

Artigo

Um Estudo Comparativo Entre Coeficientes de Difusão Verticais na Simulação da Dispersão de Poluentes em uma Camada Limite Convectiva

Maria de Fatima Silva Leite¹, Davidson Martins Moreira^{1,2*}¹*Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, Brasil.*²*Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional e Tecnologia Industrial, Serviço Nacional de Aprendizagem Industrial, Centro Integrado de Manufatura e Tecnologia, Salvador, BA, Brasil.*

Recebido: 23/07/2015 – Aceito: 27/12/2015

Resumo

Este trabalho apresenta um estudo comparativo entre diferentes coeficientes de difusão verticais aplicados em um modelo de dispersão para determinação da concentração de poluentes atmosféricos em uma camada limite convectiva. O modelo de dispersão é uma solução semi-analítica da equação de difusão-advecção tridimensional e estacionária, sendo que os resultados das simulações foram confrontados com dados experimentais da literatura. As melhores performances foram obtidas com o coeficiente de difusão proveniente da teoria estatística de Taylor e propriedades espectrais. Entretanto, resultados menos satisfatórios foram obtidos com a parametrização *Asymmetric Convective Model version 2* (ACM2), muito usada como uma das opções para camada limite atmosférica no modelo de mesoescala *Weather Research and Forecasting* (WRF).

Palavras-chave: coeficiente de difusão; equação de difusão-advecção; camada limite convectiva.

Comparison Between Vertical Eddy Diffusivities in the Simulation of Pollutant Dispersion in a Convective Boundary Layer

Abstract

This work presents a comparative study between different vertical eddy diffusivities applied in a dispersion model to determine the concentration of air pollutants in a convective boundary layer. The dispersion model is a semi-analytical solution of stationary three-dimensional advection-diffusion equation and the simulation results were compared with experimental data from literature. The best performances were obtained with the eddy diffusivity from Taylor's statistical theory and spectral properties. However, less satisfactory results were obtained with the parameterization *Asymmetric Convective Model version 2* (ACM2), often used as one of the options for the atmospheric boundary layer in the mesoscale model *Weather Research and Forecasting* (WRF).

Keywords: eddy diffusivity; advection-diffusion equation; convective boundary layer.

1. Introdução.

Os processos de industrialização e urbanização têm sido crescentes e constantes, de forma que os grandes centros urbanos vivenciam os impactos que a degradação da qualidade do ar acarreta na qualidade de vida da população e também no meio ambiente de modo geral. Em consequência disto, a comunidade científica vêm buscando meios que visem o entendimento dos processos de disper-

são das emissões de poluentes na atmosfera e o seu controle, de forma que os modelos de dispersão surgem como uma alternativa prática e rápida por permitirem estudar a dispersão de poluentes de forma controlada.

A eficácia dos modelos de dispersão Eulerianos (teoria K) está relacionada diretamente a uma adequada parametrização do coeficiente de difusão (K), por estes serem os responsáveis pela descrição do comportamento físico da difusão de poluentes na atmosfera. Vários pesquisadores

vêm contribuindo com estudos voltados à modelagem física da camada limite atmosférica (CLA) através do desenvolvimento de novas parametrizações para o coeficiente de difusão. Diante da vasta literatura, citam-se os trabalhos: Hanna (1982), Panofsky e Dutton (1988), Pleim e Chang (1992), Degrazia *et al.* (1997), Seinfeld e Pandis (1997), Degrazia *et al.* (2000; 2001), Ulke (2000) e Pleim (2007). Salienta-se que a parametrização de Pleim (2007) é uma das opções do modelo de mesoescala *Weather Research and Forecasting* (WRF) (ACM2 - *Asymmetrical Convective Model 2*) quando da escolha da parametrização de CLA. Portanto, na resolução de problemas de difusão atmosférica, a escolha de uma parametrização de turbulência representa um aspecto fundamental também para a modelagem da dispersão de poluentes. A acurácia de cada modelo depende fortemente da maneira com que os parâmetros turbulentos são calculados e está relacionada à atual compreensão da CLA (Mangia *et al.*, 2002). Além disto, cabe ressaltar que a modelagem da CLA durante condições convectivas tem sido a maior fonte de incertezas na modelagem numérica de condições meteorológicas e qualidade do ar. Grande parte da dificuldade decorre da grande gama de escalas de turbulência que são efetivas na camada limite convectiva (CLC).

A dispersão de poluentes na CLA tem chamado a atenção de pesquisadores de muitas formas. Alguns têm trabalhado com o foco no impacto ambiental e análise de riscos; outros têm trabalhado nos vários aspectos da modelagem como condições meteorológicas, mecanismos de dispersão, mecanismos de remoção, características topográficas, etc. Invariavelmente, a modelagem matemática tem sido o caso de muitos destes estudos. A importância e a necessidade de modelagem matemática são bem conhecidas na comunidade científica. Existem várias aproximações que têm sido efetivamente usadas para avaliar a dispersão de poluentes atmosféricos (Zanetti, 1990; Lin e Hildemann, 1997; Arya, 1999; Tirabassi, 2003). Na realidade, o fenômeno de difusão turbulenta na atmosfera não tem uma única formulação, no sentido que nenhuma aproximação que tenha sido proposta tem a capacidade de explicar todos os fenômenos observados (Arya, 1995). Porém, soluções analíticas ou semi-analíticas de equações são de fundamental importância no entendimento e descrição de um fenômeno físico. Além disso, tendo em mente que os erros inerentes ao modelo matemático são devidos à modelagem matemática do fenômeno físico e a solução da equação matemática, se observa que a solução analítica, de alguma maneira, elimina o erro numérico da solução da equação exceto pelo erro de arredondamento. Como consequência, torna possível fazer uma análise mais real do erro que aparece na modelagem matemática do fenômeno físico com menor custo computacional. Neste contexto, a modelagem matemática é uma nova direção científica que usa amplamente a matemática e a computação científica e está

orientada ao aproveitamento de métodos matemáticos avançados, os quais podem ser utilizados na solução de problemas de multifísica.

Portanto, o objetivo deste trabalho é realizar uma análise comparativa de diferentes coeficientes de difusão usando uma solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção para simular a dispersão de poluentes na atmosfera, com o intuito de contribuir para o avanço científico em problemas que envolvem a qualidade do ar, com particular atenção na parametrização da turbulência. Para tal fim, este artigo está organizado da seguinte maneira: na seção 2 é apresentada a solução da equação de difusão-advecção tridimensional estacionária; na seção 3 mostra-se a parametrização utilizada no modelo, incluindo os coeficientes de difusão verticais, o coeficiente de difusão lateral e o perfil de vento; a seção 4 apresenta uma breve descrição dos tradicionais dados do experimento de Copenhagen e resultados das simulações, além da avaliação da convergência numérica do modelo e, finalmente, na seção 5, são mostradas as conclusões do trabalho.

2. Solução da equação tridimensional estacionária

Considerando-se um sistema Cartesiano de coordenadas em que a direção x coincide com a do vento médio, a equação de difusão-advecção transiente pode ser escrita como (Blackadar, 1997):

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

onde C representa a concentração média dos poluentes; u , v e w são as componentes do vento médio nas direções x , y e z , respectivamente, e K_x , K_y , K_z são os coeficientes de difusão turbulenta nas direções x , y e z , respectivamente; S é o termo fonte/sumidouro.

Considerando-se as seguintes hipóteses simplificativas: estado estacionário; velocidade do vento predominante na direção do eixo x ($v = w = 0$) e termo fonte/sumidouro nulo, a Eq. (1) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2)$$

para $0 < z < h$, $0 < y < L_y$ e $x > 0$, onde L_y representa um comprimento na direção y que satisfaça determinada condição de contorno.

A descrição matemática do problema de dispersão da Eq. (2) é completada por condições de contorno. Na direção z , os poluentes são submetidos às condições de contorno de fluxo zero no solo e no topo da CLC:

$$K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0, h \quad (3a)$$

onde h é altura da CLC. Na direção y , têm-se as condições:

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y. \quad (3b)$$

Além das condições acima, assume-se uma fonte pontual contínua com taxa de emissão Q na altura H_s , descrita por:

$$uC(0, y, z) = Q\delta(z - H_s)\delta(y - y_0) \quad \text{em } x = 0 \quad (3c)$$

onde δ é a função Delta de Dirac, H_s indica a altura da fonte e y_0 indica a posição da fonte na direção transversal.

Para resolver a Eq. (2), considerando-se turbulência não homogênea na direção vertical, aplica-se o método ADMM (Moreira e Vilhena, 2009). A idéia desse método consiste em dividir a CLA em subcamadas, ou seja, o domínio da variável z é dividido em vários subdomínios. Os parâmetros que dependem da altura z , tais como os coeficientes de difusão K e o perfil da velocidade do vento u , assumem valores médios constantes em cada subcamada (aproximação *stepwise*). Esta aproximação de valores médios para o coeficiente de difusão e velocidade do vento pode ser representada pelas seguintes expressões, respectivamente:

$$K_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(z) dz \quad (4a)$$

$$u_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} u(z) dz. \quad (4b)$$

Salienta-se que K_n e u_n assumem um valor constante em $z_n \leq z \leq z_{n+1}$ em cada uma das regiões. Desta forma, têm-se N problemas do mesmo tipo, acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo nas interfaces (Eqs. (6)). Assim, considerando-se turbulência não-homogênea, a Eq. (2) é reescrita da seguinte forma:

$$u_n \frac{\partial C_n}{\partial x} = K_{xn} \frac{\partial^2 C_n}{\partial x^2} + K_{yn} \frac{\partial^2 C_n}{\partial y^2} + K_{zn} \frac{\partial^2 C_n}{\partial z^2} \quad (5)$$

com $z_n \leq z \leq z_{n+1}$, $x > 0$; $0 < y < L_y$ e $n = 1, 2, \dots, N$, onde N representa o número total de subcamadas e C_n representa a concentração na n -ésima subcamada. Supondo contato perfeito entre as subcamadas nas quais a CLC foi dividida, consideram-se as condições de continuidade de concentração e fluxo nas interfaces internas:

$$C_n = C_{n+1} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (6a)$$

$$K_{zn} \frac{\partial C_n}{\partial z} = K_{z_{n+1}} \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1). \quad (6b)$$

Neste momento, para obtenção da solução tridimensional, é possível aplicar o método GITT na direção y na Eq. (5). O formalismo do método GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) (Cotta, 1993) começa com a escolha do problema auxiliar que seja similar ao problema original e as suas respectivas condições de contorno. Nesse trabalho, determina-se o problema auxiliar de Sturm-Liouville da seguinte forma:

$$\psi_i''(y) + \lambda_i^2 \psi_i(y) = 0 \quad \text{em } 0 < y < L_y \quad (7a)$$

$$\psi_i'(y) = 0 \quad \text{em } y = 0, L_y. \quad (7b)$$

A solução é $\psi_i(y) = \cos(\lambda_i y)$, onde λ_i são as raízes positivas da expressão $\sin(\lambda_i L_y) = 0$. Assim, $\lambda_0 = 0$ e $\lambda_i = i\pi/L_y$. As funções $\psi_i(y)$ e λ_i são as autofunções e autovalores, respectivamente, associados ao problema de Sturm-Liouville, satisfazendo a seguinte condição de ortonormalidade:

$$\frac{1}{\sqrt{N_i}} \frac{1}{\sqrt{N_j}} \int_0^{L_y} \psi_i(x) \psi_j(x) dx = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (8)$$

onde N_i é definida como,

$$N_i = \int_0^{L_y} \psi_i^2(x) dx. \quad (9)$$

O formalismo da GITT postula que $C_n(x, y, z)$ pode ser expresso como uma expansão em série de autofunções ortogonais $\psi_i(y)$ para a direção y , onde i é a ordem dos correspondentes autovalores λ ,

$$C_n(x, y, z) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{C_{ni}(x, z) \psi_i(y)}{N_i^{1/2}}. \quad (10)$$

Substituindo-se a Eq. (10) na Eq. (5) obtém-se:

$$\begin{aligned} u_n \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial C_{ni}(x, z)}{\partial x} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} = & \\ K_x \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x, z)}{\partial x^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} + & \\ K_y \sum_{i=0}^{\infty} C_{ni}(x, z) \frac{\psi_i''(y)}{N_i^{1/2}} + & \\ K_z \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial^2 C_{ni}(x, z)}{\partial z^2} \frac{\psi_i(y)}{N_i^{1/2}} & \end{aligned} \quad (11)$$

com ("") indicando derivada de segunda ordem. A partir da Eq. (7a) conclui-se que $\psi_i''(y) = -\lambda_i^2 \psi_i(y)$ e aplicando-se o operador $\int_0^{L_y} \frac{\psi_j(y)}{N_j^{1/2}} dy$ na Eq. (11), usando a propriedade

de ortonormalidade, a Eq. (11) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial^2 C_{ni}(x, z)}{\partial z^2} + \frac{K_x}{K_z} \frac{\partial^2 C_{ni}(x, z)}{\partial x^2} - \frac{u_n}{K_z} \frac{\partial C_{ni}(x, z)}{\partial x} - \frac{K_y}{K_z} \lambda_i^2 C_{ni}(x, z) = 0 \quad (12)$$

Para a condição de fonte (Eq. (3c)),

$$\sum_{i=0}^{\infty} u_n C_{ni}(0, z) \int_0^{L_y} \frac{\Psi_i \Psi_j}{N_i^{1/2} N_j^{1/2}} dy = \int_0^{L_y} \frac{Q \delta(z - H_s) \delta(y - y_0) \Psi_j}{N_j^{1/2}} dy \quad (13)$$

Após as devidas substituições e integrações,

$$C_n(0, z) = \frac{Q \delta(z - H_s) \Psi_i(y_0)}{u_n N_i^{1/2}} \quad \text{em } x = 0 \quad (14)$$

Para resolver a Eq. (12), aplica-se a transformada de Laplace na variável x , denotando por $\mathcal{L}\{C_n(x, z)\} = \hat{C}_n(s, z)$. A aplicação da transformada de Laplace na Eq. (12),

$$\frac{d^2 \hat{C}_n(s, z)}{dz^2} - A_n \hat{C}_n(s, z) = B_n Q \delta(z - H_s) \quad (15)$$

onde

$$A_n = \frac{(u_n s - K_x s^2 + K_y \lambda_i^2)}{K_z} \quad e \quad B_n = \frac{K_x s - u_n s}{u_n K_z} \frac{\Psi_i(y_0)}{N_i^{1/2}}$$

A Eq. (15) tem solução conhecida. Combinando-se as Eqs. (15) e (10), considerando-se a inversão numérica da transformada de Laplace por quadratura Gaussiana, então a concentração final pode ser escrita da seguinte forma (maiores detalhes no trabalho de Costa *et al.*, 2006):

$$C_n(x, y, z) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\Psi_i(y)}{\sqrt{N_i}} \left\{ \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{x} a_k \left[C_{1n} e^{G_n z} + C_{2n} e^{-G_n z} + \frac{Q}{2R_a} \left[e^{-G_n(z-H_s)} - e^{G_n(z-H_s)} \right] H(z-H_s) \right] \right\} \quad (16)$$

onde

$$G_n = \sqrt{\frac{1}{K_z} \left(\frac{P_k}{x} u_n \beta^* + K_y \lambda_i^2 \right)};$$

$$F_a = \frac{\sqrt{N_i}}{\Psi_i(y_0)} \frac{\sqrt{K_z [(P_k/x) u_n \beta^* + K_y \lambda_i^2]}}{\beta^*} \quad e$$

$$\beta^* = \left(1 - \frac{P_k}{P_e} \right).$$

$H(z - H_s)$ é a Função Heaviside e $P_e = \frac{u_n x}{K_x}$ é o Número de Peclet, que representa a relação entre o transporte di-

fusivo e o transporte advectivo (Moreira *et al.*, 2005); as constantes a_k e p_k são os pesos e as raízes do esquema de quadratura Gaussiana, tabulados em Stroud e Secrest (1996); M é o número de pontos da quadratura.

3. Parametrizações

3.1. Coeficientes de difusão verticais

A presença de turbulência é a principal característica da CLC, pois é responsável pela alta capacidade difusiva. Esta característica é representada na Eq. (1) pelos coeficientes de difusão. A escolha adequada de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para complementar a modelagem do transporte de poluentes na atmosfera, uma vez que, relacionam-se os fenômenos naturais com os modelos matemáticos, na tentativa de descrever a física envolvida no processo. Para avaliar a importância da difusividade turbulenta vertical ante a solução semi-analítica tridimensional, testam-se neste trabalho cinco parametrizações para uma atmosfera instável.

O primeiro coeficiente de difusão a ser testado foi proposto por Degrazia *et al.* (1997) e desenvolvido a partir da teoria da difusão estatística de Taylor e do espectro de energia turbulenta, sendo dado por:

$$K_z = 0,22 w_* h \left(\frac{z}{h} \right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-4 \frac{z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(8 \frac{z}{h}\right) \right] \quad (17)$$

onde h é a altura da camada limite convectiva e w_* é a escala de velocidade convectiva.

A segunda parametrização testada são as expressões empíricas propostas por Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997), sendo dadas por:

$$K_z = w_* h 2,5 \left(k \frac{z}{h} \right)^{\frac{4}{3}} \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{\frac{1}{4}} \quad 0 \leq \frac{z}{h} < 0,05 \quad (18)$$

$$K_z = w_* h \left[0,021 + 0,408 \left(\frac{z}{h} \right) + 1,351 \left(\frac{z}{h} \right)^2 - 4,096 \left(\frac{z}{h} \right)^3 + 2,560 \left(\frac{z}{h} \right)^4 \right] \quad 0,05 \leq \frac{z}{h} \leq 0,6 \quad (19)$$

$$K_z = w_* h 0,2 \exp \left[6 - 10 \left(\frac{z}{h} \right) \right] \quad 0,6 < \frac{z}{h} < 1,1 \quad (20)$$

$$K_z = w_* h 0,0013 \quad \frac{z}{h} > 1,1 \quad (21)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov e $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán.

O terceiro coeficiente de difusão testado foi o sugerido por Degrazia *et al.* (2001), e válido também para grandes tempos de difusão, estimado a partir da Teoria Estatística de Taylor e de propriedades espectrais, dado por:

$$K_z = 0,19w_* h \varphi^3 \left[1 - \exp\left(-4 \frac{z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(8 \frac{z}{h}\right) \right]^4 \quad (22)$$

onde

$$\varphi = 1,5 - 1,2 \left[\left(\frac{z}{h} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (23)$$

é a taxa de dissipação molecular (Druilhet *et al.*, 1983).

O quarto coeficiente de difusão testado foi desenvolvido por Ulke (2000), e é expresso por:

$$K_z = ku_* h \left(\frac{z}{h} \right) \left(1 - \frac{z}{h} \right) \left(1 - 22 \frac{h}{L} \frac{z}{h} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (24)$$

onde u_* é a velocidade de fricção.

Finalmente, a quinta parametrização usada nas simulações está descrita no trabalho de Pleim (2007) (ACM2), a qual foi obtida através da combinação de termos que levam em conta o caráter local e não-local no fechamento da turbulência. A expressão para tal coeficiente de difusão vertical, considerando atmosfera sob condições instáveis é definida como:

$$K_z = K_z(z)(1 - f_{conv}) \quad (25)$$

com

$$K_z(z) = k \frac{u_*}{\varnothing \left(\frac{z_s}{L} \right)} z \left(1 - \frac{z}{h} \right)^2, \quad (26)$$

$$f_{conv} = \left[1 + \frac{k^{-\frac{2}{3}}}{0,1a} \left(-\frac{h}{L} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (27)$$

$$\varnothing = \left(1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

onde $a = 7,2$; $z_s = \min(z, 0.1h)$; f_{conv} é o parâmetro que controla o grau de comportamento local vs. não-local.

3.2. Coeficiente de difusão lateral

O coeficiente de difusão lateral foi modelado a partir da expressão proposta por Tangermann (1978), da seguinte forma:

$$K_y = K_z^{\max} \quad (29)$$

onde K_z é o coeficiente de dispersão vertical proveniente das expressões anteriores, onde apresenta o seu valor máximo.

Apesar da solução do modelo matemático explicitamente levar em conta a difusão longitudinal, este trabalho não levou em consideração este termo, desprezando-se as condições de vento fraco ($K_x = 0$).

3.3. Perfil vertical do vento

Neste estudo o perfil vertical da velocidade média do vento é parametrizado de acordo com a equação de similaridade (Panofsky e Dutton, 1988), definida como:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \Psi_m\left(\frac{z_0}{L}\right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b \quad (30)$$

onde z_0 é o comprimento de rugosidade do terreno, $z_b = \min[|L|, 0.1h]$ e Ψ_m é a função estabilidade expressa por (Paulson, 1970):

$$\Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = \ln\left(\frac{1+\epsilon^2}{2}\right) + \ln\left(\frac{1+\epsilon}{2}\right)^2 - 2 \arctan \epsilon + \frac{\pi}{2} \quad \text{para } \frac{1}{L} < 0 \quad (31)$$

com

$$\epsilon = \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (32)$$

4. Dados experimentais e Resultados

A fim de verificar-se a consistência física do modelo, o presente trabalho têm como base os tradicionais dados experimentais de Copenhagen descrito nos trabalhos de Gryning e Lyck (2002). Os experimentos foram realizados ao norte da cidade de Copenhagen, onde o gás traçador Hexafluoreto de Enxofre (SF_6) foi liberado, sem empuxo, de uma torre de 115 m de altura e coletado ao nível do solo ($z \sim 0$). As unidades de amostragem foram posicionadas em distâncias de 2-6 km do ponto de lançamento. A liberação do traçador teve início 1 h antes da amostragem e parou ao final do mesmo período de 1 h. A região do experimento era plana com um comprimento de rugosidade de 0,6 m. Cabe ressaltar que poucos trabalhos na literatura apresentam resultados com dados tridimensionais de concentração do experimento de Copenhagen, os quais normalmente usam somente os dados bidimensionais. A Tabela 1 abaixo mostra os dados micrometeorológicos usados nas simulações do presente trabalho.

Na Tabela 1 a altura da camada limite atmosférica h foi estimada a partir de dados de radiossondagem, as quais foram realizadas próximas da torre de lançamento do traçador. O comprimento de Monin-Obukhov L foi determinado segundo um método idealizado por Golder (1972), no qual

Tabela 1 - Parâmetros micrometeorológicos dos experimentos de Copenhagen.

Exp.	u (m/s)	u* (m/s)	L (m)	w* (m/s)	h (m)
1	3,4	,36	-37	1,8	1980
2	10,6	,73	-292	1,8	1920
3	5,0	,38	-71	1,3	1120
4	4,6	,38	-133	0,7	390
5	6,7	,45	-444	0,7	820
6	13,2	1,05	-432	2,0	1300
7	7,6	,64	-104	2,2	1850
8	9,4	,69	-56	2,2	810
9	10,5	,75	-289	1,9	2090

conhecendo-se o número de Richardson Ri se pode estimar L através da relação $L^{-1} = Ri/z$.

Uma avaliação do vento medido experimentalmente comparado com a Eq. (30) é mostrada na Fig. 1. Uma medida foi obtida a 10 m e outra na altura da fonte, 115 m. Observa-se uma boa concordância dos valores de vento medidos e fornecidos pela Eq. (30).

A Fig. 2 mostra o gráfico da concentração ao nível do solo em função da distância da fonte usando os dados do Experimento 8 de Copenhagen com as várias parametrizações. Observa-se que para distâncias acima de 5 km a concentração gerada por todas as parametrizações tendem a valores similares. A menor distância em que foi medida a concentração no Experimento de Copenhagen foi 1900 m. Portanto, a concentração máxima para a todas as parametrizações usadas neste trabalho foi obtida para distâncias menores. As parametrizações de Ulke e Degrazia *et al.* (1997) apresentam comportamentos muito similares, inclusive na localização da concentração máxima (~ 500 m). A parametrização de Lamb e Durran apresenta o valor de

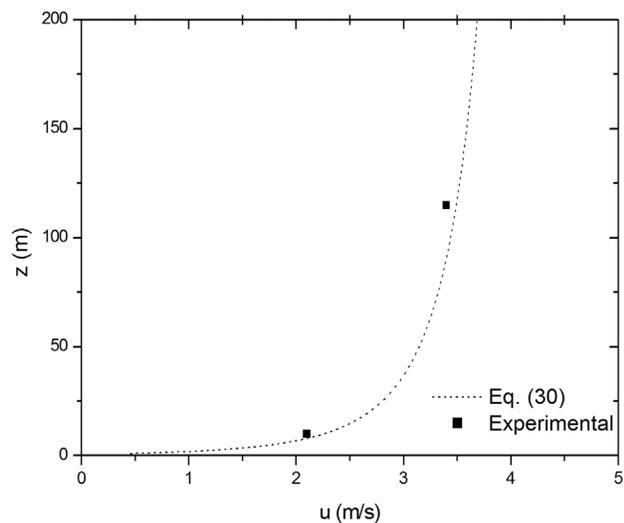


Figura 1 - Perfil de velocidade obtida pela Eq. (30) comparada com a obtida experimentalmente na torre de emissão do traçador.

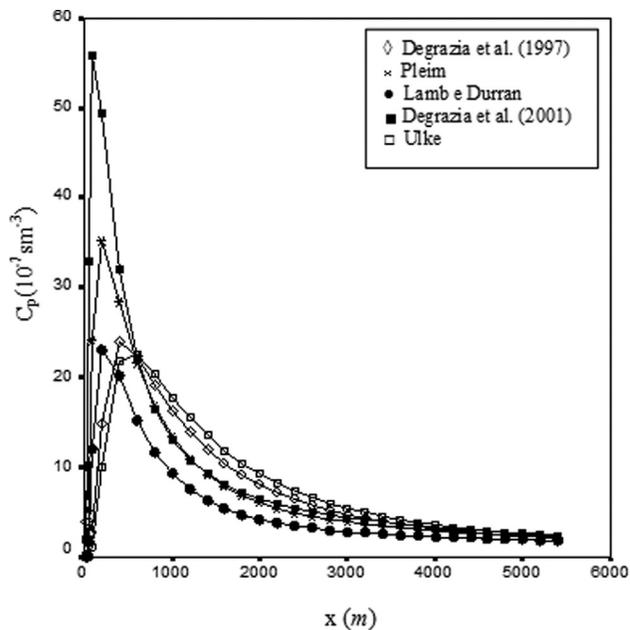


Figura 2 - Concentração ao nível do solo em função da distância da fonte usando dados do Experimento 8 de Copenhagen.

concentração máxima similar, porém a localização do máximo é em torno de 100 m. Da mesma forma, a localização do máximo para as parametrizações de Pleim e Degrazia *et al.* (2001) são similares (~ 100 m), entretanto esta última apresenta o maior valor de concentração de pico.

A Fig. 3 mostra o gráfico de espalhamento dos dados de concentrações observadas (C_o) no experimento em comparação com os dados de concentrações previstas (C_p) pelo modelo, normalizadas pela taxa de emissão Q , de acordo com as diferentes parametrizações para o coeficiente de difusão vertical considerando a CLA dividida em regiões de 5 m.

Observa-se na Fig. 3 uma boa concordância dos resultados obtidos pelo modelo de dispersão com aos coeficientes de difusão propostos por Ulke (2000), Degrazia *et al.* (1997), Degrazia *et al.* (2001) e Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997). Os resultados de concentração obtidos com a formulação de Pleim (2007) não apresentaram um bom desempenho, seja por superestimação ou subestimação em alguns casos (resultados fora da linha pontilhada indicam que não estão entre 0,5 e 2).

A comparação entre os dados de concentração simulados no modelo com os dados observados nos experimentos de Copenhagen também pode ser feita a partir da análise de indicadores estatísticos propostos por Hanna (1989), os quais são definidos como:

$$\text{Nmse (Erro Quadrático Médio Normalizado)} = \frac{(C_o - C_p)^2}{C_o C_p};$$

$$\text{Fa2} = \text{fração de dados (\%)} \text{ que estão entre } 0,5 \leq (C_p / C_o) \leq 2;$$

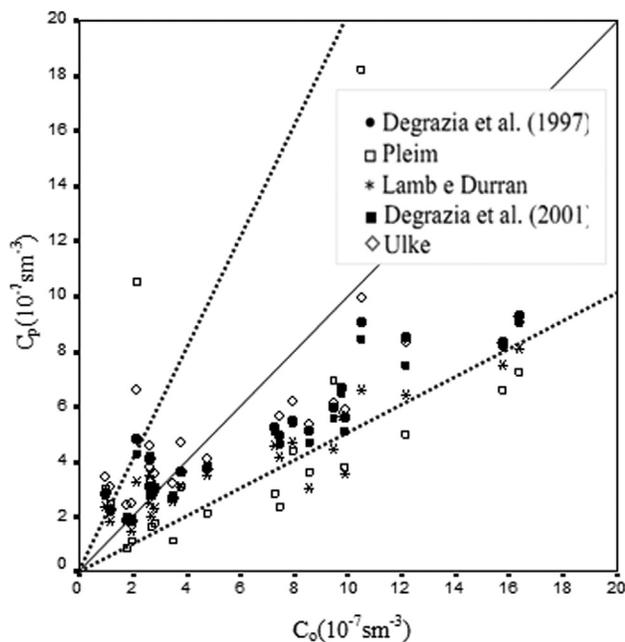


Figura 3 - Gráfico de espalhamento dos dados de concentrações observadas (C_o) com os dados de concentrações previstas (C_p) pelo modelo para as diferentes parametrizações.

$$\text{Cor} = \frac{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}{\sigma_o \sigma_p};$$

$$\text{Fb} = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_p})}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})};$$

$$\text{Fs} = \frac{(\sigma_o - \sigma_p)}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)}$$

onde C_o e C_p são as concentrações observadas e previstas pelo modelo, respectivamente, e σ é o desvio padrão. Os valores ótimos são: Nmse, Fb e Fs iguais a 0 e Fa2 e Cor iguais a 1.

A Tabela 2 apresenta os resultados dos indicadores estatísticos obtidos a partir da solução tridimensional de acordo com os diferentes coeficientes de difusão vertical.

Através da Tabela 2 é possível observar que os resultados obtidos com a inserção das parametrizações no modelo de dispersão propostas por Degrazia *et al.* (2001) e Lamb e Durran (Seinfeld e Pandis, 1997) apresentaram forte correlação com os dados experimentais, pois o índice estatístico *Cor* resultou em valores acima de 0,90 (ou 90%). As parametrizações sugeridas por Ulke (2000) e Degrazia

Tabela 2 - Indicadores estatísticos de desempenho da solução tridimensional considerando-se as diferentes parametrizações.

Parametrização	Nmse	Cor	Fa2	Fb	Fs
Ulke	0,28	0,86	0,87	0,17	0,74
Degrazia <i>et al.</i> (1997)	0,31	0,89	0,87	0,22	0,76
Lamb e Durran	0,59	0,92	0,74	0,48	0,84
Degrazia <i>et al.</i> (2001)	0,34	0,94	0,91	0,31	0,74
Pleim	0,77	0,47	0,43	0,34	0,18

et al. (1997) apresentaram um valor relativamente menor, mas também satisfatório. De forma geral, os resultados estatísticos são comparáveis para quase todas as parametrizações, pois se interceptam no limite de confiança (não mostrado), exceto a parametrização de Pleim (2007).

4.1. Análise da convergência

Uma tarefa importante é a demonstração da convergência da inversão numérica da transformada de Laplace e do somatório do número de autovalores. Neste sentido, a Fig. 4 apresenta o comportamento da convergência da solução do modelo, de acordo com a parametrização proposta por Degrazia *et al.* (2001), usando dados do experimento número 8 de Copenhagen (detalhes em Gryning e Lyck (2002)). Para tal verificação, foram considerados 4, 8 e 16 pontos (N_p) para o esquema de quadratura Gaussiana; $N_A = 150$ autovalores e distâncias da fonte de $x = 500$ m, $x = 3000$ m e $x = 8000$ m. As discretizações verticais testadas foram: $\Delta z = 5$ m, $\Delta z = 30$ m e $\Delta z = 50$ m.

Uma análise geral do processo de convergência da solução atenta para uma dificuldade de se atingir a convergência para posições localizadas mais distantes da fonte. Pode-se observar na Fig. 4, que a convergência da solução ocorre para menores valores de N_A mais rapidamente considerando $N_p = 16$, $\Delta z = 5$ m e distância $x = 500$ m. De modo geral, como esperado, a variação da discretização afeta a convergência de acordo com os números de pontos para o esquema de quadratura Gaussiana. Ou seja, para distâncias maiores deve-se ter uma maior resolução (Δz menor) com maior número de pontos da quadratura.

5. Resumo e Conclusões

Neste trabalho, foi investigada a sensibilidade de uma solução semi-analítica da equação de difusão-advecção tridimensional e estacionária na estimativa de concentrações de poluentes para diferentes parametrizações do coeficiente de difusão vertical em condições moderadamente instáveis. As simulações e comparações feitas com o modelo de dispersão sugerem melhores resultados estatísticos para o coeficiente de difusão proposto por Degrazia *et al.* (2001). Entretanto, as outras parametrizações também apresentam resultados comparáveis, com exceção da parametrização de Pleim (2007). Tal afirmativa é comprovada por indicadores estatísticos, onde é possível observar um melhor coeficiente de correlação (94%) aliado a um maior fator de dois (91%), enquanto a parametrização de Pleim (2007) apresentou o mais baixo coeficiente de correlação (47%), fator de dois (43%) e o mais alto erro quadrático médio normalizado (0,77). Este é um resultado importante devido ao fato que esta parametrização é usada no modelo de mesoescala WRF de forma operacional.

A análise da convergência da solução tridimensional mostrou que melhores resultados são obtidos quando se aumenta a resolução espacial vertical com o aumento do

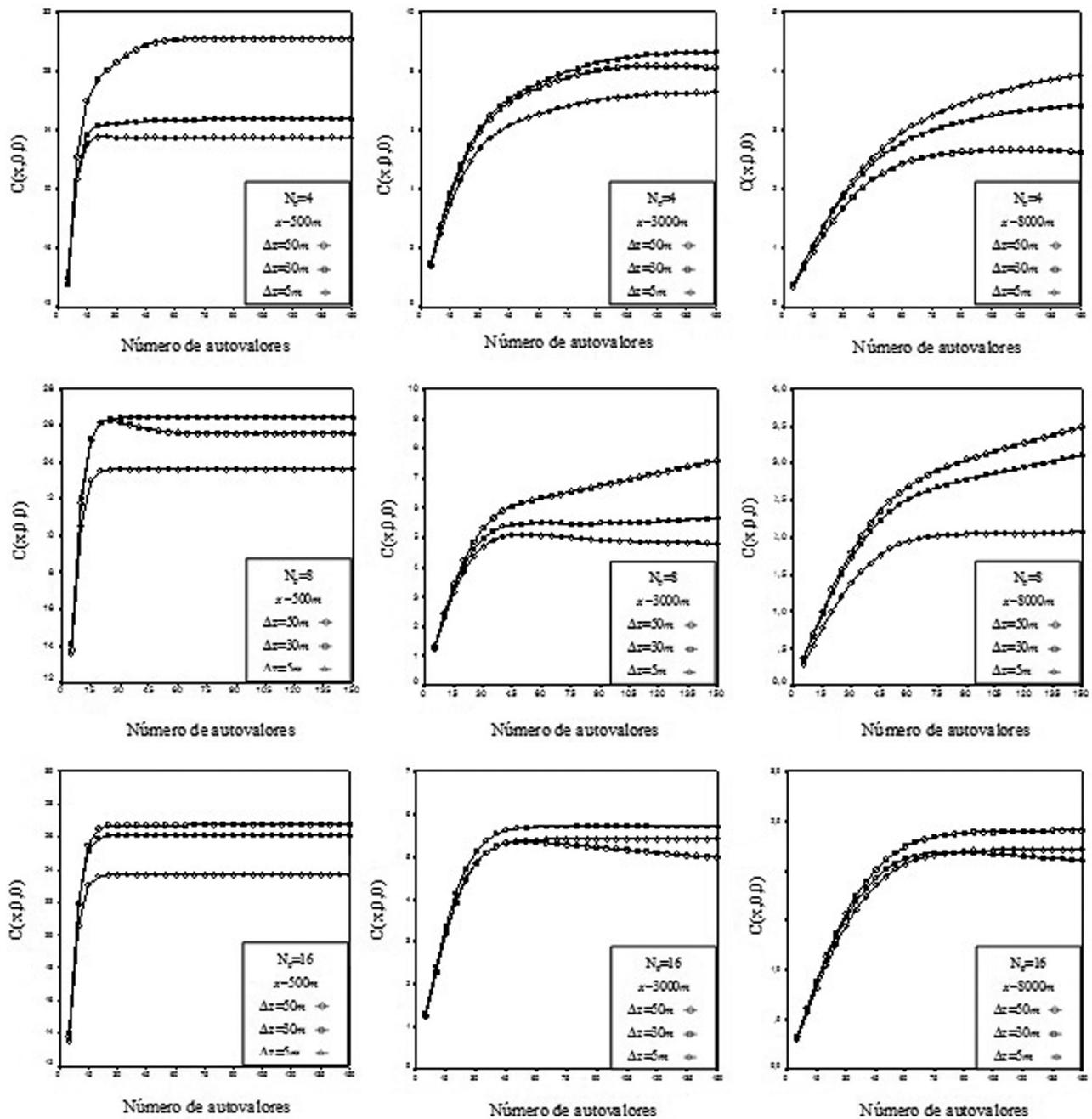


Figura 4 - Convergência numérica da solução considerando a parametrização de Degrazia *et al.* (1997), o experimento 8 de Copenhagen, $N_p = 4, 8$ e 16 e distâncias da fonte $500, 3000$ e 8000 m.

número de pontos da quadratura. É importante frisar que a aproximação *stepwise* de uma função contínua converge para uma função contínua quando os passos individuais (discretização) se aproximam de zero. Além disto, a solução mostrada é semi-analítica no sentido que as únicas aproximações consideradas ao longo de sua derivação são a aproximação *stepwise* dos coeficientes e a inversão numérica da transformada de Laplace.

Finalmente, é importante salientar que o modelo proposto obtém a concentração tridimensional para valores praticamente contínuos na direção vertical (dependendo da discretização utilizada). Desta forma, a solução semi-analítica tridimensional da equação de difusão-advecção mostrada neste trabalho, com uma correta parametrização do coeficiente de difusão vertical, é uma poderosa ferramenta para o cálculo de concentrações, possibilitando um melhor entendimento do processo de dispersão de poluentes com o

menor esforço computacional devido às características analíticas do modelo.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e FAPES pelo suporte financeiro deste trabalho.

Referências

- ARYA, S.P. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. **J. Appl. Meteor.**, v. 34, p. 1112-1122, 1995.
- ARYA, S. **Air pollution meteorology and dispersion**. Oxford University Press, New York, 1999.
- BLACKADAR, A.K., 1997. **Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences**. Springer-Verlag, 1997.
- COSTA, C.P.; VILHENA, M.T.; MOREIRA, D.M.; TIRABASSI, T. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. **Atmos. Environ.**, v. 40, p. 5659-5669, 2006.
- COTTA, R. **Integral transforms in computational heat and fluid flow**. CRC Press, Boca Raton, 1993.
- DEGRAZIA, G.A.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J.C.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H.F. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmos. Environ.**, v. 34, p. 3575-3583, 2000.
- DEGRAZIA, G.A.; MOREIRA, D.M.; VILHENA, M.T. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **J. Appl. Meteor.**, v. 40, p. 1233-1240, 2000.
- DEGRAZIA, G.A.; RIZZA, U.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T. Validation of a new turbulent parameterization for dispersion models in convective conditions. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 85, p. 243-254, 1997.
- DRUILHET, A.; FRANGI, J.; GUEDALIA, D.; FONTAN, J. Experimental studies of the turbulence structure parameters of the convective boundary layer. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, v. 22, p. 594-608, 1983.
- GOLDER, D. Relations among stability parameters in the surface layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 3, p. 47-58, 1972.
- GRYNING, S.E.; LYCK, E. **The Copenhagen tracer experiments: reporting of measurements**. Riso National Laboratory, 2002.
- HANNA, S.R. Applications in Air Pollution Modeling. In: Nieuwstadt, F., Van Dop, H. (Eds). **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling**, D. Reidel Publishing, p. 275-310, 1982.
- HANNA, S.R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. **Atmos. Environ.**, v. 23, p. 1385-1395, 1989.
- LIN, J.S.; HILDEMAN, L.M. A generalized mathematical scheme to analytically solve the atmospheric diffusion equation with dry deposition. **Atmos. Environ.**, v. 31, p. 59-71, 1997.
- MANGIA, C.; MOREIRA, D.M.; SCHIPA, I.; DDEGRAZIA, G.A.; TIRABASSI, T.; RIZZA, U. Evaluation of a new eddy diffusivity parameterisation from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions. **Atmos. Environ.**, v. 36, p. 67-76, 2002.
- MOREIRA, D.M.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, J.C. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. **Atmos. Environ.**, v. 39, p. 3643-3650, 2005.
- MOREIRA, D.M.; VILHENA, M.T. **Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications**. Boca Raton: CRC Press, 2009.
- PANOFSKY, H.A.; DUTTON, J.A. **Atmospheric Turbulence**. John Wiley & Sons, New York, 1988.
- PAULSON, C.A. The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer. **J. Appl. Meteor.**, v. 9, p. 857-861, 1970.
- PLEIM, J.E.; CHANG, J.S. A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer. **Atmos. Environ.**, v. 26, p. 965-981, 1992.
- PLEIM, J.E. A combined local and nonlocal closure model for the atmospheric boundary layer. Part I: model description and testing. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v. 46, p. 1383-1395, 2007.
- SEINFELD, J.H.; PANDIS, S.N. **Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change**. Hoboken, N. J. J. Wiley, 1997.
- STROUD, A.H.; SECREST, D. **Gaussian quadrature formulas**. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, NJ, 1966.
- TANGERMANN, G. Numerical simulations of air pollutant dispersion in a stratified planetary boundary layer. **Atmos. Environ.**, v. 12, p. 1365-1369, 1978.
- TIRABASSI, T. Operational advanced air pollution modeling. **PAGEOPH**, v. 160, p. 5-16, 2003.
- ULKE, A.G. New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. **Atmos. Environ.**, v. 34, p. 1029-1042, 2000.
- ZANETTI, P. **Air Pollution Modeling**. Comp. Mech. Publications, Southampton (UK), 1990.