UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ARTES, CIÊNCIAS E HUMANIDADES
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM DE SISTEMAS COMPLEXOS

EDUARDO DE MELO DOS SANTOS

Difusão Turbulenta Atmosférica: uma aplicação a sistemas agrícolas

São Paulo

2017

EDUARDO DE MELO DOS SANTOS

Difusão Turbulenta Atmosférica: uma aplicação a sistemas agrícolas

Dissertação apresentada à Escola de Artes, Ciências e Humanidades da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências pelo Programa de Pós-graduação em Modelagem de Sistemas Complexos.

Versão Corrigida contendo as alterações solicitadas pela comissão julgadora em 24 de outubro de 2017. A versão original encontra-se em acervo reservado na Biblioteca da EACH/USP e na Biblioteca Digital de Teses e Dissertações da USP (BDTD), de acordo com a Resolução CoPGr 6018, de 13 de outubro de 2011.

Área de Concentração:

Sistemas Complexos

Orientador:

Prof. Dr. Diego Antonio Falceta Gonçalves

São Paulo

2017

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

CATALOGAÇÃO-NA-PUBLICAÇÃO

(Universidade de São Paulo. Escola de Artes, Ciências e Humanidades. Biblioteca)

Santos, Eduardo de Melo dos

Difusão turbulenta atmosférica: uma aplicação a sistemas agrícolas / Eduardo de Melo dos Santos ; orientador, Diego Antonio Falceta Gonçalves. – 2017.

90 f. : il

Dissertação (Mestrado em Ciências) - Programa de Pós-Graduação em Modelagem de Sistemas Complexos, Escola de Artes, Ciências e Humanidades, Universidade de São Paulo. Versão corrigida.

1. Sistemas dinâmicos. 2. Turbulência atmosférica - Simulação computacional. 3. Poluição atmosférica. 4. Pesticidas - Dispersão. 5. Fertilizantes - Dispersão. I. Gonçalves, Eduardo de Melo, orient. II. Título

CDD 22.ed.– 530.131

CRB-8 4936

Nome: SANTOS, Eduardo de Melo dos

Difusão Turbulenta Atmosférica: uma aplicação a sistemas agrícolas

Dissertação apresentada à Escola de Artes, Ciências e Humanidades da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências do Programa de Pós-Graduação em Modelagem de Sistemas Complexos.

Área de Concentração:

Sistemas Complexos

Aprovado em: 24/10/2017

Banca Examinadora

Prof. Dr. Tiago Mauricio Franco

Universidade de São Paulo. Escola de Artes, Ciências e Humanidades

Prof. Dr. Grzegorz Kowal

Universidade Cruzeiro do Sul. Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Prof. Dr. Paulo Antonio de Almeida Sinisgalli

Universidade de São Paulo. Escola de Artes Ciências e Humanidades

Dedico este trabalho a todas comunidades rurais que sofrem com a pulverização de agrotóxicos.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Prof. Dr. Diego Antonio Falceta Gonçalves, pela paciência, atenção e compreensão durante todo este trajeto. A Professora Dra. Patrícia Targon Campana, por me ajudar a ingressar no Programa de Pós-graduação, acreditar em minha competência e me indicar, como orientando, ao Prof. Dr. Diego Antonio Falceta Gonçalves. Agradeço à gestão da E. E. Arnaldo Barreto, principalmente ao Diretor Jairo Santos e a Coordenadora Pedagógica Cláudia Rosana de Gouveia Ferreira Nardi, por proporcionarem flexibilidade aos meus horários de lecionar aulas para que fosse possível realizar as disciplinas do Programa de Mestrado e as reuniões com meu orientador. Aos meus familiares, pelo incentivo constante, principalmente pelo auxílio apresentado pelo meu irmão Marcelo de Melo dos Santos e a minha esposa, pela compreensão e incentivo adquiridos ao longo do processo. A todos os meus amigos que me incentivaram, especialmente à minha amiga, colega de faculdade e irmã, Amanda Carolina Hora da Silva. Também destaco meu grande amigo Diego Monteiro do Nascimento, pelos conselhos e auxílio no suporte técnico do sistema Linux. À CAPES, por dar apoio e oportunidade aos professores da rede de educação básica a aperfeiçoarem-se em Programas de Pós-graduação em Universidades Públicas.

*“Big whirls have little whirls that feed on their velocity, and little whirls have lesser
whirls and so on to viscosity.”*
(RICHARDSON, 1922, p. 66)

RESUMO

SANTOS, Eduardo de Melo dos. **Difusão Turbulenta Atmosférica**: uma aplicação a sistemas agrícolas. 2017. 90 f. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Escola de Artes, Ciências e Humanidades, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2017. Versão corrigida.

No presente trabalho estudamos a difusão de compostos dispersos atmosféricamente como, por exemplo, fertilizantes e pesticidas particulares, em ambientes agrícolas de larga escala. Tal estudo foca-se na aplicabilidade de modelos numéricos e teórico-fenomenológicos de fenômenos turbulentos em estimativas de vantagens econômica e ambiental desses sistemas. A atmosfera terrestre, em escalas de tamanho e velocidade típicas do objeto de estudo deste trabalho, é um sistema turbulento. A turbulência é um fenômeno complexo, que envolve a interação dinâmica de distintas escalas resultando em um efeito coletivo de larga escala, decorrente de uma interação não linear entre modos perturbativos em um fluido. A modelagem da turbulência, portanto, é em geral possível através de Simulação Numérica Direta - DNS (*Direct Numeric Simulation*). Uma das consequências típicas da turbulência é a difusão, ou seja, o aumento – em sistemas abertos – da separação entre corpos particulados, em taxas muito superiores àquelas da difusão molecular térmica padrão. Neste trabalho, apresentamos um estudo focado na quantificação da difusão turbulenta de partículas através de simulações numéricas de turbulência, com o objetivo de identificar impactos de fertilização e dispersão de poluentes atmosféricos com implicações na saúde e ambiente.

Palavras-chave: Turbulência. Difusão de poluentes. Simulação Numérica.

ABSTRACT

SANTOS, Eduardo de Melo dos. **Turbulent Diffusion Atmospheric**: an application to agricultural systems. 2017. 90 f. Dissertation (Master of Science) – School of Arts, Sciences and Humanities, University of São Paulo, São Paulo, 2017. Corrected version.

In the present study, we study the diffusion dispersed atmospherically compounds, such as fertilizers and particular pesticides in large scale agricultural environments. This study focuses on the applicability of numerical and theoretical and phenomenological models of turbulent phenomena in estimates of economic and environmental advantages of these systems. The Earth's atmosphere, in typical size and speed ranges of the study object of this work is a turbulent system. Turbulence is a complex phenomenon which involves the dynamic interaction of different ranges resulting in a large-scale collective effect due to a nonlinear interaction between perturbation modes in a fluid. The modeling of turbulence, so it is generally possible through Direct Numerical Simulation - DNS. A typical consequence of turbulence is the diffusion, i.e., increased separation – in unbound systems – of particulate bodies, much higher than those of the standard thermal molecular diffusion rates. In this work we present a study focused on quantifying the turbulent diffusion of particles through numerical simulations of turbulent media, in order to identify the impact of fertilization and dispersion of air pollutants on human health and environment.

Keywords: Turbulence. Diffusion of pollutants. Numerical Simulations.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema dos compartimentos entre a teoria econômica, teoria ecológica e teoria ambiental	21
Figura 2 – Uso de agrotóxicos: custos; externalidades; custo privado e benefício. (Fonte: SOARES; PORTO, 2007)	22
Figura 3 – Representação do direcionamento das externalidades advindas da produção agrícola no meio ambiente e nas comunidades próximas.....	23
Figura 4 – Representação gráfica da análise da poluição ótima. (Fonte: Modificado de LOSSO; ALMEIDA, 2015).....	24
Figura 5 – Consumo de agrotóxicos e afins, no período de 2000 a 2014. Consolidação de dados fornecidos pelas empresas registrantes de produtos técnicos, agrotóxicos e afins, conforme art. 41 do Decreto nº 4.074/2002 (Fonte: IBAMA, 2016)	28
Figura 6 – Dinâmica do processo de pulverização foliar (Fonte: CHAIM, 2004)	31
Figura 7 – Exemplo ilustrativo de variações de largura da faixa de vegetação em buffer zones (Fonte: AHOLA, 1989)	32
Figura 8 – Dispersão de poluentes em uma Chaminé	34
Figura 9 – Mecanismos turbulentos na baixa atmosfera de dispersão atmosférica da pluma Gaussiana do modelo AERMOD.....	35
Figura 10 – Pulverização terrestre manual (Fonte: CHAVES; FACHIN, 2015)	36
Figura 11 – Deriva presente na aplicação terrestre de agrotóxicos, por meio de trator agrícola (Fonte: Rjbowin via Flickr apud SEAGATEWORD, 2015).....	37
Figura 12 – Deriva presente na aplicação aérea de agrotóxicos, por meio de aeronave específica (Fonte: MANN, 2013)	37
Figura 13 – Coeficiente de arrasto de uma esfera regular (Fonte: AGUIAR; RUBINI, 2004)	41
Figura 14 – Campo vetorial do escoamento e dinâmica vetorial das partículas	41
Figura 15 – A turbulência pode ser descrita pelas flutuações da velocidade do vento	43
Figura 16 – Estrutura fractal construída iterativamente retratando a característica de auto-similaridade (Fonte: ASSIS, 2008).....	44
Figura 17 – Representação do modelo de sistema referencial Lagrangeano. Ilustração elaborada com base em Zanette (1990) apud Lisboa (2007).....	51
Figura 18 – Representação do modelo de sistema referencial Eulereano. Ilustração elaborada com base em Zanette (1990) apud Lisboa (2007)	51
Figura 19 – Fluxo das partículas em sistema semipermeável segundo a Lei de Fick	56

Figura 20 – Gráficos de densidade e campo de velocidade com resolução de 128 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos	61
Figura 21 – Gráficos de densidade e campo de velocidade com resolução de 256 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos	61
Figura 22 – Gráficos de densidade e campo de velocidade com resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos	62
Figura 23 – Gráficos de densidade e campo de velocidade com resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 1 tempos dinâmicos	63
Figura 24 – Gráficos de densidade e campo de velocidade, modelo subsônico com resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 0,1 tempos dinâmicos	63
Figura 25 – Gráficos de densidade e campo de velocidade com resolução de 2048 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos	64
Figura 26 – Gráficos de densidade e campo de velocidade com resolução de 2048 células em cada dimensão; evolução total de 5 tempos dinâmicos e turbulência excitada em baixas e pequenas escalas	65
Figura 27 – Gráfico do espectro de potência e velocidade em modelo transônico com resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 0,1; 0,5; 1,5, 2; 3,5 e 5 tempos dinâmicos	66
Figura 28 – Gráfico do espectro de potência e velocidade em modelo subsônico com resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 0,1; 0,5; 1,5, 2; 3,5 e 5 tempos dinâmicos	66
Figura 29 – Gráfico do espectro de potência e velocidade com resolução de 2048 células em cada dimensão e evolução total de 0,1; 0,5; 1,5; 2,0; 3,5 e 5 tempos dinâmicos ...	67
Figura 30 – Gráfico do espectro de potência e velocidade com resolução de 2048 células em cada dimensão e turbulência excitadas em baixas e pequenas escalas.....	67
Figura 31 – Gráfico de dispersão 1.....	70
Figura 32 – Gráfico de dispersão 2.....	71
Figura 33 – Gráfico de dispersão 3.....	72
Figura 34 – Gráfico de dispersão 4.....	73
Figura 35 – Gráfico de dispersão 5.....	74
Figura 36 – Gráfico de dispersão 6.....	75
Figura 37 – Gráfico de dispersão 7.....	76
Figura 38 – Gráfico de dispersão 8.....	77

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação das pulverizações de acordo com o tamanho das gotas (Modificado de CHAIM; VALARINI, 2004)	27
Tabela 2 – Classificação toxicológica dos agrotóxicos e descrição em função do DL ₅₀ (Modificado de EMBRAPA, 2003)	29
Tabela 3 – Classificação relacionada à periculosidade dos agrotóxicos ao meio ambiente e exemplos de composição química (Modificado de PERES, 2007)	29
Tabela 4 – Relação entre as características físicas presentes no processo de pulverização de agrotóxicos e da atmosfera, que continuam para o aumento ou diminuição da deriva de agrotóxicos	38
Tabela 5 – Divisão entre as classes de volumes em pulverizações aéreas Densidade teórica de gotas quando se pulveriza um litro por hectare	39
Tabela 6 – Densidade teórica de gotas quando se pulveriza um litro por hectare (Fonte: CHAIM; VALARINI, 2004)	40

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Características químicas e cultura de aplicação do ácido 2,4-diclorofenoxiacético	30
Quadro 2 – Descrição dos termos das equações de Navier-Stokes em representação analítica.....	49

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AERMOD	American Meteorology Society, Environmental Protection Agency, Regulatory Model
ANVISA	Agência Nacional de Vigilância Sanitária
CFD	Computational Fluid Dynamic
DL	Dosagem Letal
DDT	Dicloro Difenil Tricloroetano
DNS	Direct Numerical Simulation
EMBRAPA	Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
EPA	United States Environmental Protection Agency, U.S.
FAO	Food and Agriculture Organization
INCA	Instituto Nacional de Câncer
IBAMA	Instituto Brasileiro de Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis
LES	Large-Eddy Simulation
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes equations

LISTA DE SÍMBOLOS

D	Demanda de uso de agrotóxicos
Q	Quantidade de demanda permitida
C_S	Custo social
O	Oferta
C_P	Custo da poluição
Q_O	Quantidade ótima
Q_M	Quantidade de mercado
O_s	Ótima social
E	Equilíbrio
DL_{50}	Dose letal mediana
h	Altura
Δh	Ascensão de pluma
H_{ef}	Altura efetiva
u	Velocidade
$2,4 - D$	Ácido 2,4-diclorofenoxiacético
F_A	Força de arrasto
C_A	Coefficiente de arrasto
ρ	Densidade do meio
V_p	Velocidade da partícula no escoamento
A	Área de contato da partícula
Re	Número de Reynolds
$\overrightarrow{F_A}$	Força de arrasto em campo vetorial
m	Massa
$\vec{g}$	Aceleração gravitacional
U	Escala de velocidade
r_c	Raio crítico
ρ_a	Densidade do ar
ρ_g	Densidade da gotícula
F_g	Força de resistência da gotícula

η	Coeficiente de viscosidade dinâmica
ν	Coeficiente de viscosidade cinemática
τ	Tensão de cisalhamento
$\vec{q}$	Fluxo do soluto
D	Coeficiente de difusão
∇	Gradiente
c	Concentração de massa
N	Número de partículas
V	Volume do sistema
q_{ad}	Fluxo de advecção
∇^2	Laplaciano
L	Escala de distância
t	Tempo
$-$	Termo médio
$'$	Flutuações
D_t	Coeficiente de difusão turbulento
$\sim$	Variável em espaço de Fourier
T	Taxa de transferência de energia do sistema
d	Escala de comprimento
t_α	Escala de tempo
t_ν	Tempo de difusão viscosa
p	Pressão
F	Campo de força de volume
λ	Comprimento em escala de Kolmogorov
ε	Taxa de dissipação viscosa
ϑ	Velocidade em escala de Kolmogorov
Re_K	Número de Reynolds em escala de Kolmogorov
w	Vorticidade em escala de Kolmogorov
e	Energia em escala de Kolmogorov
τ_t	Tensão turbulenta
ν_t	Transporte de viscosidade cinemática turbulenta
τ_{ij}	Tensor de Reynolds

c_μ	Constante de viscosidade
k	Escala de Kolmogorov
E	Energia cinética total
ω	Vorticidade
t_K	Tempo em escala de Kolmogorov
M	Número de Mach
$\rho_{m\acute{a}x}$	Densidade máxima
$\rho_{m\acute{i}n}$	Densidade mínima
ρ_{cont}	Densidade de contraste

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	19
1.1	VISÃO GERAL ECOLÓGICA.....	21
1.1.1	Ações e gestões.....	23
1.2	AGROTÓXICOS.....	25
1.3	GEOESPACIAL: COMUNIDADES E PLANTAÇÕES.....	30
1.4	PLUMAS.....	33
2	DESCRIÇÃO FÍSICA DO PROBLEMA.....	36
2.1	PROPRIEDADES FÍSICAS DO PROBLEMA.....	37
3	TURBULÊNCIA HIDRODINÂMICA.....	43
3.1	TEORIA DA TURBULÊNCIA E ABORDAGEM EM SISTEMAS COMPLEXOS.....	43
3.2	CARACTERÍSTICAS DE FENÔMENOS TURBULENTOS.....	46
3.2.1	Fluidodinâmica.....	46
3.2.2	Escoamentos turbulentos.....	47
3.2.3	A equação de Navier Stokes	48
3.3	MODELOS MATEMÁTICOS E DESCRIÇÕES ESTATÍSTICAS DA TURBULÊNCIA.....	50
3.3.1	A Transferência de energia turbulenta.....	53
3.3.2	As escalas turbulentas.....	54
3.3.3	A teoria de Kolmogorov.....	55
3.4	COEFICIENTE DE DIFUSÃO.....	55
3.4.1	Difusão molecular.....	56
3.4.2	Difusão turbulenta.....	57
3.5	MODELAGEM NUMÉRICA DA TURBULÊNCIA.....	58
3.5.1	Descrição do código e modelos.....	59
4	RESULTADOS.....	60
4.1	DISTRIBUIÇÃO DE DENSIDADE E VELOCIDADE.....	60
4.1.1	A importância da resolução numérica.....	61
4.1.2	Os casos de interesse: fluidos incompressíveis subsônicos.....	64
4.2	ESPECTRO DE POTÊNCIA E VELOCIDADE.....	65
4.3	SIMULAÇÕES E AS PLUMAS DE CONTAMINANTES.....	68

4.3.1	Modelos numéricos de plumas de poluentes.....	68
5	DISCUSSÃO.....	78
5.1	COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS NUMÉRICOS.....	78
5.2	COMPARAÇÃO ENTRE ESTUDOS.....	81
6	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS.....	84
	REFERÊNCIAS.....	85

1 INTRODUÇÃO

Os estudos de fenômenos turbulentos apresentam diferentes contribuições atreladas às interpretações de cientistas matemáticos, físicos e físicos estatísticos. Nesse contexto, Leonardo da Vinci (1452-1519) é considerado precursor do estudo de fenômenos turbulentos, em seus estudos de hidrodinâmica. Posteriormente, entre os cientistas com maior destaque, temos as contribuições de: Osborne Reynolds (1842-1921); Ludwig Prandtl (1875-1953); Geoffrey Taylor (1886-1975); Lewis Richardson (1881-1953); Alexander Kolmogorov (1903-1987), relacionados a movimentos de interpretação denominados como estatística, estrutural e determinística (McDONOUGH, 2007).

Os fenômenos turbulentos que serão estudados no presente trabalho apresentam alta complexidade em nível físico, matemático e estatístico. Entretanto, escoamentos de fluidos que apresentam característica turbulenta são fenômenos comuns e frequentes na natureza, também presentes em processos industriais. Por esse motivo a pesquisa sobre escoamentos turbulentos é de extrema importância tanto no desenvolvimento da pesquisa básica, como de aplicações econômicas e técnicas. Para a compreensão do tema central é indicado, primeiramente, um embasamento teórico direcionado dos conteúdos de mecânica dos fluidos e fluidodinâmica, que serão apresentados aqui de modo breve, por não serem o tema principal da dissertação, mas base para a compreensão das descrições de características físicas turbulentas. Também é estabelecida uma pequena abordagem descritiva de sistemas complexos, devido ao grau de contextualização teórico e análises aplicadas a modelos dinâmicos, ótica principal e fundamental no processo de descrição e análise de características turbulentas, presente nos processos de difusão de partículas (poluentes e/ou agrotóxicos). Tais resultados são apresentados com o intuito de dar suporte em processos de gestão com cunho ambiental, voltados aos processos de difusão de partículas, dando aos leitores parâmetros fenológicos que auxiliem em apontamentos em programas de gestão com soluções coerentes/efetivas em tomadas de decisões em programas/projetos de conservação ambiental e saúde.

O tema central do presente trabalho é sobre a potencialização da dispersão de poluentes por meio de fenômenos turbulentos. Aqui fazemos a contextualização da promoção do transporte de partículas e a descrição do fenômeno de turbulência atreladas à modelagem matemática e simulações computacionais. Entre nossas referências de embasamento para a proposta de analisar escoamentos turbulentos presentes na atmosfera, temos como motivação e base para o desenvolvimento da dissertação os estudos publicados por Mohammad Jadidi *et al* (2016), em que são tratados simulações de grande escala - LES (*Large-Eddy Simulation*) -

aplicados no intuito de prever a dispersão de poluentes na atmosfera, avaliados por meio de modelos matemáticos de camada limite e como auxílio as equações médias de Reynolds - RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes equations*) - com análise conjunta com LES para a descrição do fenômeno turbulento e difusão de poluentes.

A metodologia principal do presente trabalho é dada a partir de modelos matemáticos e simulações computacionais de fenômenos turbulentos, demonstrando as suas conexões e relevância em pesquisas na área de sistemas complexos, e principalmente sua representação de abordagem práticas da dinâmica de escoamentos turbulentos em meio natural.

A justificativa de estudar modelos matemáticos aplicados a regimes turbulentos está pautada em trazer uma melhor compreensão de processos difusão de partículas (poluentes e/ou agrotóxicos), propondo estabelecer análises que contribuam para melhores tomadas de decisão em programas de gestão ambiental e políticas de sustentabilidade.

1.1 VISÃO GERAL ECOLÓGICA

A economia ecológica é interpretada como um subconjunto da teoria econômica, direcionada a realizar esforços colaborativos em diferentes áreas, promovendo análise e estudos integrados com o propósito de desenvolver um gerenciamento ecológico e econômico. Com isso, a teoria desenvolvida pela economia ecológica relaciona custos de extração, produção e resíduos agregados aos recursos, e estabelecimento de leis de modo que a dinâmica economia seja observada à luz do equilíbrio ecossistêmico. Com isso, estabelecem-se modelos (leis e teorias) para sanar impactos, ou até mesmo incentivar práticas que promovam a sustentabilidade, apontando soluções às externalidades negativas, ou nocivas. Por exemplo, a poluição, é uma externalidade muito estudada através de modelos, que têm o intuito de identificar as suas causas e efeitos, e formular leis vinculadas a procedimentos científicos que fomentem políticas econômicas públicas e privadas para minimizar seus impactos, trazendo melhorias sociais (FUNKS, 2012; PEREIRA, 2013). “A externalidade é um importante conceito econômico utilizado para entendermos como a economia e a formação de preços frequentemente deixam de incorporar os impactos sociais, ambientais e sanitários consequentes das atividades produtivas que geram produtos e serviços” (SOARES, 2007, p. 132). As externalidades são falhas de mercado, que estão ligadas as decisões de produção ou consumo, gerando impactos através da ação do agente causador no bem-estar de outros, como por exemplo, a saúde pública e meio ambiente, onde as causas de externalidades estão ligadas a ineficiência de mercado. Para o conceito de externalidade negativa, devemos entender quanto a empresa “custa” para a comunidade e meio ambiente (figura 2).

Figura 1 – Esquema dos compartimentos entre a teoria econômica, teoria ecológica e teoria ambiental.

Regiões agrícolas com baixa produtividade devido as características do solo, tendem a intensificar o uso de fertilizantes e agrotóxicos. Tal uso acentuado de agrotóxicos é caso

corrente de externalidade negativa, onde temos os produtores como fontes e os receptores dessas externalidades e, pela difusão de poluentes no meio ambiente, as comunidades que se encontram no entorno da área de produção. Nesta descrição, os custos e prejuízos acabam sendo socializados (SOARES, 2007). Neste trabalho estudamos alguns fenômenos contribuintes para a intensificação de contaminação do meio ambiente, atrelados ao uso de agrotóxicos, as externalidades promovidas no processo de produção de alimentos no setor agrícola, e a redução do impacto destes à saúde das comunidades próximas aos produtores. Tomamos como exemplo da problemática econômica ambiental, relacionada ao uso intensivo de agrotóxicos, o trecho a seguir:

O uso massivo de agrotóxicos promovido pela expansão do agronegócio está contaminando os alimentos, as águas e o ar! Estudos recentes encontraram resíduos de agrotóxicos em amostras de água da chuva em escolas públicas no Mato Grosso! O sangue e a urina dos moradores de regiões que sofrem com a pulverização aérea de agrotóxicos estão envenenados! (LONDRES, 2011, p. 23).

Figura 2 – Uso de agrotóxicos: custos; externalidades; custo privado e benefício. (Fonte: SOARES; PORTO, 2007).

Outros estudos sobre o tema de externalidades negativas atreladas ao uso de agrotóxicos, apontam principalmente os danos ambientais e à saúde humana relacionada aos trabalhadores e consumidores, como apresentados em Müller (1999), Soares (2007) e Soares (2010).

1.1.1 Ações e gestões

Como citado no contexto de externalidades, o setor privado (produtores) delega parte dos custos associados para a esfera social. A partir deste pressuposto, as discussões direcionadas a ações e gestões públicas devem ser pautadas em pesquisas de áreas distintas do conhecimento, com interações multidisciplinares, assim como é abordado na teoria da economia ecológica, dando suporte para aplicação de mecanismos reguladores e reorganizadores visando a diminuição dos impactos ambientais, presentes no processo de produção agrícola (MÜLLER 1999; SOARES, 2007; PERREIRA 2013).

Figura 3 – Representação do direcionamento das externalidades advindas da produção agrícola no meio ambiente e nas comunidades próximas.

Nos modelos econômicos inspirados pela Termodinâmica, como por exemplo o modelo criado por Boulding, têm a concepção de abordar a Terra como um sistema fechado, e as externalidade negativas estariam atreladas ao grau de desordem do sistema (FUNKS, 2012). Com isso, suas propostas para minimizar tais efeitos se baseiam em manter a base de recursos, diminuição de consumo e produção, preservando um dado nível de recurso natural, denominado como “estoque”. Outro fator mencionado por Boulding para diminuir o grau de desordem, seria a elevação do tempo de durabilidade dos bens e investimento em pesquisa atreladas ao contexto de economia ecológica, que consequentemente seriam direcionadas à economia ambiental, pois tais propostas tentem a diminuir os resíduos, principal agente de externalidades negativas.

As ações regidas pelo Poder Público devem seguir o *Princípio do Poluidor Pagador*: os

produtores devem assumir os custos das medidas necessárias garantindo que o meio ambiente apresente contração tolerável de poluentes e os custos sociais gerados pelos produtores devem ser ressarcidos em tributos pagos, como o caso de impostos corretivos, conforme as determinações do Poder Público, com isso tais ações governamentais, tendem a impulsionar pesquisas para a promoção de inovações tecnológicas, visando a redução de externalidades negativas sem limitar o desenvolvimento de produtos (WAIBEL, 1998).

Ações e gestões a serem direcionadas principalmente em regiões de amplos pólos de desenvolvimento em agricultura, ou em expansão de atividades agrícolas, podem ter decisões analisadas a partir de simulações matemáticas. Por meio dos modelos matemáticos, como proposto na seção subsequente do presente trabalho, pode-se auxiliar na tomada de decisão a respeito dos métodos para utilização dos agrotóxicos e impostos de correção, direcionados ao benefício da comunidade, não desmotivando a produção agrícola e buscando um aceitável nível de poluição dentro do processo de produção, denominado por alguns economistas como como poluição ótima (HARRIS, 2014). Tal equilíbrio entre o custo social e o custo privado podem ser observado no gráfico (figura 4) abaixo.

Figura 4 – Representação gráfica da análise da poluição ótima: Linha cinza escura (D) representa a demanda de uso de agrotóxicos; linha vermelha (C_s) representa o custo social; linha roxa (O) representa a oferta (custo privado); distância C_p entre as linhas C_s e O está relacionado ao custo da poluição; pontos Q_o , Q_M , O_s e E , representam: quantidade ótima, quantidade de mercado, ótimo social e equilíbrio respectivamente (Fonte: Modificado de LOSSO; ALMEIDA, 2015).

Outro ponto relacionado à teoria das externalidades está pautado na questão do direito, como apresentado no teorema de Coase e direitos de propriedade (SORES; SILVA; TORREZAN, 2015). Ou seja, em nosso caso de estudo, os produtores teriam direito de utilizar agrotóxicos, mesmo com o conhecimento que o seu uso causa poluição e qual seriam os direitos a respeito de sua proteção aos efeitos dos agrotóxicos? Nesse contexto, as ações seriam realizadas por meio de soluções privadas e negociação não custosa (HARRIS, 2014).

1.2 AGROTÓXICOS

A produção agrícola aliada ao uso de agrotóxicos potencializa eficazmente a manipulação da dinâmica natural (biológica) da região de cultivo, alterando as populações, comunidade e nichos dos seres vivos. O consumo de agrotóxicos se dá para o controle dos seres vivos que trazem algum tipo de perda à safra ou ao combate de qualquer doença que diminua a quantidade e qualidade da colheita, como por exemplo a manifestação de fungos. Como citado no trecho a seguir:

Os campos cultivados, entretanto, tornaram-se fontes de alimento para as mais variadas espécies de insetos e roedores e também foram atacados por fungos e bactérias. Essas espécies se multiplicaram rapidamente por causa da grande quantidade de alimento e passaram a interferir no bem-estar das pessoas, sendo, por isso, consideradas pragas (BRAIBANTE; ZAPPE, 2012, p.10).

Nos é apresentada a justificativa para a produção agrícola atrelada ao uso de agrotóxicos como para suprir a escassez de alimentos, bem como a diminuição de preço de alimentos para o consumidor. Entretanto, não se apresenta onde os custos dessa prática são socializados, como discutido anteriormente.

A prática de cultivo associado ao uso de agrotóxicos intensificou-se após as grandes guerras do século XX, por intermédio do desenvolvimento de técnicas pelas indústrias produtoras de armas químicas, que estabeleceram uma nova proposta para os seus produtos, sendo direcionadas ao extermínio de pragas. Tendo o seu apoio e disseminação através de políticas e mecanismos de mercado, dando início a chamada “Revolução Verde”, programa que ganhou forte repercussão devido à escassez de no período pós-guerra (Londres, 2011).

Desde a década de 50, quando se iniciou a chamada ‘revolução verde’, foram observadas profundas mudanças no processo tradicional de trabalho agrícola, bem como em seus impactos sobre o ambiente e a saúde humana. Novas tecnologias, muitas delas baseadas no uso extensivo de agentes químicos, foram disponibilizadas para o controle de doenças, aumento da produtividade e proteção contra insetos e

outras pragas (PERES, 2003, p. 30).

Os agrotóxicos possuem ampla variedade química em sua composição, porém, podemos classificá-los de acordo as características da natureza do ser vivo que se deseja combater ou controlar, sendo assim os agrotóxicos são denominados como inseticidas, fungicidas, herbicidas, desfoliantes e formigantes, indicados respectivamente para o controle de insetos, combate aos fungos, combate às plantas invasoras, combate às folhas indesejadas e combate às bactérias do solo (PERES, 2003). Como apresentado anteriormente na introdução do presente trabalho, a problemática do uso dos agrotóxicos está direcionada aos danos à saúde humana e meio ambiente. Pesquisa de interação agroecológica tendem a apresentar alternativas à produção agrícola, com o intuito de minimizar os danos direto ou indiretos ocasionados pela utilização das mais variadas substâncias presentes nos agrotóxicos, ou seja, tais pesquisas tendem a prover o equilíbrio sustentável, sendo de interesse aos produtores, trabalhadores e comunidade.

Segundo Braibante e Zappe (2012), a produção excessiva em setores agrícolas está vinculada à impactos ambientais que desencadeiam uma série de transtornos e modificações no meio ambiente, entre elas temos grande parte dos impactos ambientais relacionados ao uso intensivo de agrotóxicos, destinado a produção de larga escala, principalmente em regiões onde as características do solo não são favoráveis ao plantio, como é decorrente em regiões do cerrado brasileiro (SOARES, 2007). Outro exemplo de impacto ambiental, vinculado ao uso de agrotóxicos, é mencionado segundo Matthews, (1982) apud Chaim e Valarini, (2004, p. 91):

“resíduos de organofosforados foram detectados no leite proveniente de vacas alimentadas próximo à área tratada”.

Estudos físicos da distribuição de pulverização dos agrotóxicos têm indicado desperdícios de produto e irregularidade na região de interesse de aplicação (área alvo), tal distribuição das gotículas de agrotóxicos são analisadas, por experimentos com reações químicas que demonstram a distância média entre as gotículas ou por meio de modelagem matemática da distribuição e devida dos fertilizantes e pesticidas. Análises relevantes para serem tomadas em pautas de discussões sobre os casos de intoxicação por exposição adquirida à longo prazo do uso de defensivos agrícolas, ou seja, a manifestação de doenças crônicas em comunidades próximas de áreas agrícolas.

Tabela 1 – Classificação das pulverizações de acordo com o tamanho das gotas.

Diâmetro mediano volumétrico (μm)	Classificação da pulverização
< 50	Aerossol
$51 \leq 100$	Neblina
$101 \leq 200$	Pulverização fina
$201 \leq 400$	Pulverização média
> 400	Pulverização grossa
> 500	Garoa

Fonte: Modificado de Chaim e Valarini (2004).

A entrada de novas tecnologias no setor agrícola tende a acarretar divergentes estados de externalidades, podendo ocorrer de modo positivo ou negativo para a região ao seu entorno (meio ambiente e comunidades) ou aos consumidores, tendo em vista que uma certa quantidade de agrotóxicos depositado no alimento chega à mesa dos consumidores (ANVISA, 2006). De acordo com a difusão de novas tecnologias agrícolas no período da Revolução Verde, temos:

No cenário mundial, a FAO (órgão das Nações Unidas para a Alimentação e Agricultura) e o Banco Mundial foram os maiores promotores da difusão do pacote tecnológico da Revolução Verde. No Brasil, uma série de políticas levada a cabo por diferentes governos cumpriu o papel de forçar a implementação da chamada “modernização da agricultura”, processo que resultou em altos custos sociais, ambientais e de saúde pública (LONDRES, 2011, p. 17).

Temos uma acentuação do uso de agrotóxico relacionado a utilização de produção de produtos transgênicos. Segundo o INCA (2015) – Instituto Nacional de Câncer José Alencar Gomes da Silva, órgão do Ministério da Saúde – “a liberação do uso de sementes transgênicas no Brasil foi uma das responsáveis por colocar o país no primeiro lugar do ranking de consumo de agrotóxicos, uma vez que o cultivo dessas sementes geneticamente modificadas exigem o uso de grandes quantidades destes produtos”. Essa progressão do uso de agrotóxico em território brasileiro, pode ser verificada no gráfico (figura 5) a seguir:

Figura 5 – Consumo de agrotóxicos e afins, no período de 2000 a 2014. Consolidação de dados fornecidos pelas empresas registrantes de produtos técnicos, agrotóxicos e afins, conforme art. 41 do Decreto nº 4.074/2002 (Fonte: IBAMA, 2016).

O aumento do uso dos agrotóxicos é motivo direto de externalidades negativas, como mencionado na seção anterior e citado por Soares e Porto (2007). Assim, os efeitos indesejados produzidos pelos pólos agrícolas devem ser regulados por órgãos governamentais, como é caso de ações que usam o conceito de “Poluidor pagador”, onde é estabelecido um imposto corretivo, vinculado ao aumento do uso de agrotóxicos. Tal correção pode ponderar a quantidade de externalidade permitida, no caso descrito por nosso problema, e a compreensão científica dos diversos fatores que propiciam as externalidade negativas em comunidades próximas a regiões fontes de poluição, concederiam um estabelecimento correto entre o imposto corretivo, variável de demanda e utilização dos agrotóxicos. Segundo Londres (2011), no período de 2009, o Brasil consumiu cerca de 5,2 kg de agrotóxicos por habitante, grandeza que se intensificou ao longo dos anos (ver figura 5).

Temos como iniciativa dos fabricantes, a descrição das propriedades físico-químicas dos produtos, e como é dada sua interação com os organismos que devem ser preservados no meio (não-alvos) para a avaliação dos possíveis efeitos ambientais, as empresas interessadas. Com esses dados cedidos pelo fabricante, é possível caracterizar os efeitos dos produtos com relação a saúde humana, resultados apresentados por classe toxicológica, grau de toxicidade para o meio ambiente e a dosagem letal (DL), estabelecida por meio de testes em laboratório, que podem ser conferidos na tabela (2), a seguir:

Tabela 2 – Classificação toxicológica dos agrotóxicos e descrição em função do DL_{50} (dose letal mediana – relação entre miligramas do produto tóxico por quilo de peso vivo, necessários para exterminação de 50% dos animais tentados em laboratório).

Classe toxicológica (Faixa indicativa de cor)	Grau de toxidade	Descrição ($mg\ kg^{-1}$)
I (Vermelho vivo)	Extremamente	$DL_{50} < 50$
II (Amarelo intenso)	Muito	$DL_{50} - 50\ a\ 500$
III (Azul intenso)	Moderadamente	$DL_{50} - 500\ a\ 5000$
IV (Verde intenso)	Pouco	$DL_{50} > 5000$

Fonte: Modificado de EMBRAPA, (2003).

Com relação aos impactos ao meio ambiente, relacionados ao uso intensivo de agrotóxicos, podemos classifica-los de acordo com seu grau de periculosidade ambiental, como pode ser observado na tabela (3) a seguir:

Tabela 3 – Classificação relacionada à periculosidade dos agrotóxicos ao meio ambiente e exemplos de composição química.

Classe de periculosidade ao meio ambiente	Grau de periculosidade ao meio ambiente	Composição
I	Altamente perigosos	Organoclorados
II	Muito perigosos	Malation
III	Perigosos	Carbaril e glifosato
IV	Pouco perigosos	Derivados de óleos minerais

*Geralmente – também podem ser encontrados/fabricados com composição química distintas.

Fonte: Modificado de PERES, (2007).

Entre os inúmeros tipos de agrotóxicos, destacamos o herbicida 2,4 – D (ácido 2,4-diclorofenoxiacético), possuindo grau I de classificação toxicológica, o agrotóxico é um dos precursores utilizados em meio agrícola e posteriormente utilizado em uso não agrícola: “uso em capinas químicas em áreas não agrícolas, não florestais e não urbanas, sendo aplicado ao longo de cercas, aceiros, rodovias, ferrovias, faixa sob rede de alta tensão, passagens de oleoduto”, como apresentado no Portal da ANVISA (BRASIL, 2017). As especificações químicas do ácido 2,4-diclorofenoxiacético, podem serem vistas no quadro (1) a seguir:

Quadro 1 – Características químicas e cultura de aplicação do ácido 2,4-diclorofenoxiacético.

Características	Ácido 2,4-diclorofenoxiacético
Fórmula química	$C_8H_6Cl_2O_3$
Fórmula estrutural
Grupo químico	Ácido ariloxialcanóico
Aplicado nas culturas	Aveia; arroz; café; cana-de-açúcar; centeio; cevada; milho; pastagem; soja; sorgo e trigo
Aplicação	Pré e pós-emergência das culturas citadas

Fonte: Dados obtidos e imagem da fórmula estrutural retirada de Brasil (2017).

1.3 GEOGRAFIA ESPACIAL: COMUNIDADES E PLANTAÇÕES

Os feitos à saúde humana por exposição aos agrotóxicos pode ser dar de variadas formas. Mesmo restringido às doenças crônicas, temos uma série de sintomas relacionados, como efeitos neurológicos retardados, doença de Parkinson, cânceres e teratogêneses, entre outras que podem ser conferidas nos estudos de Peres (2007). Outro resultado de interesse está relacionado à persistência de um dado agrotóxico no meio ambiente, sendo os organoclorados DDT e Lindano com maior permanência, como também apresentado por Peres (2007). Segundo Londres (2011), são constatados quadros de doenças crônicas correlacionadas ao uso de agrotóxicos em pacientes que residem próximo a áreas agrícolas, devido à capacidade de a contaminação ser propagada pelo ar. Essas externalidades advindas da “perda” da aplicação do produto, são apresentadas na figura a seguir:

Figura 6: Dinâmica do processo de pulverização foliar (Fonte: CHAIM, 2004).

A “perda” de agrotóxicos no processo de pulverização aérea tende a apresentar uma abrangência superior em relação aos outros processos de aplicação, dependente da altitude em que as gotículas de agrotóxico são lançadas, fatores atmosféricos e a própria turbulência gerada pela aeronave, facilitam a exoderiva. No entanto, os regulamentos vinculados a tal processo são abordados da seguinte forma:

A Lei dos Agrotóxicos não trata da pulverização aérea. A questão é regulamentada no Brasil pela Instrução Normativa No 2/2008, do Ministério da Agricultura, que estabelece algumas restrições à atividade. Entre elas, as mais importantes dizem respeito a distâncias mínimas que as aeronaves devem manter de populações e cursos d’água (LONDRES, 2011, p. 109).

Figura 7 – Exemplo ilustrativo de variações de largura da faixa de vegetação em buffer zones: zona de segurança desenvolvida para a redução de deriva de poluentes, erosão ou sedimentos. A variação da largura da faixa de vegetação direcionada para o amortecimento estão vinculadas as topográficas, hídricas e ecológicas da região de preservação (Fonte: AHOLA, 1989).

A gestão pública brasileira tenta minimizar o contato dos poluentes agrícolas em comunidade próximas às áreas de produção por meio da Instrução Normativa nº 2/2008, do Ministério da Agricultura. Tal gestão está vinculada ao 1º§ do Art. 10 da Instrução Normativa nº 2/2008, apresentado a seguir:

I - não é permitida a aplicação aérea de agrotóxicos em áreas situadas a uma distância mínima de:

- a) quinhentos metros de povoações, cidades, vilas, bairros, de mananciais de captação de água para abastecimento de população;
- b) duzentos e cinquenta metros de mananciais de água, moradias isoladas e agrupamentos de animais.

(Art. 10 da Instrução Normativa nº 2/2008).

As zonas de segurança (*buffer zones*) são medidas adotadas/direcionadas à preservação da biodiversidade e controle por meio de isolamento dos mananciais sujeitos a poluição através da deriva de agrotóxicos, presente no processo de pulverização destes produtos. Tal área é caracterizada por uma faixa vegetal de largura variável que se localiza entre as margens dos mananciais (ou regiões sensíveis a contaminação) e a área de produção agrícola. No contexto de programas de redução de deriva, são apresentadas ações públicas que estabelecem a conservação de mananciais e biodiversidade local, como visto em regiões no sul

da Finlândia, como a bacia do rio Vantaa, alvo de estudo e aplicação do grupo Water Protection Association of the Vantaa River and Helsinki District (AHOLA 1989, SNOO 1999, CUNHA, 2008).

1.4 PLUMAS

O estudo teórico de plumas de dispersão e as aplicações práticas dos modelos matemáticos é comumente abordado em disciplinas de cursos de Engenharia Ambiental, devido a sua potencialidade em auxiliar no diagnóstico da dispersão de poluentes na atmosfera e em meio hídrico (aplicado em sistemas hidráulicos: sanitário). Existem múltiplos possíveis cenários para evolução de plumas de dispersão, a depender das características físicas do material dispersado e do fluido dispersante. Esta variabilidade no tipo de plumas de dispersão é, obviamente, um entrave no estabelecimento de regras únicas para sistemáticas de pulverização, uma vez que os resultados (e impactos) podem ser demasiadamente variáveis. A modelagem direcionada a um problema específico, a depender do tipo de produto, tipo de aplicação e condições de relevo e atmosférica local, pode ser a melhor – e única – maneira de se reduzir as externalidades em grandes áreas de produção agrícola.

Métodos computacionais direcionados para análise de dinâmica de fluidos, conhecidos na literatura como CFD – *Computational Fluid Dynamics* –, são estudados principalmente para a compreensão de como o transportes de poluentes influencia áreas circunvizinhas, ou seja, como as chamadas plumas de contaminantes se dispersam em meio atmosférico ou hídrico, por meio de chaminés industriais, queima de combustível de automóveis, extração de petróleo, descarte de resíduos industriais em meio hídrico, entre outros.

Segundo Jadidi *et al* (2016), estudos que apresentam os métodos de CFD possuem ampla abordagem descritiva, podendo prever interações do campo de fluxo e a dispersão de poluentes em torno de edifícios, por exemplo, ressaltando que essa descrição do transporte de poluentes em áreas urbanas se tornou uma parte essencial nas pesquisas relacionadas a qualidade do ar.

Através da dispersão de poluente por intermédio de uma chaminé industrial, podemos facilmente observar os fenômenos de advecção e difusão, correspondentes à direção do vento médio e aos fenômenos de difusão (figura 8), a seguir:

Figura 8 – Dispersão de poluente em uma chaminé: h altura da chaminé; Δh ascensão da pluma; H_{ef} altura efetiva ($H_{ef} = h + \Delta h$); u velocidade do vento.

Segundo Kawano (2003), as plumas presentes em chaminés industriais podem variar seu aspecto (forma) de acordo com as intervenções do meio. Em condições atmosféricas estáveis, ou seja, com baixa intensidade turbulenta, tendem na maioria das vezes apresentarem dispersões pequenas em plumas menos proeminentes, entretanto quando as plumas estão relacionadas a regimes instáveis, devido aos movimentos irregulares, com rápidas alterações de velocidade e direção do vento característicos da turbulência, tem por consequência plumas com melhor potencial de dispersão. Outro fator atrelado a turbulência descrito por Kawano (2003), estaria relacionado ao processo de elevação da pluma, onde tal processo é dividido em três fases: inicial, intermediária e final.

Na fase inicial, a turbulência desenvolvida pela própria pluma com relação a velocidade de sair da fonte emissora tem maior importância em desenvolver a mistura entre as partículas dispersas com o ar. Na fase intermediária, o processo de ascensão citado na fase anterior e as interações turbulentas da atmosfera e temperatura da pluma auxiliam na elevação. E, na fase final, a mistura da pluma com o ar está relacionada prioritariamente com a turbulência atmosférica e relacionados à temperatura da pluma.

Modelos de pluma gaussianos contêm uma ampla variedade de adaptações de acordo com grau de necessidade e variáveis do sistema que se deseja modelar (LISBOA, 2007). Modelos de pluma gaussiana são utilizados com frequência devido a sua qualidade em descrever estatisticamente propriedades variáveis, com uma abordagem ampla e detalhada em diferentes instantes tempo ao longo das dinâmicas de difusão da pluma em sua trajetória, descrevendo índices de concentração de poluentes em seções transversais e horizontais. Um exemplo de simulação computacional de dispersão de contaminantes com aplicação do modelo

de pluma gaussiana, pode ser verificado no sistema AERMOD (*American Meteorology Society, Environmental Protection Agency, Regulatory Model*) aplicado para estimar a dispersão de gases ou matérias particulados. Segundo Bardon (2010, p. 131) o modelo AERMOD é “recomendado pela Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (*United States Environmental Protection Agency, U.S. EPA*) para fins regulatórios”. As seções transversais com o perfil vertical e horizontal típico de um modelo gaussiano de pluma, pode ser visto na figura (9), a seguir:

Figura 9 – Mecanismos turbulentos na baixa atmosfera de dispersão atmosférica da pluma Gaussiana do modelo AERMOD (Fonte: http://fhengenharia.com/pj_qualiar/pj_qualiar.html).

2 DESCRIÇÃO FÍSICA DO PROBLEMA

A problemática do processo de pulverização de agrotóxicos com redução em seus impactos está atrelada à desenvolver uma aplicação eficaz com a menor quantidade do produto destinado ao alvo, sem que o mesmo não se disperse para as regiões não-alvo, minimizando a contaminação do meio ambiente (CHAIM; VALARINI, 2004).

A deriva proveniente da difusão de agrotóxicos em um sistema onde a velocidade do vento é elevada, ou potencialmente elevada, em escoamentos com característica turbulenta. Também pode decorrer dos diferentes meios de aplicação do produto, podendo serem pulverizados por meio terrestre, através de bombas manuais, como é citado por Cunha (2008), através de veículos terrestres agrícolas, como tratores, ou também por pulverização aérea, com o auxílio aeronaves específicas.

O problema de interesse deste estudo está compreendido em como as partículas (gotículas) de agrotóxicos se comportam dinamicamente no fluido atmosférico, transitando em escoamento laminar (baixa deriva) ou turbulento (alta deriva), dependendo das características físicas dos gases, e fenômenos turbulentos que se manifestam em diversas escalas.

Figura 10 – Pulverização terrestre manual (Fonte: CHAVES; FACHIN, 2015).

Figura 11 – Deriva presente na aplicação terrestre de agrotóxicos, por meio de trator agrícola (Fonte: Rjbowin via Flickr apud SEAGATEWORD, 2015).

Figura 12 – Deriva presente na aplicação aérea de agrotóxicos, por meio de aeronave específica (Fonte: MANN, 2013).

2.1 PROPRIEDADES FÍSICAS

A Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (Embrapa) aponta periculosidade na pulverização aérea, levando em conta as condições ideais de: calibração, temperatura e ventos, 19% do agrotóxico pulverizado são transportados pelo ar para outras áreas circunvizinhas da aplicação, como por exemplo, na cultura do feijão rasteiro, onde a deriva ou evaporação do agrotóxico aplicado com o auxílio de um pulverizador de barras é de cerca de 59% e, em outros casos, a deriva pode ser de 70% (CHAIM et al., 2000; CHAIM; VALARINI, 2004). Por meio

de dados fornecidos por essas referências, estabelecemos variáveis relevantes a respeito das condições de deriva (STULL, 1988; ZHU et al., 1994; SUMNER, 1997; WOLF, 2000; CUNHA, 2008), como podem ser observados na tabela (4) a seguir:

Tabela 4 – Relação entre as características físicas presentes no processo de pulverização de agrotóxicos e da atmosfera, que continuem para o aumento ou diminuição da deriva de agrotóxicos.

Fatores direcionados à deriva de agrotóxicos		
Características das gotículas provenientes da pulverização de agrotóxicos		Características do meio físico
Diâmetro (entre 50 – 500 μm)	Densidade (entre 920 – 1.100 $kg\ m^{-3}$)	Densidade do ar (entre 1,29 $kg\ m^{-3}$)
< 50 (sofrem processo de evaporação)	< 1.100 (maior probabilidade de deriva)	Força gravitacional (entre 9,8 $m\ s^{-2}$)
< 100 (sofrem deriva)	> 1.100 (menor probabilidade de deriva)	Temperatura $\geq 20 \leq 30\ ^\circ C$ (condições ideais)
> 500 (difícilmente há deriva)	–	Velocidade do vento $\geq 3 \leq 10\ km\ h^{-1}$ (menor probabilidade de deriva)

Neste contexto, mencionado por Chaim e Valarini (2004) sobre a quantidade de agrotóxicos que são levados pela corrente de ar, mesmo com condições ideais e calibragem adequada, a deriva de agrotóxicos em pulverização aérea pode alcançar a distância de aproximadamente 32 km , como descreve Pimentel (1995). Outra citação a respeito de distâncias quilométricas presentes na deriva de agrotóxicos é apresentada em Chaim e Valarini (2004):

O aumento da contaminação do meio ambiente devido a deriva de produtos químicos tóxicos tem causado frequentes condenações às pulverizações, principalmente quando os efeitos são visíveis. Para determinados inseticidas, os efeitos não são facilmente detectáveis, mas para determinados herbicidas, como o 2,4 – D, determinadas plantas podem exibir os sintomas de intoxicação a quilômetros de distância, devido à ação do vento (CHAIM; VALARINI, 2004, p. 91).

No processo de pulverização, é estabelecida a relação entre volume do produto aplicado pela área que se deseja cobrir, usualmente esse relação é aplicada a hectare, logo temos a relação dada em unidades de L/ha , ou seja, há uma relação entre o volume do agrotóxico e o quanto se deseja fracioná-lo, para utilização ótima. Se estabelece, portanto, também os tamanhos médios das partículas (gotículas) de agrotóxico, pois quanto menor é volume do produto que se deseja aplicar em uma determinada área, maior será sua subdivisão de partículas, estabelecendo um diâmetro menor dos corpos particulados. De certo, quanto menor o corpo particulado melhor a dispersão e aplicação na área de plantio, mas também uma deriva mais eficiente, como visto anteriormente na tabela (4). No cultivo de algodão, por exemplo, são geradas gotículas com distribuição entre os tamanhos médio e fino (ver tabela 5, a seguir), tanto no processo de pulverização terrestre como no processo de pulverização aéreo, para serem facilmente absorvidos pela planta (BETTINI, et al 2007). Segundo Chaim e Valarini (2004), os produtores geralmente utilizam a mesma quantidade de L/ha para cultivos distintos, pois em uma grande quantidade dos agrotóxicos, não há uma relação precisa entre o uso em L/ha em suas especificações obrigatórias (e.g. ingrediente ativo, grupo químico, culturas autorizadas para aplicação e classificação toxicológica), deixando esse valor a escolha dos agricultores (alguns produtos indicam um valor entre 200 – 1.000 L/ha).

Tabela 5 – Divisão entre as classes de volumes em pulverizações aéreas.

Classe de volume	Volume de aplicação (L/ha)
Ultra-baixo	< 5
Baixo	5 > 30
Médio	30 > 50
Alto	> 50

Entretanto, uma solução física para o problema não estaria apenas relacionada à manipulação do diâmetro e densidade das partículas presentes no processo de pulverização de

agrotóxicos, pois ao engrandecer tais características físicas das partículas se intensifica a contaminação do solo, ou de afluentes, em um processo denominado como endoderiva. Uma discussão sobre alguns dos impactos relacionados à contaminação do solo, dos recursos hídricos, consequências ao ambiente, trabalhadores rurais e comunidades próximas, pode ser encontrada nos estudos de Müller (1999), Soares e Porto (2007) e Soares (2010).

Nas pulverizações com grandes volumes de calda, muitas gotas caem entre as folhagens das plantas, especialmente nos espaços entre as linhas da cultura e entre as plantas, atingindo o solo. Uma grande quantidade de gotas atinge as folhas, coalescendo-se e formando gotas maiores, que não conseguem mais ficar retidas, escorrendo para as partes inferiores das plantas e caindo finalmente no solo (COURSHEE, (1960) apud CHAIM; VALARINI, (2004), p. 91).

Tabela 6 – Densidade teórica de gotas quando se pulveriza um litro por hectare.

Diâmetro das gotas (μm)	Número de gotas por cm^2
10	19.999
20	2.387
50	153
100	19
200	2,4
400	0,298
1.000	0,019

Fonte: Chaim e Valarini (2004).

Um fato importante no presente estudo é a compreensão de como as partículas (gotículas de agrotóxicos) são “arrastadas” no processo de deriva em um determinado escoamento turbulento. A força de arraste é determinada pela equação:

$$F_A = \frac{1}{2} c_A \rho V_p^2 A \quad (1)$$

onde F_A é a força de arrasto (*drag force*), c_A o coeficiente de arrasto (*drag coefficient*) para uma esfera (experimentalmente, o valor de c_A é encontrado no intervalo entre 0.1 e 1.5, dependendo do número de Reynolds (Re) do escoamento, como pode ser observado na figura

13), ρ representa a densidade do meio, V_p é a velocidade relativa entre a partícula e o fluxo de escoamento, e A a área de trabalho do escoamento sobre a partícula. Uma representação esquemática vetorial do problema é mostrada na figura (14) a seguir.

Figura 13 – Coeficiente de arrasto de uma esfera regular (lisa), em função de Re . Linha contínua representa o resultado de medidas realizadas em túneis de vento ($F_A \sim U$). A linha tracejada corresponde à lei de Stokes (AGUIAR; RUBINI, 2004).

Figura 14 – Campo vetorial do escoamento e dinâmica vetorial das partículas. Vetores em cor preta representam o campo vetorial de velocidade do escoamento, vetores de cor amarela indicam a força de arrasto (força atuante conforme a velocidade relativa entre o gás e o poluente, $\vec{F}_A$) e vetores de cor vermelha a força gravitacional ($m\vec{g}$).

Como mostrado na Fig. (14), as partículas pulverizadas em suspensão atmosférica estarão submetidas à duas forças predominantes: a força de arrasto e a força gravitacional (peso). A importância relativa do arrasto, e consequentemente da deriva, está diretamente relacionada à razão entre estas duas forças. Naturalmente, partículas demasiadamente pesadas

($mg \gg F_A$), se deslocarão verticalmente em curto intervalo de tempo, percebendo pequena deriva. Por outro lado, a elevação da magnitude do escoamento resulta em uma melhora do transporte das partículas. Podemos definir o raio crítico, como o tamanho máximo que a partícula pode ter para que ainda seja submetida à deriva ($mg < F_A$), partículas com raio superior ao raio crítico tendem a não serem transportadas eficientemente.

A dinâmica presente no transporte de partículas está, por exemplo, atrelada à formação de dunas, relevo em geleiras ou no transporte de poluentes (FERREIRA, 2002). Segundo Matthews, (1982) apud Chaim e Valarini (2004, p. 93), “a aplicação de agrotóxicos tem sido caracterizada como uma ciência aplicada, de natureza multidisciplinar, envolvendo conhecimentos nas áreas de biologia, engenharia e química”.

3 TURBULÊNCIA HIDRODINÂMICA

3.1 TEORIA DA TURBULÊNCIA E ABORDAGEM EM SISTEMAS COMPLEXOS

As descrições de regimes turbulentos estão vinculadas ao comportamento instável destes fenômenos, quando analisados por métodos físico-estatísticos. Tais fenômenos apresentam flutuações que são dependentes do tempo e da posição no espaço, ou seja, os regimes turbulentos podem apresentar flutuações instantâneas de velocidade, Equação (2), tal qual outras grandezas, como temperatura, pressão, densidade e etc., que são correspondentes ao transporte de momento, energia e massa (SILVEIRA, 2002, SOUZA, 2011):

$$u = \bar{u} + u' \quad (2)$$

onde a média (relacionadas ao tempo) e as flutuações são representada por $\bar{u} = \frac{1}{T} \int_0^T u dt$ e u' respectivamente.

Figura 15 – A turbulência pode ser descrita pelas flutuações da velocidade do vento. A magnitude destas flutuações relativas à velocidade média do vento é referida como intensidade turbulenta (Fonte: <http://www.fs.fed.us/eng/pubs/htmlpubs/htm98342847/proc.htm>).

Dentre as diversas características de fase de turbulência, é destacada a multiplicidade de escala, que nos remete a um dos seus vínculos relacionados aos sistemas complexos. Os vórtices desenvolvidos por ocorrência rotacional de um sistema turbulento, apresentam em suas dimensões composição estrutural fractal; comportamento observado em distintas escalas de comprimento apresentado outra forte característica no contexto de sistemas ditos complexos.

Por definição, entende-se “o movimento turbulento como uma superposição de vórtices de diferentes tamanhos que interagem entre si, trocando energia, momentum e outras propriedades” (SOUZA, 2011, p. 23).

A dinâmica de Sistemas Complexos é concebida, na maioria dos casos, pela interação das unidades que compõem o sistema em questão, ou seja, sistemas ditos complexos apresentam uma gama extensa de unidades (objetos) em sua composição, nas quais as interações configuram fenômenos característicos de ocorrência natural, como foi mencionado anteriormente em regimes turbulentos e quando mencionamos a turbulência como um sistema. Assim, temos, segundo Carli (2011, p. 16): “um sistema pode ser definido como um conjunto de objetos agrupados por alguma interação ou interdependência, de modo que existam relações de causa e efeito nos fenômenos que ocorrem com os elementos desse conjunto”.

Os fenômenos dos sistemas complexos podem ser estruturados de forma fractal, como citados anteriormente em relação aos vórtices presentes em fenômenos turbulentos. A principal característica fractal é a autosemelhança, ou seja, invariância em sua forma em alterações de escala (figura 16), no caso de fractais ideais, sua estrutura é idêntica a original (ASSIS, 2008).

Figura 16 – Estrutura fractal construída iterativamente retratando a característica de auto-semelhança (Fonte: ASSIS, 2008).

A turbulência também pode ser descrita mediante a análise espectral de energia, identificando as características de vórtices, que segundo Stull (1988), vórtices com distintas variedades de tamanhos atuam de modo para contribuir na soma total de sistema turbulento. “Dentro deste espectro, os maiores vórtices drenam energia do escoamento médio e a transferem para outros menores, e estes para outros menores ainda, e assim sucessivamente” (SOUZA, 2011, p. 23).

Como citado anteriormente, os fenômenos caracterizados em sistemas complexos são

livres de escala, se descrevem por leis de potência, onde a autosimilaridade é promovida devido à geometria fractal do sistema, onde as diversas unidades que o compõem estabelecem interações produzindo uma estrutura em nível superior e se evoluem fora da região de equilíbrio. Tais sistemas/fenômenos abrangem modelos não lineares de forma que as correlações entre as unidades do sistema decaem lentamente, sem escala característica de dimensão espacial ou temporal, proporcionando interpretações em soluções numéricas, diferentes dos sistemas de modelos lineares (com escala característica temporal ou espacial) que contêm soluções analíticas de fácil de serem atribuídas/obtidas em modelos lineares em comparação aos não lineares (CARLI, 2011; GLERIA, 2004).

Os sistemas não-lineares autosimilares seguem leis de potências, e podem ser escritos seguinte forma:

$$Y = aX^b \quad (3)$$

onde:

- X e Y são variáveis (quantidades ou observações);
- a é uma constante;
- b é expoente escalar.

Logo, com a transformada da expressão (3) para logarítmica para uma reta é dada por:

$$\log(Y) = \log(c) + b \log(X) . \quad (4)$$

Em descrição de sistemas complexos, a distribuição em leis de potência também resulta nos “eventos raros”, com alta amplitude e menos frequentes. Podemos estabelecer a quantidade aproximada de eventos com determinada amplitude através estudos de modelagem matemáticas, mas não é possível determinar o momento em que tal fenômeno irá emergir, nem qual estímulo/perturbação será o predecessor do fenômeno (GLEIA, 2004), ou seja, eventos catastróficos são imprevisíveis. As grades catástrofes – desvios estatísticos de alta amplitude – são causadas pelos mesmos mecanismos dinâmicos que regem a ocorrência de eventos de tamanho pequeno e intermediário, levando a uma impossibilidade de previsão (CAVALCANTE, 2010).

Outro parâmetro pode ser estabelecido, segundo Silveira (2002), para descrever as maiores estruturas dos vórtices com característica de baixa frequência e as menores estruturas com alta frequência, sendo as estruturas menores controladas pela viscosidade do fluido. Em

fenômenos turbulentos qualquer energia aplicada que resulta na formação de vórtices tende a ser dissipada, seguindo o efeito de cascata.

O transporte de partículas pode ser apresentado em sistemas com amplas magnitudes, um dos exemplos citados em artigos científicos e meios de divulgação é o transporte de sedimentos por ação eólica da região do deserto do Saara localizado no norte da África à Amazônia, regiões afastadas por cerca de 4 mil quilômetros (BENSUSAN, 2008).

3.2 CARACTERÍSTICAS DE FENÔMENOS TURBULENTOS

A descrição de escoamentos turbulentos aborda propriedades que são manifestadas em diversas escalas onde as características presentes em fenômenos turbulentos podem ser analisadas em fluidos, como citado na seção anterior. Para a compreensão de sistema de complexidade turbulenta é necessário o entendimento de tópicos de fluidodinâmica.

3.2.1 Fluidodinâmica

Na maioria dos estudos relacionados ao conteúdo de fluidodinâmica, ou mecânica dos fluidos, são empregadas análises macroscópicas aproximadas dos movimentos dos fluidos. Deste modo, movimentos em escala de nível molecular podem ser negligenciados, de acordo o fenômeno que será analisado, dispensando uma descrição precisa do movimento individual de cada elemento de massa do sistema. De acordo com os estudos que abrangem o nível macroscópico, temos uma interpretação da mecânica dos fluidos como um meio contínuo, sendo descrito com propriedades que variam continuamente ao longo do seu volume, ou seja, a análise macroscópica relacionada ao movimento de um fluido apresenta uma descrição simplificada da interação entre as moléculas do fluido em questão, a depender das propriedades de massa específica, viscosidade, compressibilidade.

No caso do ar e água, fluidos de interesse em estudos de dispersão de poluentes, suas propriedades são descritas com boa aproximação como fluidos *newtonianos*, onde o coeficiente de viscosidade dinâmica η não varia com a taxa de cisalhamento. Por meio, destes parâmetros podemos definir a tensão de cisalhamento τ , dado por:

$$\tau = \eta \frac{du}{dy} . \quad (5)$$

Em outros casos, de acordo com os sistemas das características do escoamento que se deseja modelar, é conveniente a utilização do coeficiente de viscosidade cinemática ν , apresentado a seguir:

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} . \quad (6)$$

3.2.2 Escoamentos turbulentos

A compreensão de escoamentos com característica turbulenta a partir de modelos matemáticos, tende a descrever primeiramente o parâmetro relacionado à transição de um escoamento com regime laminar para o turbulento. No século XIX, Osborne Reynolds realizou um experimento em um sistema de tubos para determinar a natureza dos escoamentos. Foram constatados dois padrões de escoamento: o laminar e o turbulento. O número de Reynolds (Re), representa o parâmetro de controle da transição para a turbulência, estabelecido por meio de três variáveis: velocidade U , escala d e viscosidade cinemática do fluido ν , como dado pela relação a seguir:

$$Re = \frac{Ud}{\nu} . \quad (7)$$

De outra forma, quando estabelecido o coeficiente de viscosidade ν (constante), sendo seu inverso é o número de Reynolds Re :

$$Re = \frac{Ud}{\nu} = \frac{1}{\eta} . \quad (7.1)$$

η representa o coeficiente de viscosidade dinâmica, ou seja, temos em Re uma relação multiplicativa entre U está relacionado a velocidade do escoamento e L implica na escala de comprimento, subdivididos pela corresponde a viscosidade cinemática ν .

onde:

$$\eta = \frac{\nu}{t} , \quad (7.1.1)$$

o coeficiente t está relacionado a unidade de tempo.

Logo, temos que:

$$Re = \frac{\frac{L^2}{\nu}}{\frac{L}{U}} = \frac{L^2}{\nu} \cdot \frac{U}{L} = \frac{UL}{\nu} \quad (7.2)$$

Através do experimento de Reynolds, foi possível estabelecer valores críticos, correspondentes à $Re \sim 2300$, para se sustentar um escoamento laminar em um sistema tubular, como representado no experimento em questão (SILVEIRA, 2002). O Número de Reynolds Re , estabelece uma relação entre a tendência de movimento inercial e tendência dissipativa atrelada à viscosidade, deste modo, o índice Re estabelece o nível de turbulência, escoamentos são denominados turbulentos quando $Re > 4000$ (FREIRE, 2006, MORICONI, 2011).

O número de Reynolds relaciona, de forma simplificada, a taxa temporal de transferência de energia mecânica entre escalas, à taxa de dissipação da energia mecânica em térmica decorrente da viscosidade. $Re < 1$ implica em decaimento da energia mecânica em térmica em tempos demasiadamente curto, comparado ao tempo dinâmico do sistema. Podemos obter Re através da razão entre as escalas de tempo t_α e tempo de difusão viscosa t_ν , representada na equação (7.3), onde as duas escalas estão vinculadas à um comprimento L , ou seja, no primeiro caso o tempo é estimado pelo comprimento L , que uma dada partícula irá percorrer em uma velocidade U , enquanto que no segundo caso L está atrelado a ocorrência temporal da difusão viscosa ν em um dado comprimento específico, com isso temos:

$$Re = \frac{t_\nu}{t_\alpha} . \quad (7.3)$$

“Escoamentos a altos números de Reynolds permitem, portanto que perturbações desenvolvam altos gradientes de velocidade antes que os efeitos difusivos tenham tempo de amortecê-los” (FREIRE, 2006, p. 55).

3.2.3 A equação de Navier Stokes

A equação de Navier-Stokes, equação (8), representa a equação de conservação de momento para um fluido. Uma representação apropriada para fins analíticos e números da equação de Navier-Stokes é dada a seguir:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot [\eta(\nabla u + (\nabla u)^T)] + \rho(u \cdot \nabla)u + \nabla p = F \quad (8)$$

onde η representa a dinâmica de viscosidade, ρ a densidade, u a velocidade do campo, p a pressão e F o campo de força de volume, tais como a gravidade. Esta equação apresenta termo não-linear de convecção dominante em escalas intermediárias, indicado por $\rho(u \cdot \nabla)u$, o segundo termo de interesse da equação é a dissipação viscosa: $-\nabla \cdot [\eta(\nabla u + (\nabla u)^T)]$, dominante em pequenas escalas, os termos de força externa F e, por último, adicionamos o vínculo de incompressibilidade (equação 8.1), aplicável em problemas de compressibilidade nula ou irrelevante para a modelagem, como é o caso da turbulência atmosférica (MORICONI, 2011). Os termos da equação de Navier-Stokes são indicados a seguir em representação analítica, com suas respectivas descrições no quadro 2 (NETEF, 2009).

$$\underbrace{\rho \frac{\partial u}{\partial t}}_I - \underbrace{\nabla \cdot [\eta(\nabla u + (\nabla u)^T)]}_{II} + \underbrace{\rho(u \cdot \nabla)u}_{I \text{ (termo de advecção)}} + \underbrace{\nabla p}_{III} = \underbrace{F}_{IV}$$

Quadro 2 – Descrição dos termos das equações de Navier-Stokes em representação vetorial e analítica.

Indicadores	Termos
I	Termos advecção ou de transporte de <i>momentum</i>
II	Termo de dissipação de energia
III	Gradiente de pressão
IV	Forção externa

Em um escoamento incompressível (densidade uniforme), a equação de conservação da massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \cdot u + \rho \nabla \cdot u = 0 \quad , \quad (8.1)$$

pode ser aproximada, para o caso de densidade uniforme e constante no tempo, como:

$$\nabla \cdot u = 0 \quad . \quad (8.1.1)$$

Caso a viscosidade seja nula, a modelagem resulta em escoamentos invíscidos, onde a ausência deste termo implica na equação de Euler modificada (NETEF, 2009):

$$\underbrace{\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \nabla) u}_I = \underbrace{\nabla \cdot [\eta(\nabla u + (\nabla u)^T)]}_{II} - \underbrace{\nabla p}_{III} . \quad (8.2)$$

3.3 MODELOS MATEMÁTICOS E DESCRIÇÕES ESTATÍSTICAS DA TURBULÊNCIA

Por meio de análise estatística é possível interpretar as flutuações irregulares e aleatórias em termos de velocidades instantâneas em escoamentos turbulentos.

As partículas (poluentes) inseridas em escoamentos turbulentos descrevem trajetórias aleatórias, devido à complexidade presente em fenômenos turbulentos, caóticos, caracterizados por padrões ordem e desordem. Os movimentos das partículas em meio fluido são entendidos, em um primeiro momento, como um transporte de mistura, composto entre o fluido e as partículas de interesse, onde inicialmente temos um volume de mistura concentrado ou centralizado direccionalmente, de modo que a concentração se expande e dissipa nessa direção e em outras direções é comprimida, aumentando a concentração. Isto resulta em efeitos de alta distorção *twisted layers* nesses feixes característicos do processo de difusão, ou seja, há formações no fluido de camadas altamente distorcidas/torcidas com acentuada variação da concentração da mistura.

Lembrando que o volume total da mistura não é alterado, mesmo com efeitos de deformação presentes em difusão turbulenta. O processo de difusão em fluidos estabelece uma proporção com relação entre o fluxo turbulento e a mistura, que correspondem ao coeficiente de difusão (da ordem de 10^4 a $10^5 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$), em majoritária parte dos gases correspondem a ordem de $10^{-1} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ em processos de difusão molecular (MONIN, 1971).

Dispersões de poluentes em meio eólico são aplicados a modelos matemáticos com potencial para descrever o transporte no meio fluido das partículas que compõem o poluente. Neste contexto de modelagem matemática, a descrição da dinâmica/evolução do movimento/trajetória das partículas no escoamento em questão, são frequentemente analisados por dois métodos, sendo eles o Lagrangeano, equação (9), onde o sistema de referência segue as coordenadas descritas pelas partículas ou parcelas que compõem o fluido (massa), sendo possível determinar a trajetória de cada elemento presente no fluido a partir da respectiva posição inicial. O segundo método é o Euleriano, equação (10), divergente do primeiro método citado por apresentar coordenadas fixas com relação ao espaço (UCKER, 2007). As trajetórias aleatórias das partículas/mistura provenientes dos vórtices em escoamentos turbulentos podem ser analisadas por movimento evolutivo das parcelas de um escoamento, por meio de

aproximações Lagrangeanas. “A equação fundamental para a evolução espacial e temporal de concentração média de um contaminante em uma parcela de fluido, $C(\vec{x}, t)$, pode ser escrito como” (UCKER, 2007, p. 21):

$$C(\vec{x}, t) = \iint_0^t P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) S(\vec{x}_0, t_0) d\vec{x}_0 dt_0 , \quad (9)$$

onde $P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$ é uma função de densidade de probabilidade em uma determinada parcela de fluido e $S(\vec{x}_0, t_0)$ está atrelado a contração média de contaminantes em correlacionada ao tempo (LISBOA, 2007).

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \cdot \nabla c + D \nabla^2 c + S . \quad (10)$$

As ilustrações a seguir demonstram as diferenças referenciais em abordagens do sistema referencial Lagrangeano para o Euleriano.

Figura 17 – Representação do modelo de sistema referencial Lagrangeano. As trajetórias das partículas são observadas ao longo da evolução temporal. Ilustração elaborada com base em Zanette (1990) apud Lisboa (2007).

Figura 18 – Representação do modelo de sistema referencial Euleriano. Sistema de coordenadas fixas, as posições finais das partículas são observadas. Ilustração elaborada com base em Zanette (1990) apud Lisboa (2007).

A primeira descrição matemática aproximada da estatística de fluidos turbulentos decorre dos trabalhos de Obukhov e Kolmogorov, nos anos 1940. O raciocínio deste modelo estatístico tem como base o princípio de que a turbulência estacionária é um processo fractal, logo autossimilar em escalas. Como os modos de perturbação do fluido devem interagir entre si e decair em escalas menores, para que a autosimilaridade se mantenha, é obrigatório que a taxa de transferência de energia da escala maior para a escala maior também seja independente de escala, ao menos até o limite da escala de dissipação viscosa (quando $Re \sim 1$).

Em modelos de turbulência podemos aplicar os conceitos de escalas de Kolmogorov, onde é possível obter uma escala de comprimento, dada pela equação (11), escala de tempo, pela equação (12), e escala de velocidade, representada pela equação (13):

$$\lambda = \left(\frac{u^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} , \quad (11)$$

$$t_K = \left(\frac{u}{\varepsilon}\right)^{1/2} , \quad (12)$$

$$\vartheta = (u\varepsilon)^{1/4} . \quad (13)$$

Onde, ε é igual a taxa de dissipação viscosa. “Estas escalas são referidas como microescalas de Kolmogorov. O número de Reynolds formado com estas escalas é expresso por $Re_K(\vartheta \cdot \lambda/u)$ ” (SOUZA, 2011, p. 28). Neste contexto também são descritas a escala de vorticidade, equação (14) e energia, equação (15):

$$w = \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{1/2} , \quad (14)$$

$$e = (\nu\varepsilon)^{1/2} . \quad (15)$$

Através das equações médias de Reynolds podemos estabelecer o parâmetro de conservação de massa em escoamentos em fluidos incompressíveis. Entre os modelos obtidos por meio da análise de Reynolds, temos em destaque o tensor de Reynolds, equação (16). As tensões turbulentas obtidas, por esse modelo matemático é correlacionado ao termo viscoso das equações de Navier-Stokes, equação (8). Outro método de obter a tensão turbulenta está atrelado ao modelo proposto por Boussinesq em 1977 (SOUZA, 2011), onde a tensão é

relacionada τ_t ao gradiente de velocidade média correlacionado a viscosidade turbulenta ν_t , equação (17).

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} = -\rho \begin{bmatrix} \overline{u^2} & \overline{uv} & \overline{uw} \\ \overline{vu} & \overline{v^2} & \overline{wv} \\ \overline{wu} & \overline{wv} & \overline{w^2} \end{bmatrix}, \quad (16)$$

$$\tau_t = \nu_t \frac{d\bar{u}}{dy}. \quad (17)$$

Deste modo é possível correlacionar o parâmetro ν_t , k e ε , para definimos a equação de transporte viscosidade cinemática turbulenta:

$$\nu_t = c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (18)$$

onde c_μ é uma constante.

3.3.1. A Transferência de energia turbulenta

Na ausência de forças externas, a equação de Navier-Stokes possui características de conservação de energia e momento específicas. A energia cinética total do fluido turbulento pode ser descrita por:

$$E = \int_V d^3\mathbf{r} \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}^2|, \quad (19)$$

e sua evolução temporal:

$$\frac{dE}{dt} = \int d^3\mathbf{r} \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \int d\mathbf{r} [-u_i u_j \partial_j u_i - u_i \partial_i p + \nu u_i \partial_j \partial_j u_i], \quad (19.1)$$

que, para uma condição de contorno periódica (típica para sistemas grandes, e com turbulência autosimilar desenvolvida), tem seus dois primeiros termos nulos. Note que o termo não-linear da equação acima não resulta em dissipação de energia!

A equação acima resulta, portanto, em:

$$\frac{dE}{dt} = \nu \int d^3\mathbf{r} \rho \nabla^2 u = -\nu \int d^3\mathbf{r} \rho (\nabla \times \mathbf{u})^2 = -\nu \int d^3\mathbf{r} \rho |\omega|^2, \quad (19.2)$$

onde utilizamos a definição de vorticidade $\omega = \nabla \times \mathbf{u}$. A última integral na equação acima é conhecida como “enstrofia” do sistema. A enstrofia está associada à energia de rotação, que se

potencializa em pequenas escalas. Verifica-se que no caso limite de $\nu = 0$ a energia total do sistema se conserva, enquanto que para qualquer viscosidade real não nula a energia do sistema decresce, devido à viscosidade. Entretanto, o resultado mais relevante, e já percebido no início do século XX, é que esta dissipação ocorre, para $\nu \ll 1$, de forma constante.

3.3.2. As escalas turbulentas

Embora o termo não-linear da equação de Navier-Stokes não resulte em dissipação de energia ele tem papel importante na evolução de sistemas turbulentos, simplesmente porque este é o termo responsável pela transmissão de energia entre as escalas do sistema. Enquanto a energia está acumulada em grandes escalas, a dissipação ocorre em pequenas escalas. Como a taxa dissipativa ocorre em taxas constantes, é imprescindível que haja um processo responsável pela transmissão de energia da grande escala para as escalas dissipativas. Esta é, de fato, a origem da turbulência.

Uma descrição matemática de como esta transferência de energia se dá é possível através de uma teoria perturbativa, em espaço de Fourier, que resulta em:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu k^2\right) u_\alpha(k) = -i \left(k_\beta \delta_{\alpha\gamma} - \frac{k_\alpha k_\beta k_\gamma}{k^2} \right) \int d^3p u_\beta(p) u_\gamma(k-p). \quad (20)$$

Que pode ser rescrita por:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + 2\nu k^2\right) E(k) = T(k). \quad (20.1)$$

Onde $T(k) = -4\pi k^2 k_\rho \text{Im}\{\int d^3p T_{\sigma\rho\sigma}(k,p)\}$, é a taxa de transferência de energia do sistema, dependente da correlação de três pontos definida por:

$$\langle u_\alpha(k) u_\beta(k') u_\gamma(k'') \rangle = \delta(k + k' + k'') T_{\alpha\beta\gamma}(k, k') \quad (20.2)$$

Ou seja, em termos de uma teoria perturbativa, a teoria descrita acima prevê que perturbações de escalas k e k' interagem não linearmente para produzir novas perturbações em escalas k'' .

3.3.3. A teoria de Kolmogorov

Na teoria de Kolmogorov (1941), posteriormente revista por Kraichnan (1965), é assumido – empiricamente – que a taxa de transferência de energia é potencializada para perturbações em escalas $k \sim k'$, ou seja, para $k'' \sim 2k$. Interações em outras escalas são consideradas de probabilidade desprezível. Este é o chamado *princípio da localidade* (localidade em espaço de Fourier significa mesma escala). Se a taxa de transferência de energia é local, estritamente determinada pelas propriedades físicas da escala em questão, ela pode ser escrita por: $\partial_t E \equiv \epsilon \sim \frac{\delta u_k^2}{t_k}$, onde t representa uma escala de tempo típica de interação entre as perturbações de escala k . Naturalmente que, em um fluido natural típico, a escala de tempo de interações entre as perturbações, deve ser equivalente à própria escala de tempo dinâmica de transito dos modos de onda, ou seja $t_k \sim (\delta u_k k)^{-1}$.

Desta forma, para uma escala k , a condição de localidade resulta em que rescreta em termos de um espectro de potência, definido por:

$$\int_{k=1/l}^{\infty} P(k') dk' = \delta u_l^2 . \quad (21)$$

Fornece, para o caso de localidade:

$$P(k') \propto \epsilon^{2/3} k'^{-5/3} , \quad (21.1)$$

conhecida como espectro de Kolmogorov, com índice de espectro de potência para a auto-similaridade de $-5/3$.

3.4 COEFICIENTE DE DIFUSÃO

Anos antes da teoria de Kolmogorov para a turbulência hidrodinâmica ser apresentada, a difusão de compostos particulados na atmosfera turbulenta já havia sido constatada, de forma empírica, por L. Richardson (1922). Em sua época, era sabido que a turbulência resultava em movimentos caóticos e irregulares, sobrepostos. Cabia então a questão: como tais movimentos modificariam coeficientes de mistura, ou a difusão de partículas.

3.4.1 Difusão molecular

No caso de uma difusão molecular térmica simples, a Lei de Fick prevê:

$$\vec{q} = -D\vec{\nabla}c \quad (22)$$

onde $\vec{q}$ representa o fluxo do soluto, c a concentração de massa e D o coeficiente de difusão molecular. Valores típicos de difusão de moléculas no ar atmosférico estão em torno de $10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Ou seja, a difusão é processo de homogeneização da distribuição (homogeneizar a distribuição/proporcional entre as duas densidades), a concentração de massa é relacionada através da relação entre N que representa o número de partículas e V correspondente ao volume do sistema, resultando $c = N/V$.

Figura 19 – Fluxo das partículas em sistema semipermeável segundo a Lei de Fick. As partículas transportadas da região de maior concentração para a região de menor concentração através do processo de difusão molecular.

A equação (22) acima determina que o fluxo difusivo de um determinado composto é proporcional ao gradiente de concentração naquela direção, de modo análogo à Lei de Fourier para a difusão térmica de condução de calor. Em um determinado escoamento laminar (não turbulento), de velocidade u , o fluido adiciona à difusão molecular padrão seu movimento coerente, denominado fluxo de advecção $q_{ad} \sim uc$. A composição de ambos os processos resulta na equação de difusão-advecção padrão:

$$\partial_t c + u \cdot \nabla c = D \nabla^2 c, \quad (22.1)$$

cuja escala de tempo de difusão, para que uma fração substancial do material corpuscular se difunda por uma escala de distância L , pode ser estimada por:

$$L \sim \sqrt{Dt} \quad (22.2)$$

ou

$$t \sim \frac{L^2}{D}. \quad (22.3)$$

Percebe-se claramente que a difusão de pesticidas lançados ao ar, por exemplo, em uma plantação de cerca de 100 m de largura, ocorreria apenas em uma escala de tempo superior a 30 anos! Como ao adicionar açúcar no café, que ninguém espera que se misturem por difusão molecular, a solução para uma mistura eficiente e rápida é “mexer” com uma colher. A mistura, neste caso, não ocorre apenas por advecção causada pelo movimento da colher, mas pelo cascadeamento da perturbação causada pela colher, em larga escala, em todas as escalas do sistema até aquela determinada pela dissipação viscosa. A turbulência aparece, portanto, como eficiente amplificadora do coeficiente de difusão de fluidos.

3.4.2 Difusão turbulenta

Pode-se derivar a equação de difusão-advecção em fluidos turbulentos ao transformarmos o termo de concentração em seu termo médio somado a uma flutuação c' (causada pela turbulência): $c = \bar{c} + c'$. A média temporal da equação de difusão se torna:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x_j^2} - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u'_j c'} \quad (23)$$

Geralmente $\overline{u'_j c'} \gg D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j}$ e a difusão molecular pode ser desprezada. Mesmo assim, como o termo $u'_j c'$ é desconhecido, a equação acima não possui solução direta por não ter fechamento. Uma alternativa é modelar, a priori, o comportamento do termo $u'_j c'$, como sendo Fickiano, ou seja, que em média $\overline{u'_j c'} = -D_t \nabla c$, sendo D_t o coeficiente de difusão turbulenta. Não existe maneira teórica analítica capaz de obter uma relação para o coeficiente de difusão turbulento por primeiros princípios.

Uma maneira aproximada e simples de se estimar o coeficiente de difusão turbulento é considerar um experimento simples, no qual inúmeras partículas são abandonadas em um mesmo ponto em um dado instante. Cada partícula sofrerá uma evolução dinâmica, ditada pelos movimentos aleatórios turbulentos, distinta, dado que a posição final de cada partícula será $\vec{X} = \int_0^t \vec{u} dt$. Embora, obviamente, a média das posições de todas as partículas em um dado instante qualquer será sempre nula, a sua dispersão não será:

$$\overline{X^2(t)} = 2u_L^2 \int_0^t \int_0^{t'} R_L d\tau dt' , \quad (24)$$

Onde

$$R_L(\tau) = \frac{\overline{u(t)u(t+\tau)}}{u_L^2} . \quad (24.1)$$

Para $t \gg 1$, diferenciando a equação acima, obtém-se:

$$\frac{1}{2} \frac{d\overline{X^2(t)}}{dt} = u_L^2 T_L , \quad (24.3)$$

onde $T_L = \int_0^\infty R_L d\tau$, equivale a escala de tempo dinâmica na escala L . Neste caso $\sqrt{\overline{X^2(t)}}$ evolui linearmente com $t^{1/2}$, equivalente ao “*random walk*”, o que é natural, uma vez que o movimento turbulento das perturbações no fluido podem ser descritos como caóticos e isotrópicos. Assim, o coeficiente de difusão turbulento será dado por $D_t \sim Lu_L$, que é uma constante (independente de escala e de tempo). Note que, comparativamente para uma turbulência atmosférica de alguns $m s^{-1}$ de amplitude, a difusão turbulenta é de poucos minutos, em contraponto ao número ordens de grandeza maior para a difusão molecular.

3.5 MODELAGEM NUMÉRICA DA TURBULÊNCIA

As propriedades físicas do problema, discutidas na seção 2, e todos os aspectos matemáticos presentes na seção 3, relacionados diretamente ou indiretamente à compreensão do processo de dispersão de poluentes em sistemas agrícolas, tema central do presente trabalho, foram abordados de modo com que as características dos agrotóxicos e modelos matemáticos, citados em nossa literatura base, auxiliasse a realização da modelagem dos poluentes, através do seguinte esquema conceitual:

- os poluentes são modelados como partículas submetidas à ação da força gravitacional e de arrasto;
- o gás segue estatística de grande número de partículas (finito), logo um fluido contínuo e incompressível;

- o código AMUN (tipo Godunov – em linguagem Fortran) é indicado para análises de modelos com características lineares ou não lineares em fluidodinâmica.

3.5.1 Descrição do código e modelos

Nesta etapa do trabalho apresentamos uma série de simulações numéricas desenvolvidas para a descrição do problema em questão: a deriva de partículas em meios fluidos turbulentos, com maior grau de complexidade, comparado aos modelos semi analíticos aproximados.

As simulações numéricas utilizam o código AMUN (amuncode.org), desenvolvido por Dr. Grzegorz Kowal, do grupo de Astrofísica da EACH-USP, coordenado pelo Prof. Diego Falceta Gonçalves. Este código é indicado para análises de modelos com características lineares ou não lineares em fluidodinâmica. Segundo Silveira (2002, p. 1) “entre as características mais importantes dos escoamentos turbulentos, destaca-se a multiplicidade de escalas que os caracterizam”, descritos pelas escalas de Kolmogorov, que foram apresentadas seção anterior. Consequentemente, serão abordados contextos de simulação numérica DNS (*Direct Numeric Simulation*) e LES (*Large-Eddy Simulation*), devido à versatilidade de promover análises qualitativas e quantitativas da descrição de fenômenos turbulentos em escalas espaciais e temporais de ampla divergência de magnitude (MARTINEZ, 2006). A amplitude de escalas simuláveis em determinado modelo está relacionada ao número de Reynolds (Re), equação (7). Modelos são representativos da evolução turbulenta atmosférica para $Re \gg 1$.

A simulação numérica *DNS* consiste em resolver numericamente as equações completas de Navier-Stokes para todos os pontos da grade e para todas as escalas temporais e espaciais do movimento. Como já descrito na apresentação da equação de Navier-Stokes, equação (8), o termo Π de dissipação viscosa, é um dos principais parâmetros de análise.

A descrição da dinâmica/evolução do movimento/trajetória das partículas que compõem escoamentos turbulentos, serão analisadas pelo Método Lagrangeano, equação (9), em esquema *post-processing*, de acordo com as características presentes em cada simulação computacional.

4 RESULTADOS

4.1 DISTRIBUIÇÃO DE DENSIDADE E VELOCIDADE

As simulações numéricas foram inicialmente realizadas com resolução de células em cada dimensão entre 128, 256, 512 e 2048, com modelos de diferentes pressões térmicas iniciais, bem como distintas velocidades de injeção de turbulência iniciais, com o intuito de gerar modelos transsônicos, subsônicos e supersônicos. O objetivo nesta etapa do trabalho seria a familiarização com as estatísticas típicas de turbulência nesses sistemas, e a posterior escolha dos modelos que melhor se assemelhariam aos problemas de interesse. Como os gradientes verticais das distribuições de velocidade e densidade são pequenos nos casos de interesse agrônomico, as simulações aqui desenvolvidas foram evoluídas considerando-se apenas 2 dimensões (plano horizontal, perpendicular à gravidade).

Com base nos modelos com as condições descritas, estabelecemos graficamente as distribuições de densidade e velocidade, tratando os escoamentos de modo compressível. São apresentados em conjunto, como resultados a representação gráfica da distribuição de densidade de acordo a dimensão selecionada do escoamento, dados de densidade máxima, mínima e contraste, representadas respectivamente por: $\rho_{m\acute{a}x}$; $\rho_{m\acute{i}n}$ e ρ_{cont} . Os mapas de vetores explorando o campo vetorial do perfil corresponde a densidade. Tais resultados gráficos são apresentados a seguir.

4.1.1 A importância da resolução numérica

Figura 20 – (Esquerda – *Density*) Representação gráfica da densidade: $\rho_{\max} \approx 1,67$; $\rho_{\min} \approx 0,23$ e $\rho_{\text{cont}} \approx 7,26$. (Direita – *Velocity Field*). Representação vetorial do campo de velocidade. Ambas representações correspondem a resolução de 128 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos. Modelo transsonico.

Figura 21 – (Esquerda – *Density*) Representação gráfica da densidade: $\rho_{\max} \approx 1,98$; $\rho_{\min} \approx 0,48$ e $\rho_{\text{cont}} \approx 4,16$. (Direita – *Velocity Field*). Representação vetorial do campo de velocidade. Ambas representações correspondem a resolução de 256 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos. Modelo transsonico.

Figura 22 – (Esquerda – *Density*) Representação gráfica da densidade: $\rho_{\max} \approx 1,84$; $\rho_{\min} \approx 0,39$ e $\rho_{\text{cont}} \approx 4,72$. (Direita – *Velocity Field*). Representação vetorial do campo de velocidade. Ambas representações correspondem a resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos. Modelo transônico.

As figuras 20, 21 e 22 apresentam mapas de densidade e velocidade para instantes evoluídos de turbulência, equivalentes a 5 vezes o tempo dinâmico do sistema (L/u_L), para os modelos transônicos, ou seja, aqueles que têm velocidades turbulentas médias em grande escala equivalentes à velocidade do som, i.e. número de Mach $M_s = \langle u_L \rangle / c_s \sim 1$.

Nas figuras, as regiões mais claras apresentam maior densidade, enquanto as regiões escuras apresentam menores densidades (rarefação). Obviamente, turbulência supersônica e transônica apresentam alto grau de compressibilidade do fluido. Embora os campos de velocidade (direita) não apresentem visual distinção entre os modelos, a distribuição de densidade do gás apresenta maior grau de refinamento, e portanto estruturas em pequena escala, nos modelos de maior resolução em células por unidade de comprimento. A resolução numérica introduz erros matemáticos decorrentes da aproximação numérica na escala de poucas células, que resulta em dissipação local – não natural, mas numérica. Como veremos mais adiante, tal propriedade das aproximações numéricas em computação física, resultará em espectros de potência, e consequentemente em estruturas autossimilares distintas.

A importância da compressibilidade na formação de estruturas de alta-densidade, e, obviamente por conservação da massa, de pequenas dimensões espaciais, fica bem compreendida no modelo supersônico das figuras 23 e 24. Aqui ilustramos a densidade e o mapa vetorial de velocidades para o modelo com número de Mach $M \sim 6$, equivalente a turbulência altamente supersônica.

Figura 23 – (Esquerda – *Density*) Representação gráfica da densidade: $\rho_{\text{máx}} \approx 1,00$; $\rho_{\text{min}} \approx 0,99$ e $\rho_{\text{cont}} \approx 1,01$. (Direita – *Velocity Field*). Representação vetorial do campo de velocidade. Ambas representações correspondem a resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 0,1 tempos dinâmicos. Modelo subsônico.

Figura 24 – (Esquerda – *Density*) Representação gráfica da densidade: $\rho_{\text{máx}} \approx 6,86$; $\rho_{\text{min}} \approx 0,05$ e $\rho_{\text{cont}} \approx 137,20$. (Direita – *Velocity Field*). Representação vetorial do campo de velocidade. Ambas representações correspondem a resolução de 512 células em cada dimensão e evolução total de 1 tempos dinâmicos. Modelo supersônico.

Os mapas de densidade das figuras 23 e 24 mostram a evolução temporal do sistema. Em 1 tempo dinâmico, a distribuição de densidade se torna bastante inhomogênea, com estruturas filamentosas decorrentes de choques com altas densidades. Note a convergência entre

as regiões de alta densidade no mapa de densidade com as regiões de fluxos de velocidade convergentes no painel da direita.

Estes sistemas compressíveis, supersônicos, são de alto interesse por ex. para modelagem de motores de combustão a jato, mas não têm aplicação direta ao caso de dispersão de poluentes.

4.1.2 Os casos de interesse: fluidos incompressíveis subsônicos

Para o estudo de dispersão de poluentes em atmosfera, naturalmente que devemos considerar os ventos locais típicos como fonte de turbulência. Em todos os casos conhecidos, a amplitude dos ventos atmosféricos em solo equivale a uma fração pequena da velocidade do som local.

Para obtermos modelos de interesse, repetimos os casos descritos acima, mas agora com velocidade de injeção de turbulência subsônica, entretanto para os modelos de interesse utilizamos mais recursos computacionais com modelos de alta resolução numérica (afim de obter um maior intervalo inercial de escalas seguindo a Lei de Kolmogorov).

Figura 25 – (Esquerda – *Density*) Representação gráfica da densidade: $\rho_{\max} \approx 2,03$; $\rho_{\min} \approx 0,41$ e $\rho_{\text{cont}} \approx 4,95$. (Direita – *Velocity Field*). Representação vetorial do campo de velocidade. Ambas representações correspondem a resolução de 2048 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos. Modelo subsônico.

Figura 26 – (Esquerda – *Density*) Representação gráfica da densidade: $\rho_{\max} \approx 2,03$; $\rho_{\min} \approx 0,28$ e $\rho_{\text{cont}} \approx 7,25$. (Direita – *Velocity Field*). Representação vetorial do campo de velocidade. Ambas representações correspondem a resolução de 2048 células em cada dimensão; turbulência excitada em baixas e pequenas escalas ($k = 2,5 k_0$) e evolução total de 5 tempos dinâmicos. Modelo subsônico.

Os modelos ilustrados nas figuras 25 e 26 representam situações de turbulência subsônica $M \sim 0.2$, com resolução numérica alta, equivalente a 2048 células em cada dimensão.

4.2 ESPECTRO DE POTÊNCIA E VELOCIDADE

Foram gerados espectros de potência para a velocidade das simulações apresentadas anteriormente na seção 4.1, com as resoluções de células em cada dimensão iniciando em 512 e 2048, para os modelos transônicos e subsônicos, destacamos os tempos dinâmicos entre: 0,1; 0,5; 1,5; 2; 3,5 e 5, com o propósito de analisar a evolução do espectro em relação ao tempo. Nesse contexto, observamos que independente das características de simulação transônica ou subsônica, inicialmente o espectro se concentra em pequenos valores de número de onda k , correspondente a representação de grandes escalas, ou seja, os vórtices contêm tamanho $L = 1/k$, de acordo com o tempo poder ser observado a turbulência evoluindo para pequenas saturando na Lei de Kolmogorov. Como pode ser visto nas figuras 27, 28, 29 e 30, a seguir:

Figura 27 – Representação gráfica do espectro de potência e velocidade correspondem a resolução de 512 células em cada dimensão. Linha vermelha representa a previsão teórico de Kolmogorov. Linhas: roxa; alaranjada; amarela; verde; azul e preta, correspondem a respectivamente a evolução total de 0,1; 0,5; 1,5; 2; 3,5 e 5 tempos dinâmicos. Modelo transônico.

Figura 28 – Representação gráfica do espectro de potência e velocidade correspondem a resolução de 512 células em cada dimensão. Linha vermelha representa a previsão teórico de Kolmogorov. Linhas: roxa; alaranjada; amarela; verde; azul e preta, correspondem a respectivamente a evolução total de 0,1; 0,5; 1,5; 2,0; 3,5 e 5 tempos dinâmicos. Modelo subsônico.

Figura 29 – Representação gráfica do espectro de potência e velocidade correspondem a resolução de 2048 células em cada dimensão. Linha vermelha representa a previsão teórico de Kolmogorov. Linhas: roxa; alaranjada; amarela; verde; azul e preta, correspondem a respectivamente a evolução total de 0,1; 0,5; 1,5; 2,0; 3,5 e 5 tempos dinâmicos. Modelo subsônico.

Figura 30 – Representação gráfica do espectro de potência e velocidade correspondem a resolução de 2048 células em cada dimensão; turbulência excitadas em baixas e pequenas escalas ($k = 2,5 k_0$). Linha vermelha representa a previsão teórico de Kolmogorov. Linhas: roxa; alaranjada; amarela; verde; azul e preta, correspondem a respectivamente a evolução total de 0,1; 0,5; 1,5; 2,0; 3,5 e 5 tempos dinâmicos. Modelo subsônico.

4.3 SIMULAÇÕES E AS PLUMAS DE CONTAMINANTES

Para a caracterização de nosso modelo de pluma tratamos as dinâmicas dos escoamentos de modo subsônico e incompressível (sem diferença de densidade ao longo do escoamento), as simulações contêm número de células por dimensão de 2048. As análises direcionadas a evolução da pluma foram estabelecidas dentro dos seguintes padrões: (I) das linhas de velocidade do escoamento, por meio de mapas de convolução integral de linha; (II) verificação da trajetória das partículas ($N = 50$); (III) a dinâmica presente entre as partículas e escoamento, por meio da combinação entre o mapa de convolução integral de linha e a representação gráfica da trajetória das partículas, para verificar que as partículas acompanham os vetores de velocidade e apresentado as relações com a equação de movimento ao longo do mapa de velocidade; (IV) estabelecer de modo aleatório a posição inicial das partículas, inseridas de um raio promovido a partir da região central de cada modelo analisado; (V) simular a posição final das partículas após a interação entre a dinâmica turbulenta condições diferentes de vorticidade; e (IV) os efeitos da dispersão ao longo do tempo de acordo com a linearidade prevista por Richardson, conforme a equação (24).

Sobre o processo de pulverização de agrotóxicos, realizaremos um experimento de aproximação, onde a observação da dissipação das partículas será analisada em projeção ortogonal, tratando a turbulência em plano horizontal, assim os efeitos do escoamento tendem a serem analisados em coordenadas cartesianas x e y , representam o plano horizontal, ou seja, uma representação da visão aérea da turbulência horizontal.

4.3.1 Modelos numéricos de plumas de poluentes

Nesta seção apresentamos os resultados mais importantes desta dissertação. Aqui, utilizamos as simulações numéricas eulerianas de turbulência hidrodinâmica atmosférica e compomos à deriva, difusão, de partículas consideradas passivamente ao fluido, espacialmente. Como descrito anteriormente, utilizamos de uma técnica lagrangeana para a evolução temporal da posição das partículas. Por uma questão estatística, cada simulação de difusão envolve a evolução de um conjunto N de partículas independentes, sempre alocadas aleatoriamente em uma região (máscara de injeção) inicial.

A evolução dinâmica das partículas, aqui, segue independentemente da força gravitacional, uma vez que se trata de uma aproximação bidimensional, plano-paralela com

relação ao plano da superfície de interesse da área de plantio. Todavia, com base na evolução temporal da trajetória da partícula, e do princípio galileano de independência das componentes do movimento dos corpos, é possível considerar a evolução temporal das trajetórias como descrito nesta seção em conjunção às estimativas de deriva vertical com base nas massas e volumes das partículas dispersadas feitas analiticamente. Esse procedimento é exemplificado mais adiante.

No estudo da difusão, mostramos a trajetória de cada uma das partículas simuladas nas figuras a seguir. Aqui, compara-se a trajetória das partículas às figuras de convolução linear dos mapas de velocidade, que poderiam, em princípio, indicar as trajetórias das partículas, não fosse pela evolução temporal do próprio campo de velocidades. No cálculo da evolução temporal das partículas consideramos a distribuição instantânea de velocidades da simulação numérica de turbulência, e não apenas um “snapshot” congelado do sistema.

Por fim, como dado de maior interesse neste estudo, calculamos a evolução temporal da distância média entre as partículas. Isto equivale, em princípio, à própria difusão turbulenta das partículas. Sobreposta à curva de distância média entre as partículas adicionamos a linha de lei de potência referente à Lei de Richardson para a difusão turbulenta. Nota-se, nos gráficos a seguir, que, de fato, a difusão observada nos modelos simulados, segue a essa lei.

Nos casos dos gráficos apresentados nas figuras 31 a 34, nos ativemos às escalas definidas pela turbulência local. Nessas condições “atratores” e estruturas coerentes de velocidade acabam por ter maior significância estatísticas – e impacto na evolução da difusão. Já nas figuras 35 a 38, operacionalizamos uma replicagem das áreas simuladas (dado que nossas condições de fronteira são periódicas), apoiados no princípio de autossimilaridade do sistema. O resultado, agora, diverge da pressão estatística das estruturas coerentes, trazendo à luz predominantemente os efeitos de difusão turbulenta, em confluência à estatística de Richardson, como ilustrado de maneira mais evidente nas figuras 36, 37 e 38.

Figura 31 – Gráfico de dispersão 1: (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combined map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

Figura 32 – Gráfico de dispersão 2: (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combine map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

Figura 33 – Gráfico de dispersão 3: turbulência excitadas em baixas e pequenas escalas ($k = 2,5 k_0$). (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combine map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

Figura 34 – Gráfico de dispersão 4: turbulência excitadas em baixas e pequenas escalas ($k = 2,5 k_0$). (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combine map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

Figura 35 – Gráfico de dispersão 5: turbulência excitada em pequenas escalas ($k = 2,5 k_0$). (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combine map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

Figura 36 – Gráfico de dispersão 6: (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combine map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

Figura 37 – Gráfico de dispersão 7: (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combine map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

Figura 38 – Gráfico de dispersão 8: (Superior esquerdo – *Line integral convolution map*) Mapa de convolução integral de linha. (Superior central – *Particle trajectory*) Trajetória das partículas. (Superior direito – *Combine map*) Combinação entre o Mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela Trajetória das partículas. (Inferior esquerdo – *Particle inicial position*) Posição inicial das partículas. (Inferior central – *Particle final position*) Posição final das partículas. (Inferior direito – *Position dispersion, Dispersion of positions and Time*) Posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo.

5 DISCUSSÃO

Com os dados relacionado a densidade do ar, densidade das gotículas de agrotóxicos e velocidade do vento (tabela 4), em conjunto com o modelo matemático para obtenção do raio crítico para partículas transportadas, a partir da equação (1) apresentada na seção 2.1 – Propriedades Físicas do Problema –, foi possível estabelecer entre o intervalo de velocidade do vento entre $\geq 3 \leq 10 \text{ km}$, densidade do ar igual a $1,29 \text{ kg m}^{-3}$ e densidades de agrotóxicos entre $\geq 920 \leq 1.100 \text{ kg m}^{-3}$. Neste contexto, com relação a velocidade mínima do vento médio (3 km/h) no controle de deriva obtivemos $r_c \cong 1,8 \times 10^{-4} \text{ m}$ e ao extremo do controle de deriva (vento médio a 10 km/h) o raio crítico para as partículas de agrotóxicos foi de $r_c \cong 2,0 \times 10^{-3} \text{ m}$, com isso temos que partículas com raio superiores aos obtidos em cada situação de extremo de controle não sofrem deriva.

Por meio da difusão aproximada de Richardson, relacionado a difusão turbulenta, apresentada anteriormente na equação (24) obtivemos uma comparação entre o processo de difusão molecular estabelecido pela Lei de Fick, equação (22), em um sistema com $u' \sim 3 \text{ km/h}$ e $L \sim 100 \text{ m}$. Obtivemos os seguintes resultados: A difusão turbulenta correspondeu $t \sim 2$ minutos, comparado a 30 anos pela Lei de Fick i.e., se a partícula não sedimenta em tempo inferior a 2 minutos, ela se deslocará por uma área superior ao campo de aplicação.

5.1 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS NUMÉRICOS

A partir do conjunto de resultados gráficos de densidade e campo de velocidade, possibilitou compararmos com riqueza de detalhes os vórtices em um escoamento com turbulência dominante. Para os modelos transônicos, apresentados nas figuras: 20, 21 e 22, os tempos dinâmicos são igual, representado a evolução total de 5 tempos dinâmicos, entretanto a resolução de número de células em cada dimensão é variável em cada figura, possibilitando conferir a “textura” de um sistema amplamente variável com densidade e velocidade distintas em diversas células que compõem os gráficos, e o papel da dissipação numérica na distribuição de densidades. É representada semelhança entre os modelos transônicos, observados nos movimentos circulares (vórtices) contidos nos gráficos de densidade e campo de velocidade, onde são conferidos em relação a ampliação da resolução do número de células, o que possibilita demonstrar a presença dos vórtices de grande escala envoltos por vórtices cada vez menores e mais numerosos, como previsto surge um fenômeno de cascadeamento, que pode ser

melhor compreendido na figura 22.

Outro modo de analisarmos a alteração do número de vórtices em determinada região do escoamento foi pautado na alteração da velocidade com que o fluido escoar, para isso foi criado um modelo supersônico, que foi apresentado na figura 23. A representação gráfica da densidade e do campo de velocidade contém resolução de 512 células em cada dimensão, assim como os gráficos da figura 22, entretanto, a evolução total de 1 tempos dinâmicos para a figura 23, é possível observar para o modelo supersônico uma quantidade superior de vórtices e com nível mais complexo em detalhes em comparação aos modelos transônicos, mesmo como as figuras 20, 21 e 22 apresentando evolução total 5 de tempos dinâmicos.

Para os modelos subsônicos iniciamos nossa análise com a evolução total de 0,1 tempos dinâmicos e mantemos a resolução de 512 células em cada dimensão, características correspondentes os gráficos da figura 24. Neste primeiro resultado dos modelos subsônicos, é compreendido um aspecto de “textura” de densidade com baixa variedade, devido ao início da dinâmica turbulenta e as variáveis de velocidade do modelo, todavia, o resultado é relevante, pois a representação gráfica do campo de velocidade descreve vórtices bem definidos pelo campo vetorial.

A segunda parte, referente à comparação aos modelos subsônicos, aborda um modelo com resolução de 2048 células em cada dimensão e evolução total de 5 tempos dinâmicos. As figuras 25 e 26 se distinguem com relação ao modo em que a turbulência é excitada. Observamos na figura 25, vórtices iniciais de grande amplitude, e na figura 26 são apresentando múltiplos vórtices devido à turbulência ser excitada em pequenas escalas ($k = 2,5 k_0$).

Os espectros de potência e velocidade apresentados em nossos resultados, complementam os dados/elementos obtidos nas análises de comparação entre os gráficos de densidade, campo de velocidade e condiz com nosso embasamento teórico, a respeito das características presentes em fenômenos não-lineares, enquadrados em sistemas complexos de se comportarem de acordo com as leis de potência.

Para as representações de espectros de potência de velocidade, o modelo subsônico apresenta na evolução total dos tempos dinâmicos um decaimento das características turbulentas pela perda de energia correspondente à ação da viscosidade em pequenas escalas, como citado anteriormente nos resultados dos gráficos de densidade e campo de velocidade. Na comparação entre os espectros de potência e velocidade de modelos subsônicos, apresentados nas figuras 29 e 30, é observado regularidade com que os estímulos turbulentos são desencadeados na figura 29, demonstrando baixo número de vórtices iniciais, entretanto com alta magnitude de energia, dissipado para a próximas de modo bem definido. Para a figura 30, é

possível observar um número elevado de vórtices pequenos em escala, fornecendo energia ao sistema, promovendo suporte das flutuações a medida em que a evolução temporal, devido a promoção de vórtices cada vez menores, pois o modelo se difere do apresentado na figura 29, por conter a turbulência excitadas em baixas e pequenas escalas ($k = 2,5 k_0$).

Nossos modelos numéricos de plumas de poluente são obtidos a partir de um pós-processamento de trajetórias lagrangeanas superpostas (passivas) ao fluido simulado pelo código Godunov (euleriano), como ilustrado nos gráficos de dispersão 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7 e 8.

Os gráficos de melhor eficiência de dispersão são apresentados nas figuras 31 e 32. Uma característica interessante das simulações apresentadas é a geração de “atratores”, vórtices e pontos de divergência no fluxo do fluido turbulento. Cada uma destas propriedades agirá diferentemente na dispersão das partículas passivas, a depender da área total de pulverização inicial e sua posição.

Ao analisar o gráfico de dispersão 1 (figura 31), temos como resultado que as partículas se dispersam em sentidos diversos, o que pode ser conferido no gráfico da posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo, onde os efeitos de dissipação são suportados, diferentemente dos resultado do gráfico de dispersão 2 (figura 32), onde observamos as partículas um determinado sentido, ficando próximas entre si, com efeito de dissipação reduzido (atrator), como visto no gráfico da posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo, a distância média entre as partículas não corrobora para a promoção de uma dispersão efetiva entre as partículas.

É observado na figura 36, que as linhas de velocidade do mapa de convolução integral, estão próximas entre si, sendo assim podemos observar trajetória de grande parte das partículas desencadeando movimentos próximo ao centro do gráfico, ou seja, a distância média entre as partículas não varia muito de forma efetiva (atrator), o que pode ser visto no gráfico da posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo, onde os resultados estão abaixo da linha do modelo teórico de Richardson. Em comparação a figura 37, contém um aspecto mais promissor em termos de difusão. As distâncias médias medidas entre as partículas apresentam maior escala e, no gráfico da posição com efeitos de dispersão ao longo do tempo, estimativa próxima à linha do modelo teórico da equação (24).

Os gráficos de dispersão 6, 7 e 8 (figuras 36 , 37 e 38), são compreendidos no contexto da auto-similaridade apresentada na teoria de sistemas complexos, pois quando ampliamos a escala dos gráficos: mapas de convolução integral de linha; trajetória das partículas e o gráfico de combinação entre o mapa de convolução integral de linha e o resultado gráfico apresentado pela trajetória das partículas, apresentados na figura 36 e as sobrepomos com a figura 37 e 38, observamos padrões fractais.

5.2 COMPARAÇÃO ENTRE ESTUDOS

O embasamento teórico, discussões e resultados obtidos no presente trabalho, contribui como referencial introdutório e motivador para diversos campos de pesquisas, científica, tecnológica, ambiental e econômica, que envolvam a problemática do uso excessivo de agrotóxicos na produção agrícola e suas consequências, ou seja, motivar a elaboração de novos bancos de dados, corroborando para o desenvolvimento de projetos que visem os estudos de quadros evolutivos cronológicos da área em questão, auxiliando na promoção de modelos para implantação de normas técnicas de cultivo que minimizem os impactos ambientais, como por exemplo, normas que certifiquem a implantação coesa de *buffer zones*, de acordo com as características físicas e ecológicas da área, método de aplicação dos agrotóxicos e dinâmica da comunidade com relação a interação ao meio ambiente.

A minimização das externalidades ao meio ambiente, também são refletidas para os produtores, pois a conscientização e mudança de postura podem ser alcançadas por meio de difusão científica, como por exemplo, informar aos produtores que a diminuição dos insetos polinizados acarreta na diminuição de produção no setor agrícola. Outro fator relevante com respeito a intensificação das externalidades está pautado na resistência aos produtos que as pragas agrícolas adquirem ao longo do tempo. Segundo Londres (2011, p. 21), no combate contra pragas “os agrotóxicos vão perdendo eficácia e levando os agricultores a aumentar as doses aplicadas e/ou recorrer a novos produtos”. De acordo com as precauções para o controle de poluição, apontadas por estudos que indicam a contaminação externa à área de aplicação tem como referencial o solo e os mananciais (SOARES, W. L.; PORTO, M. F. 2007). Onde também deve ser discutido os mecanismos de deriva, como é citado o vento em nossas referências bibliográficas, sendo o agente que transporta as partículas de agrotóxicos a distâncias superiores a distância mínima prevista no Art. 10 da IN Nº 2/2008 (PIMENTEL, 1995). Com isso estabelecemos tópicos econômicos, científicos e ecológicos, que devem ser estabelecidos em conjunto nas tomadas de decisão públicas ou privadas com relação ao uso adequado de agrotóxico relacionados ao equilíbrio entre interação meio ambiente, comunidade e setor de produção. A ausência de lei mais severas direcionadas a quantidade adequada de produto para região de plantio específico, controle de densidade das gotículas e volume calda pulverizada, estabelecendo um controle para o diâmetro médio das gotículas, criam uma incógnita a respeito do real custo da poluição, pois como apresentado nos estudos de Chaim e Valarini (2004, p. 92), “as recomendações contidas nos rótulos das embalagens dos agrotóxicos deixam a seleção do volume de aplicação a critério do aplicador”.

Apesar das gotículas pulverizadas com menor tamanho apresentarem melhor absorção pelas plantas (BETTINI, et al 2007), há um contraponto, apresentado na tabela 4, que, com base nos dados do coeficiente de uma esfera regular (lisa), em função de Re (AGUIAR, C.E.; RUBINI, G. 2004) e ressaltado em Chaim e Valarini (2004), partículas de poluentes com menor diâmetro são transportadas pelo vento para áreas externas ao cultivo, podendo resultar em uma exoderiva ou sofrerem evaporação, em casos, onde o diâmetro é inferior a $50\ \mu\text{m}$.

É importante ressaltar sobre a base fornecida pelas disciplinas do Programa de Pós-graduação em Modelagem de Sistemas Complexos, entre os tópicos direcionados a visão geral ecológica, ações e gestões do presente trabalho, temos como norteador a disciplina SCX5010 – Economia Aplicada a Sistemas Complexos da linha de pesquisa de Ciências Sociais e Ambientais Aplicadas, contendo dentro de suas múltiplas vertentes de aplicação conteúdo de avaliação econômica e sustentabilidade, que possibilitou correlacionar o estudo de difusão atmosférica à dinâmica de aplicação de pesticidas e a gestão econômica. Outras bases obtidas através do Programa de Mestrado, essências para as discussões físicas e matemáticas abordado no conteúdo teórico atrelado à compreensão de sistemas não-lineares no qual a turbulência está inserida, foram adquiridas por meio das disciplinas de linha de pesquisa em Fundamentos em Sistemas Complexos, em destaque: SCX5002 – Sistemas Complexos I e SCX5005 – Simulação de Sistemas Complexos II.

Entre os métodos de análise selecionados para obtenção dos resultados e discussão do presente trabalho, mencionamos as simulações de deriva de agrotóxicos realizadas por Cunha (2008), onde é analisada a pulverização manual. A modelagem leva em consideração o vento médio, características físicas das gotículas de agrotóxico, força de arrasto e altura de aplicação (0,3; 0,5 e 0,8 m), onde é comprovado que quanto maior a altura de aplicação maior será a deriva, dado esperado com base na revisão teórica, pois o fluxo próximo ao solo encontra maior resistência do atrito reduzindo a velocidade do vento (STULL, 1988), também complementado por Kawano (2003, p. 31) da seguinte forma “A velocidade dos ventos horizontais é afetada pela fricção proporcionada pela rugosidade da superfície, que é determinada pelas características topográficas (ex. montanhas, vales, rios, lagos, florestas, campos)”. Os resultados do estudo indicam que a “distância horizontal máxima percorrida pelas gotas foi inferior a 40 metros”. Entretanto, nas simulações realizadas por Cunha (2008, p. 1620), a força de arrasto presente na deriva de agrotóxicos está vinculada apenas as propriedades de velocidade do vento médio, altura de aplicação, viscosidade do ar, gravidade e características físicas das gotículas de agrotóxicos (densidade e tamanho das partículas), deixando algumas variáveis de característica não linear fora do seu modelo. Observações experimentais, como

descritas por Pimentel (1995), apontam resultados à deriva decorrente da aplicação aérea de agrotóxicos pode atingir uma distância de 32 km da área-alvo, dados que podem contribuir para ampliação de buffer zones e elaboração de legislações estimariam uma distância adequada para o alouçamento das comunidades. Dados que devem ser relacionados a Instrução Normativa e correlacionados ao equilíbrio de mercado, seguindo o teorema de Coase e direitos de propriedade, onde é direcionado a relevância dos dados destacados anteriormente para um controle econômico, tecnológico e científico, onde o conhecimento da distribuição e grau de contaminação, estabelece condições favoráveis para a saúde pública e o desenvolvimento de produtos agrícolas por meio de contribuição científica e tecnológica.

A complexidade na descrição de fenômenos turbulentos está relacionada diretamente com o alto custo computacional, que é cobrado durante a análise de modelos com base em CFD (JADIDI *et al.*, 2016).

6 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Através da primeira fase, revisão bibliográfica e análise dos modelos característicos de turbulência, foi possível compreender a descrição das características físicas presentes no fenômeno turbulento, a modelagem matemática e físico estatística, onde as descrições analíticas exploradas nesta fase foram vinculadas à segunda fase da dissertação, que corresponde a abordagens numéricas. É necessária a análise conjunta de dados entre estudos de cobertura efetiva com quantidade mínima de agrotóxicos e a dispersão de partículas em escoamentos turbulentos, para estabelecer uma compreensão do tamanho ótimo das gotículas pulverizadas em relação às variações dos escoamentos turbulentos locais, características biológicas do plantio e dos seres vivos que se deseja controlar. A respeito do ótimo das gotículas, estudos de engenharia agrícola e ambiental devem investir no desenvolvimento de tecnologias para obter uma pulverização com diâmetro mediano volumétrico com melhor grau de homogeneidade.

Ressaltamos que o presente trabalho realizou discussões em áreas distintas do conhecimento, estabelecendo conexões entre teoria econômica, estudos ambientais, interações biológicas, modelagem matemática, física, estatística e sistemas complexos, sendo meio de difusão científica para pesquisadores que desejam trabalhar multidisciplinarmente com o tema agrotóxico ou turbulência. Para trabalhos futuros desenvolveremos o estudo de deriva em terrenos com topografia complexa (terreno com aclives e declives acentuados), já que as plumas de poluentes se dispersam de modo diferente na presença de obstáculos (JANINI *et al.*, 2016).

REFERÊNCIAS

- ACHESON, D. J. **Elementary Fluid Dynamics**: Oxford Applied Mathematics and Computing Science Series. Oxford: Clarendon Press, 1990. 397 p.
- AGUIAR, C. E.; RUBINI, G. A aerodinâmica da bola de futebol. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 26, n. 4, p.297-306, dez. 2004. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172004000400003>. Acesso em: 22 set. 2016.
- AHOLA, Helena. **Vegetated buffer zone project of the Vantaa River river basin**, Geografisk Tidsskrift 89.22-25. Kobenhavn, 1989. Disponível em: <<https://tidsskrift.dk/index.php/geografisktidskrift/article/view/5543/10508>>. Acesso em: 22 set. 2016.
- ANVISA. **Resíduos de agrotóxicos em alimentos**, Informe Técnico Institucional, Ver. Saúde Pública, 40(2):361-3, 2006. Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/rsp/v40n2/28547.pdf>>. Acesso em: 12 jul. 2017.
- ASSIS, Thiago Albuquerque de et al. Geometria fractal: propriedades e características de fractais ideais. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 30, n. 2, p.2304.1-2304.10, 2008. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-11172008000200005>. Acesso em 17 mar. 2016.
- BARBON, Amarildo; GOMES, Júlio. Simulação das emissões atmosféricas sobre o município de Araucária com uso do modelo AERMOD. **Engenharia Sanitaria e Ambiental**, v. 15, n. 2, p.129-140, jun. 2010. Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/esa/v15n2/a05v15n2.pdf>>. Acesso em: 12 jul. 2016.
- BATCHELOR, G. **An Introduction to Fluid Dynamics**, Cambridge University Press, 2000.
- BENSUSAN, Nurit. **Seria Melhor Mandar Ladrilhar?**: Biodiversidade, Como, Para que e por quê. 2. ed. Peirópolis: Edu Unb, 2008.
- BRASIL. AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA. **Índice Monográfico**. 2017. Disponível em: <<http://portal.anvisa.gov.br/documents/111215/117782/D27++24-D.pdf/8548d5b3-f306-49df-ac49-4498bc5768d8>>. Acesso em: 18 ago. 2017.
- BETTINI, Paulo Cesar et al. Avaliação da deposição de gotas em pulverizações terrestres e aérea na cultura do algodoeiro. In: CONGRESSO BRASILEIRO DO ALGODÃO, 6, 2007, Uberlândia. **Anais...**. Uberlândia, 2007. p. 1 - 4.
- BOLOTNOV, Igor A. et al. Spectral analysis of turbulence based on the DNS of a channel flow. **Computers & Fluids**, v. 39, n. 4, p.640-655, abr. 2010. Elsevier BV. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793009001741>>. Acesso em; 20 abr. 2016.

BRAIBANTE, Mara Elisa Fortes; ZAPPE, Janessa Aline. A Química dos Agrotóxicos. **Química Nova na Escola**, v. 34, n. 1, p.10-15, fev. 2012.

BRANCO, Evandro Albiach. **Capital Natural, Crescimento econômico e riqueza**: reflexões a partir da abordagem e modelagem de sistemas complexos. 2012. 185 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Modelagem de Sistemas Complexos, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.

CAVALCANTI, Clóvis. Concepções da economia ecológica: suas relações com a economia dominante e a economia ambiental. **Estudos Avançados**, v. 24, n. 68, p.53-67, 2010.

CARLI, Henrique. **Sistemas complexos, séries temporais e previsibilidade**. 2011. 108 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Instituto de Física Armando Dias Tavares, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011.

CHAVES, Leslie; FACHIN, Patrícia. **Agrotóxicos proibidos em vários países são usados no Brasil**. 2015. Disponível em: <<http://www.cartamaior.com.br/?/Editoria/Meio-Ambiente/Agrotoxicos-proibidos-em-varios-paises-sao-usados-no-Brasil/3/34320>>. Acesso em: 24 ago. 2016.

CHAIM, Aldemir; VALARINI, Pedro José; PIO, Luiz Cesar. Avaliação de perdas na pulverização de agrotóxicos na cultura do feijão. **Pesticidas: Revista de Ecotoxicologia e Meio Ambiente**, Curitiba, v. 10, n. 1, p.13-22, 31 dez. 2000. Universidade Federal do Paraná.

CHAIM, Aldemir; VALARINI, Pedro José. Eficiência de deposição de agrotóxicos em culturas rasteiras. **Impacto ambiental da agricultura irrigada em Guaíra - SP**. Jaguariúna: Embrapa Meio Ambiente, p.91-114, 2006. Disponível em: <http://www.agencia.cnptia.embrapa.br/Repositorio/Chaim_EficienciaDeposicao_000fdt029px02wx5eo0a2ndxyze25yxf.pdf>. Acesso em: 09 set. 2016.

CHORIN, Alexandre; MARSDEN, Jerrold E. **A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics**. California: Springer-Verlag Publishing Company, 2000.

COURANT, Richard; FRIEDRICHS, K. O. **Supersonic Flow and Shock Waves**, Springer-Verlag Company, 1976.

COURSHEE, R. J. Some Aspects of the Application of Insecticides. **Annual Review Of Entomology**, v. 5, n. 1, p.327-352, jan. 1960. Annual Reviews.

CUNHA, João Paulo Arantes Rodrigues da. Simulação da deriva de agrotóxicos em diferentes condições de pulverização. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 32, n. 5, p.1616-1621, out. 2008. Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/cagro/v32n5/39.pdf>>. Acesso em: 08 ago. 2017.

EMBRAPA, **Embrapa Mandioca e Fruticultura, Sistema de Produção**, 9 ISSN 1678-8796 Versão eletrônica, 2003. Disponível em: <<https://sistemasdeproducao.cnptia.embrapa.br/FontesHTML/Banana/BananaPara/agrotoxicos.htm#topo>>. Acesso em: 09 set. 2016.

FERREIRA, M. A. R; et al. **Modelagem do vento através do método lattice boltzmann**, II congresso sobre planejamento e gestão das zonas costeiras dos países de expressão

portuguesa. Disponível em: <http://www.abequa.org.br/trabalhos/projetos_250.pdf>. Acesso em: 10 set. 2016.

FERREIRA, Marcos Antonio da R. et al. Modelagem do vento através do método Lattice Boltzmann. In: CONGRESSO SOBRE PLANEJAMENTO E GESTÃO DAS ZONAS COSTEIRAS DOS PAÍSES DE EXPRESSÃO PORTUGUESA, 2, 2003, Recife. **Anais...** . Recife: Associação Brasileira de Estudos do Quaternário, 2003. p. 1 - 4.

FREIRE, Atila P. Silva; ILHA, Anderson; COLAÇO, Marcelo J. **Turbulência**, Coleção Cadernos de Turbulência, Associação Brasileira de Ciências e Engenharia Mecânica - ABCM, v.5, 2006.

FRISCH, Uriel. **Turbulence, the legacy of A.N. Kolmogorov**, Cambridge University Press, 1995.

FUKS, Maurício. Reflexões sobre o paradigma da economia ecológica para a gestão ambiental. **Estudos Avançados**, v. 26, n. 74, p.105-120, 2012. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-40142012000100008>. Acesso em: 18 ago. 2017.

GLERIA, Iram; MATSUSHITA, Raul; SILVA, Sergio da. Sistemas complexos, criticalidade e leis de potência. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 26, n. 2, p.99-108, 2004. Disponível em: < http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S1806-11172004000200004&lng=es&nrm=iso&tlng=pt>. Acesso em: 09 mai. 2016.

HARRIS, Jonathan. M.; ROACH, Brian. **Environmental and Natural Resource Economics: A Contemporary Approach**. 3. ed. Routledge: Fourth Edition, 2014.

IBAMA MMA. **Agrotóxicos avaliação ambiental**. Disponível em: <<http://www.ibama.gov.br/qualidade-ambiental/avaliacao-do-potencial-de-periculosidade-ambiental-ppa/pagina-4>>. Acesso em: 12 jan. 2012.

JADIDI, Mohammad; BAZDIDI-TEHRANI, Farzad; KIAMANSOURI, Mohsen. Embedded large eddy simulation approach for pollutant dispersion around a model building in atmospheric boundary layer. **Environmental Fluid Mechanics**, v. 16, n. 3, p. 575-601, 13 jan. 2016. Springer Nature.

KOK, Jasper F et al. The physics of wind-blown sand and dust. Iopscience: **Reports on Progress in Physics**, 75 106901, p. 1-119. set. 2, 2012.

KOLMOGOROV, A. N. **The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers**, Doklady Akademiia Nauk SSSR, v. 30, p. 301-305, 1941.

KRAICHNAN, R. H. **Inertial-Range Spectrum of hydromagnetic turbulence**, Phys. Fluids, 8, 1385–1387, 1965.

LISBOA, Henrique de Melo. Metodologia e Dispersão Atmosférica, **Controle da poluição atmosférica**, p. 1-48, Montreal, 2007.

LONDRES, Flavia. Agrotóxicos no Brasil: um guia para ação em defesa da vida. Rio de

Janeiro: Assessoria e Serviços A Projetos em Agricultura Alternativa, 2011.

LOSSO, Rodrigo de; ALMEIDA, Sérgio. **Economia: externalidades**, São Paulo: Univesp - Universidade Virtual do Estado de São Paulo, 2015.

MANN, Sehvilla. **Pesticide Drift Killing Crops and Making Hoosiers Sick**. 2013.
Disponível em: <<http://indianapublicmedia.org/news/drifting-pesticides-blow-53262/>>.
Acesso em: 11 mar. 2016.

MARTINEZ, Denise Maria Varela. **Transição à turbulência na camada de mistura estavelmente estratificada utilizando simulação numérica direta e simulação de grandes escalas**. 2006. 168 f. Tese (Doutorado) - Curso de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2006.

MATTHEWS, G. A. **Pesticide application methods**. New York: Longman, p.336, 1982.

McCOMB, W. D. **The Physics of Fluid Turbulence**, Clarendon Press, 1990.

MONIN, A. S.; YAGLOM, A. M. **Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence**, v.1, MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1971.

MONIN, A. S.; YAGLOM, A. M.; LUMLEY, J. L. **Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence**, v.2, MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1975.

MORICONI, L. **A Física Estatística da Turbulência**, Palestra apresentada na 8ª Escola Mato-grossense de Física, 2011.

MÜLLER, G. **Economia & Ecologia e Agricultura Sustentável**, UNESP, IGCE-DEPLAN, Rio Claro, 1999.

MURPHY, S. D.; MILLER, P. C. H.; PARKIN, C. S. The effect of boom section and nozzle configuration on the risk of spray drift. **Journal of Agricultural Engineering Resource, London**, v. 75, p. 127-137, 2000.

NACHBIN, André. **Dinâmica dos Fluidos**, Programa de Pós Graduação Doutorado: Dinâmica dos Fluidos, Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada – IMPA, 2015.
Disponível em:
<http://www.impa.br/opencms/pt/ensino/doutorado/disciplinas_doutorado/disciplinas_catalogo_2011/disciplinas_doutorado_dinamica_fluidos_>. Acesso em 22 jan. 2016.

NETEF. Universidade de São Paulo. Fundamentos da Mecânica dos Fluidos (SEM0403): Aula 21. São Carlos, 2009. Departamento de Engenharia Mecânica. Disponível em:
<<http://www.sem.eesc.usp.br/index.php/es/personales/maestros/73-fundamentos-da-mecanica-dos-fluidos-sem0403>>. Acesso em: 1 mar. 2015.

PEREIRA, R. S. **Gestão para o desenvolvimento econômico sustentável**, São Paulo, Ed. Globus, 2013.

PERES, F.; MOREIRA, J. C. **É veneno ou é remédio? agrotóxicos, saúde e ambiente**, Ed. FIOCRUZ, 2003. Disponível em: <<http://books.scielo.org/id/sg3mt>>. Acesso em: 16 ago. 2016.

PIMENTEL, David. **Amounts of pesticides reaching target pests: environmental impacts and ethics**. Journal of Agricultural and Environmental Ethics, v. 8, n. 1, p. 25, 1995.

RIBEIRO, D. H. B.; VEIRA, E. Avaliação do potencial de impacto dos agrotóxicos no meio ambiente, **Centro de P&D de Proteção Ambiental**, n. 124, São Paulo, 2010. Disponível em: <http://www.biologico.sp.gov.br/artigos_ok.php?id_artigo=124#>. Acesso em: 18 ago. 2016.

RICHARDSON, L. F. **Weather prediction by numerical process**, Cambridge University Press, 1922.

SEAGATEWORLD. **What is Pesticide drift and GMO Drift and How to Control Them**, 2015. Disponível em: <<http://www.seagateworld.com/2015/08/what-is-pesticide-drift-and-gmo-drift-and-how-to-control-them/>>. Acesso em: 11 mar. 2016.

SILVEIRA, N. A. **Fundamentos da turbulência nos fluidos**. Federal de Uberlândia. Campus Santa Mônica. Uberlândia. Minas Gerais, 2002.

SINITOX. **Estatística anual de casos de intoxicação e envenenamento: Brasil - 2000**. Rio de Janeiro: Centro de Informações Científica e Tecnológica, Fiocruz, 2003.

SORES, Danielle de Almeida Mota; SILVA, Guilherme da; TORREZAN, Raphael Guilherme Araujo. Aplicação Ambiental do Teorema de Coase: o caso do mercado de créditos de carbono. **Revista Iniciativa Ecológica**, São Paulo, v. 2, n. 2, jan. 2015.

SOARES, Wagner Lopes. **Uso dos agrotóxicos e seus impactos à saúde e ao ambiente**: uma avaliação integrada entre a economia, a saúde pública, a ecologia e a agricultura. 2010. 150 f. Tese (Doutorado) - Curso de Saúde Pública e Meio Ambiente, Instituto de Comunicação e Informação Científica e Tecnológica, Fundação Oswaldo Cruz, Escola Nacional de Saúde Pública Sergio Arouca, Rio de Janeiro, 2010.

SOARES, Wagner Lopes; PORTO, Marcelo Firpo. Atividade agrícola e externalidade ambiental: uma análise a partir do uso de agrotóxicos no cerrado brasileiro. **Ciência & Saúde Coletiva**, v. 12, n. 1, p.131-143, mar. 2007.

SOUZA, José Francisco Almeida de et al. Uma revisão sobre a turbulência e sua modelagem. **Revista Brasileira de Geofísica**, v. 29, n. 1, p.21-41, mar. 2011.

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

SUMNER, P. E. **Reducing spray drift**. Georgia: University of Georgia, p. 11, 1997.

WAIBEL, H.; FLEISCHER, P.; KENMORE, F. **Evaluation of IPM Programs - Concepts and Methodologies**. Papers presented at the First Workshop on Evaluation of IPM Programs, Hannover. Pesticide Policy Project, Publication Series, n. 8, Hannover, 1998.

WHITHAM, G. **Linear and Nonlinear Waves**. New York, John Wiley, 1974.

WILSON, A. **Boltzmann, Lotka and Volterra and spatial structural evolution: an integrated methodology for some dynamical systems**, Centre for Advanced Spatial Analysis, University College London, Journal of The Royal Society Interface, 2008.

WOLF, R. E. **Strategies to reduce spray drift**. Kansas: Kansas State University, p. 4, 2000.

ZANNETE, P. **Air pollution modeling**. Ed. Van Nostrand Reinhold, p. 717, USA, New York, 1990.

ZHU, H. et al. **Simulation of drift of discrete sizes of water droplets from field sprayers**. Transactions of the ASAE, Saint Joseph, v. 37, n. 5, p. 1401-1407, 1994.