sqrt{X_t}$. Após a transformação, as séries localizadas na região de fluxo incidente ainda apresentaram um comportamento que pode ser considerado não-estacionário. Para estas séries e as demais medidas em

outras superfícies do obstáculo, após o processo de diferenciação simples, apresentaram baixos valores da variância e um comportamento que pode ser considerado estacionário na média.

Provavelmente, os vórtices turbulentos de escalas maiores que o tamanho da pluma causaram a elevada variabilidade da variância das séries originais fazendo com que os modelos ARMA (p,q) ajustados as séries medidas na região do fluxo incidente fossem rejeitados no teste Ljung-Box. Os resultados da tab (8) mostram que as previsões estimadas pelos modelos ARMA (p,q) tendem para a média e intensidade de flutuações de concentração do processo. Portanto, os modelos estocásticos ARMA (p,q) podem ser considerados adequados para representar as séries temporais de concentração medidas nas superfícies do obstáculo. Pode-se concluir que a metodologia Box-Jenkins conseguiu captar o comportamento das séries de concentrações, assim, essa modelagem pode simular o campo de concentração da dispersão de poluentes nas proximidades de um obstáculo isolado sob diferentes condições de estabilidade atmosférica.

6. REFERÊNCIAS

- Brocwell, P.J. e Davis, R.A. , Introduction Time Series and Forecasting, Springer, 1996.
- Haward, T. e Lamb, B.K., "Mean Instantaneous Field Measurements of Building Wakes Exhaust Dilution", 9th Joint Conference on Air Pollution Meeting, 1995.
- Higson, H.L., Griffiths, R.F., Jones, C.D. e Hall, D.J., "Concentration measurements around an isolated building. A comparasion between wind tunnel and field data. Atmospheric Environment, 1994, vol. 28(11), pp. 1827-1836.
- Higson, H.L., Griffiths, R.F., Jones, C.D. e Biltoft, "Effect of atmospheric stability on concentration fluctuations and wake retention time for dipersion in the vicinity of an isolated building" Environmetrics, 1996, vol. 6, pp. 571-581
- Mavroidis, I. e Griffiths, R.F., "Field and wind tunnel examination of the dispersion of atmospheric pollutants near a model building, 1999.
- Oikawa, S. e Meng Y., "A field study of diffusion around a model cube in a suburban area", Boundary Layer Meteorology, 1997, vol. 84, pp. 399-401.
- Santos, J.M., "Flow and dispersion around isolated building", Tese de Doutorado, University of Manchester Institute of Science and Technology, U.K., 2000.
- Santos, J.M., Griffiths, R.F., Jones, C.D. e Hall, D.J., "Wind flow and concentration fluctuation data around and obstacle: a field experiment work, Nato/CCMS International Technical Meeting on Air Pollution, 1998.
- Synder, W.H., "Some observations of the influence of stratification on diffusion in building wakes" In the Institute of Mathematics and its Application Conferences Series, Claredon Press, pp. 301-324, 1994.

STOCHASTICAL MODELLING OF TURBULENT CONCENTRATION FLUCTUATIONS OF ATMOSPHERIC POLLUTANTS

Reginaldo Rosa Cotto de Paula

Centro Federal de Educação Tecnológica do Espírito Santo
COFIS - Av. Vitória, 1729, Jucutuquara, Vitória -E.S., CEP 29444030
rcotto@bol.com.br

Jane Méri Santos

Universidade Federal do Espírito Santo
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental - Av. Fernando Ferrari S/N, Goiabeiras, Vitória -E.S.CEP 29060970
janemeri@npd.ufes.br

Valdério Anselmo Reisen

Universidade Federal do Espírito Santo
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental - Av. Fernando Ferrari S/N, Goiabeiras, Vitória -E.S.CEP 29060970
valderio@cce.ufes.br

Abstract. This paper studies the application of time series modelling to the description of turbulent concentration fluctuation of atmospheric pollutants around an isolated building under neutral and unstable atmospheric conditions. The "instantaneous" concentration data was obtained from field experiments carried out by Santos (2000). A rapid response photo-ionisation detector was used to obtain high frequency data (50Hz). The time series of concentration on the windward wall showed episodes of zero concentration, which is probably related to the larger turbulent eddies than the plume width reaching the obstacle. The thermal stratification has influenced the concentration fluctuation intensity on the leeward wall. The concentration fluctuation intensity is about 50% higher under unstable conditions. The stochastic quality of the models indicates that the results obtained using the Box-Jenkins methodology satisfy the main criteria of the verification process. The high variability of variance related to the original time series measured on the windward wall is probably the reason for the failing of the ARMA (p,q) model on the Ljung-Box test, however, the model forecast of concentration mean and concentration fluctuation intensity tend to the same values of these statistical moments of the original series. Thus, the results indicate that the time series analysis may be an adequate tool to represent the atmospheric dispersion of pollutant around buildings.

Keywords: concentration fluctuations, atmospheric turbulence, time series.