

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DERIVAÇÃO DE ESCALAS DE TEMPO LAGRANGEANAS
DEPENDENTES DA DISTÂNCIA DA FONTE: UMA APLICAÇÃO NA
DISPERSÃO DE CONTAMINANTES NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA
NEUTRA E ESTÁVEL

por

Franco Caldas Degrazia

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Maio de 2016

DERIVAÇÃO DE ESCALAS DE TEMPO LAGRANGEANAS DEPENDENTES DA
DISTÂNCIA DA FONTE: UMA APLICAÇÃO NA DISPERSÃO DE
CONTAMINANTES NA CAMADA LIMITE PLANETÁRIA NEUTRA E ESTÁVEL

por

Franco Caldas Degrazia
Mestre em Engenharia

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Gervásio Annes Degrazia

Aprovada por:

Prof. Dr. Daniela Buske (UFPEL/RS)

Prof. Dr. Jonas Carvalho (UFPEL/RS)

Prof. Dr. Volnei Borges (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 20 de Maio de 2016

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família, especialmente a minha esposa Erika e minha filha Martina, por sempre me apoiarem e incentivarem.

Agradeço ao professor Marco Tullio M. B. de Vilhena pelo conhecimento transmitido e pela valiosa orientação prestada. Agradeço ao professor Gervásio Annes Degrazia pelos grandes ensinamentos ao longo dos anos. Agradeço também ao professor Bardo Bodmann pelas sugestões enriquecedoras.

Ao CNPq pelo suporte financeiro e à UFRGS e ao PROMEC representados por seus funcionários e docentes.

Agradeço também a todos colegas que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

Existe uma variedade de modelos de dispersão de poluentes, em geral, os modelos gaussianos são usados em todo o mundo por agências ambientais com intuito de regulação. O modelo CALPUFF é um deles. Neste estudo, é avaliada a influência de escalas de tempo de decorrelação no sistema de modelagem CALPUFF, sob condições atmosféricas neutras. Para fazer isso uma nova parametrização das escalas de tempo decorrelação é proposta. Uma distribuição espectral de um perfil de velocidade euleriana e uma formulação da evolução das escalas temporais de decorrelação Lagrangiana são utilizadas como os mecanismos forçantes na dispersão turbulenta, numa camada limite dominada pelo cisalhamento do vento. O desempenho do modelo foi estabelecido com a comparação das concentrações superficiais do experimento *Over-Land Alongwind Dispersion*. Emissões de fontes em linha foram avaliadas com o modelo CALPUFF com distintas formas de inicialização. Um segundo modelo também foi testado, normalmente utilizado para estudar e prever o impacto ambiental e validar parametrizações turbulentas. É o modelo estocástico de partículas Lagrangiano LAMBDA. Também neste estudo, os resultados do modelo LAMBDA e CALPUFF enfatizam a capacidade da nova derivação de escalas de tempo em representar o comportamento estocástico desconhecido do fenômeno da dispersão de poluentes.

Palavras-chave: turbulência; poluição do ar; CALPUFF; LAMBDA; escala de tempo de decorrelação lagrangiana; camada limite planetária.

ABSTRACT

There exists a variety of pollution of dispersion models and in general, Gaussian models are used worldwide by environmental agencies in regulatory applications. The CALPUFF model is one of them. In this study, the influence of decorrelation time scales in the CALPUFF modeling system under neutral conditions is evaluated. To do this a new parameterization of decorrelation time scales is proposed. A spectral distribution of an Eulerian velocity profile and a formulation of the evolution of the Lagrangian decorrelation timescales are used as the forcing mechanisms (shear-dominated boundary layer) for the turbulent dispersion. The model performance was established by comparing ground-level concentrations with Over-Land Alongwind Dispersion experimental results. Line source emissions was evaluated using the CALPUFF model with different forms of the initialization. A second model was also tested, normally used to study and predict the environmental impact and validate turbulent parameterizations. Is the stochastic Lagrangian dispersion model LAMBDA (Ferrero and Anfossi, 1998). Also in this study the model LAMBDA and CALPUFF results emphasized the ability of the new derivation of decorrelation time scales to represent the unknown stochastic behavior.

Palavras-chave: turbulence; air pollution; CALPUFF; LAMBDA; lagrangian decorrelation time scales; planetary boundary layer.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão bibliográfica	7
2	CAMADA LIMITE PLANETÁRIA	10
2.1	Neutralidade, Estabilidade e Instabilidade Atmosférica	10
2.2	Estrutura da camada limite planetária <i>CLP</i>	12
2.3	Camada limite residual <i>CLR</i>	13
2.4	Zona de entranhamento	13
2.5	Camada superficial (<i>CS</i>)	14
2.6	Camada Limite Neutra <i>CLN</i>	15
2.7	Camada Limite Instável ou Camada Limite Convectiva <i>CLC</i>	15
2.8	Camada Limite Estável <i>CLE</i>	17
3	FORMULAÇÃO DO MODELO TURBULENTO	19
4	EXPERIMENTO OLAD	24
5	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO MODELO CALPUFF	27
6	AVALIAÇÃO DO MODELO CALPUFF	32
7	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO MODELO LAMBDA	40
8	AVALIAÇÃO DOS MODELOS LAMBDA E CALPUFF	48
8.1	Limitações nas abordagens de modelagem numérica	58
9	CONCLUSÃO	61
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	66

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Sistema de Modelagem do CALPUFF [Degrazia et al., 2007a]	3
Figura 2.1	Neutralidade, instabilidade e estabilidade da <i>CLP</i> [Erbrink et al., 1997][Degrazia, 2005]	11
Figura 2.2	Temperatura em alturas distintas de medição [Degrazia, 2005]	12
Figura 2.3	Evolução temporal da <i>CLP</i> [Stull, 1988][Degrazia, 2005]	13
Figura 2.4	Perfil de temperatura na <i>CLC</i> [Degrazia, 2005]	16
Figura 2.5	Perfil de temperatura na <i>CLE</i> [Degrazia, 2005]	17
Figura 4.1	Local do teste OLAD no <i>Dugway Proving Ground</i> , com a apresentação da localização da linha de disseminação de contaminantes, linhas de amostragens e locais de medições meteorológicas.	25
Figura 5.1	Ilustração do movimento de um <i>puff</i> durante um passo de tempo . . .	31
Figura 6.1	Diagrama de espalhamento dos resultados modelados em comparação com os resultados observados de concentração superficial.	35
Figura 6.2	Diagrama de espalhamento da razão C_o/C_p em relação a concentração superficial observada.	36
Figura 6.3	Comportamento do tempo de descorrelação Lagrangeano para cinco alturas distintas $z/h = 0.015$, $z/h = 0.25$, $z/h = 0.1$, $z/h = 0.5$ e $z/h = 0.75$ como estabelecido pela equação (3.14) e o limite assintótico para grandes distâncias a partir da fonte de emissão.	37
Figura 6.4	Comportamento dos perfis verticais da escala de tempo de descorrelação Lagrangeano dependentes da distância da fonte. Valores estabelecidos para três diferentes distâncias $x = 2000$, 5000 e $10000m$ a partir da equação (3.14). As distâncias das fontes estão em acordo com as localização dos amostradores do experimento.	38

Figura 6.5	Comportamento dos coeficientes angulares em função da distância, baseada numa regressão linear da razão C_o/C_p apresentada na figura 4.2	39
Figura 8.1	Diagrama de espalhamento dos resultados modelados em comparação com as concentrações superficiais observadas.	52
Figura 8.2	Diagrama de espalhamento dos resultados modelados em comparação com as concentrações superficiais observadas com regressão linear. . .	53
Figura 8.3	Diagrama de espalhamento da razão C_o/C_p em relação aos dados observados de concentrações superficiais para o experimento OLAD 252.	54
Figura 8.4	Diagrama de espalhamento da razão C_o/C_p em relação aos dados observados de concentrações superficiais para o experimento OLAD 258.	55
Figura 8.5	Comportamento do coeficiente angular em função da distância, baseado numa regressão linear em função da razão C_o/C_p presente na figura 8.4.	57
Figura 8.6	Variabilidade da concentração integrada para o OLAD 252 com distintas funções densidade de probabilidade, número de partículas emitidas para as simulações do LAMBDA e número de <i>puffs</i> emitidos para as simulações do CALPUFF.	58
Figura 8.7	Variabilidade da concentração integrada para o OLAD 258 com distintas funções densidade de probabilidade, número de partículas emitidas para as simulações do LAMBDA e número de <i>puffs</i> emitidos para as simulações do CALPUFF.	59
Figura 9.1	Dados observados em comparação com as simulações do modelo CALPUFF para grandes distâncias de 100km e 600km a partir do ponto de emissão. Gráfico gerado a partir do estudo [EPA, 2012].	64

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1	Parâmetros meteorológicos e micrometeorológicos para as simulações.	33
Tabela 6.2	Concentrações superficiais observadas e previstas em diferentes distâncias da fonte de emissão.	34
Tabela 6.3	Comparação dos modelos com a regressão linear.	35
Tabela 8.1	Parâmetros meteorológicos e micrometeorológicos para as simulações.	49
Tabela 8.2	Concentrações superficiais observadas e previstas a partir de diferentes distâncias da fonte de emissão - Experimento OLAD 252. . . .	50
Tabela 8.3	Concentrações superficiais observadas e previstas a partir de diferentes distâncias da fonte de emissão - Experimento OLAD 258. . . .	51
Tabela 8.4	Comparação dos modelos com regressão linear.	54
Tabela 8.5	Índices estatísticos para o experimento OLAD calculados com a os dados simulados pelo modelo LAMBDA e o modelo CALPUFF. . . .	54

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

<i>COR</i>	Coeficiente de Correlação
<i>CLC</i>	camada limite convectiva
<i>CLE</i>	camada limite estável
<i>CLN</i>	camada limite neutra
<i>CLP</i>	camada limite planetária
<i>CLR</i>	camada limite residual
<i>CS</i>	camada superficial
<i>CM</i>	camada de mistura
<i>EPA</i>	U.S. Environmental Protection Agency
<i>IWAQM</i>	Interagency on Air Quality Modeling
<i>CARB</i>	California Air Resources Board
<i>OLAD</i>	Over-Land Atmospheric Dispersion
<i>WRF</i>	Weather Research and Forecasting
<i>MM5</i>	PSU/NCAR Fifth Generation Mesoscale Model
<i>MMIF</i>	Mesoscale Model Program Interface
<i>INEL</i>	Idaho National Engineering Laboratory
<i>SAMS</i>	Surface Atmospheric Measurements Systems
<i>PWIDS</i>	Portable Weather Information and Display System
<i>SF₆</i>	Gás hexafluoreto de enxofre

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

t	Tempo de viagem de um puff até o receptor (s)
t_{ly}	Escala de tempo Lagrangeano na direção cruzada do vento
t_{lz}	Escala de tempo Lagrangeana vertical (s)
z	Altura de observação (m)
h	Comprimento da camada limite planetária (m)
L	Comprimento de Obukhov (m)
u_*	Velocidade de fricção local (m/s)
u_{*0}	Velocidade de fricção superficial (m/s)
T_{L_i}	Escala de tempo de decorrelação Lagrangeana (s)
F_i^E	Espectro de energia Euleriano
f	Frequência adimensional
n	Frequência cíclica (Hz)
U	Velocidade média horizontal do vento (m/s)
$(f_m)_i$	Frequência adimensional do pico espectral neutro
X'	Distância adimensional
X	Distância (m)
$(f_m)_{0i}$	Pico espectral de frequência na superfície (Hz)
f_c	Parâmetro de Coriolis
Q	Taxa de emissão kg/s
(C_o)	Concitração atmosférica superficial observada (kg/m^3)
(C_p)	Concitração atmosférica superficial prevista (kg/m^3)
x	Distância a partir da fonte de emissão (m)

$Fa2$	Fator de dois
Fb	Fração de inclinação
Fs	Desvio fracional padrão
$Nmse$	Erro quadrático médio normalizado
u	Velocidade longitudinal do vento (m/s)
v	Velocidade lateral do vento (m/s)
w	Velocidade vertical do vento (m/s)
z_0	Comprimento da rugosidade superficial do terreno (m)
z/L	Parâmetro de Estabilidade
C_{INT}	Concentração de interesse revisada em relação tempo de exposição (kg/m^3)
C_{MOD}	Concentração prevista por um modelo (kg/m^3)
t_{MOD}	Tempo médio da simulação (s)
t_{INT}	Tempo de exposição de interesse (s)
$C(x, y, z)$	Concentração atmosférica (kg/m^3)
N_{PEF}	Número de partículas emitidas na posição da fonte em cada passo de tempo
N_{PVS}	Número de partículas no sensor
V_S	Volume do sensor (m^3)
V_f	Volume da fonte (m^3)
C_j	j-ésima concentração
S_i	i-ésima fonte
$V_{S,i}$	i-ésimo volume do sensor
$N_{PEF,i}$	Número de partículas emitidas na i-ésima fonte
$N_{PVS,i,j}$	Número de partículas emitidas pela i-ésima fonte que é encontrada no j-ésimo sensor
Q_i	Intensidade de emissão (kg/s)
C_o	Constante de Kolmogorov

P_E Função densidade de probabilidade Euleriana da velocidade turbulenta
 $(f_m)_i$ Pico espectral de frequência (Hz)

2. Caracteres Gregos

σ_{yt}	Coefficiente de dispersão Gaussiano horizontal dependente do tempo para um puff (m^2/s)
σ_{zt}	Coefficiente de dispersão Gaussiano vertical dependente do tempo para um puff
σ_v	Desvio padrão horizontal da componente cruzada do vento (m/s)
σ_w	Desvio padrão vertical da componente cruzada do vento (m/s)
σ_i^2	Variância da velocidade Euleriana (m^2/s^2)
β_i	Razão entre escalas de tempo integral Lagrangeana Euleriana
κ	Constante Von Karman
ε	Taxa de dissipação média da energia cinética

1 INTRODUÇÃO

Os modelos de transporte e dispersão de contaminantes na atmosfera são ferramentas importantes para avaliar as influências antropogênicas no ambiente. Na maioria das vezes, as emissões atmosféricas podem contribuir com a alterações da qualidade do ar no ambiente industrial, urbano e rural. Existem atualmente diversos tipos de modelos de dispersão e de maneira geral, os modelos gaussianos fornecem interpretações adequadas para a maioria das avaliações habitualmente realizadas, razão pela qual têm sido utilizados por agências ambientais e indústrias, em âmbito mundial. O CALPUFF é um software de estado da arte em dispersão de contaminantes na atmosfera. Como parte de um estudo para desenvolver um sistema para modelar a qualidade do ar em condições dependentes do tempo e para licenciamento ambiental, a *Sigma Research Corporation* (SRC) desenvolveu o modelo de dispersão CALPUFF incluindo programas e modelos relacionados, como o modelo meteorológico CALMET. Os modelos CALMET e CALPUFF são revisados e melhorados periodicamente, como parte de um trabalho conjunto da *Interagency on Air Quality Modeling* (IWAQM), *United States Environmental Protection Agency* (EPA) e empresas privadas nos Estados Unidos e exterior. O sistema do modelo CALPUFF tem três componentes principais: CALMET, CALPUFF e CALPOST, e ainda um grande conjunto de programas de pré-processamento, criados para realizar a ligação entre o modelo e o conjunto de dados meteorológicos e geofísicos disponíveis [Scire et al., 2000b].

Em poucas palavras, o CALMET é um modelo meteorológico que desenvolve campos horários de velocidade do vento e da temperatura em uma grade tridimensional, incluindo campos bidimensionais de altura da camada limite planetária e características superficiais [Scire et al., 2000a]. Neste sistema o modelo CALMET estabelece as variáveis micrometeorológicas a partir dos dados meteorológicos de superfície (estação meteorológica) e de dados de altitude (radiossondas) que estabelece o perfil atmosférico para a grade do sistema CALPUFF. O CALMET utiliza parametrizações, com base em balanço superficial de radiação solar, para a determinação dos parâmetros e fluxos turbulentos, tais como: fluxo calor sensível, fluxo de calor latente, comprimento de Monin-Obukhov, velocidade de fricção, velocidade convectiva, entre outros para simular a dispersão de contaminantes [Holtslag e Van Ulden, 1983].

O desenvolvimento original do CALPUFF e do CALMET foi financiado pelo *California Air Resources Board* (CARB) [Scire et al., 2000b]. As especificações originais desenvolvidas para o CALPUFF incluem a capacidade de tratar a variabilidade temporal de fontes de emissão, a possibilidade de simular a dispersão atmosférica para domínios de dez até centenas de quilômetros a partir de uma fonte de emissão, previsão de concentração para médias temporais horárias até um ano, aplicabilidade para simulação de poluentes inertes e com reações químicas, simular a dispersão em terrenos simples e com topografia complexa, simular fenômenos como fumigação (*plume fumigation*) e circulações turbulentas próximas à prédios industriais (*building downwash*) [Scire et al., 2000b]. O CALPUFF é um modelo não estacionário que simula a dispersão de contaminantes e transformações de espécies químicas na forma de *puffs* a partir do momento em que são liberadas de fontes poluidoras. O espalhamento a partir do centro de massa dos *puffs*, nas três direções cartesianas, é representado por uma distribuição gaussiana com característica lagrangeana. Os parâmetros de escala turbulenta gerados pelo CALMET e a variação temporal e espacial nos campos meteorológicos, são explicitamente incorporados na distribuição dos *puffs* durante o período de simulação e ao longo do domínio. Os principais arquivos de saída do CALPUFF contêm concentrações horárias e demais períodos determinados em receptores locais ou de grade. Após a simulação, o módulo CALPOST é utilizado para processar estes arquivos, produzindo tabelas e gráficos que sumarizam os resultados da simulação [Scire et al., 2000a,b]. Além do CALMET, CALPUFF e CALPOST, o sistema de modelamento de dispersão atmosférica possui pré-processadores, que realizam a ligação entre o sistema CALPUFF e outros modelos (SMERGE, READ62, CTGPROC, TERREL, MAKEGEO), bem como a preparação de dados de topografia e cobertura do solo para o CALMET. A figura 1 mostra o sistema CALPUFF e suas ligações com modelos e processadores [Degrazia et al., 2007a].

No modelo regulatório CALPUFF uma consideração crucial é a especificação dos coeficientes de dispersão gaussianos verticais e horizontais dependentes do tempo para o deslocamento dos *puffs*. As formas gerais de σ_{yt} e σ_{zt} para a dispersão turbulenta foram determinados por [Hanna et al., 1977]:

$$\sigma_{yt} = \sigma_v t f_y(t/t_{ly}) \quad (1.1)$$

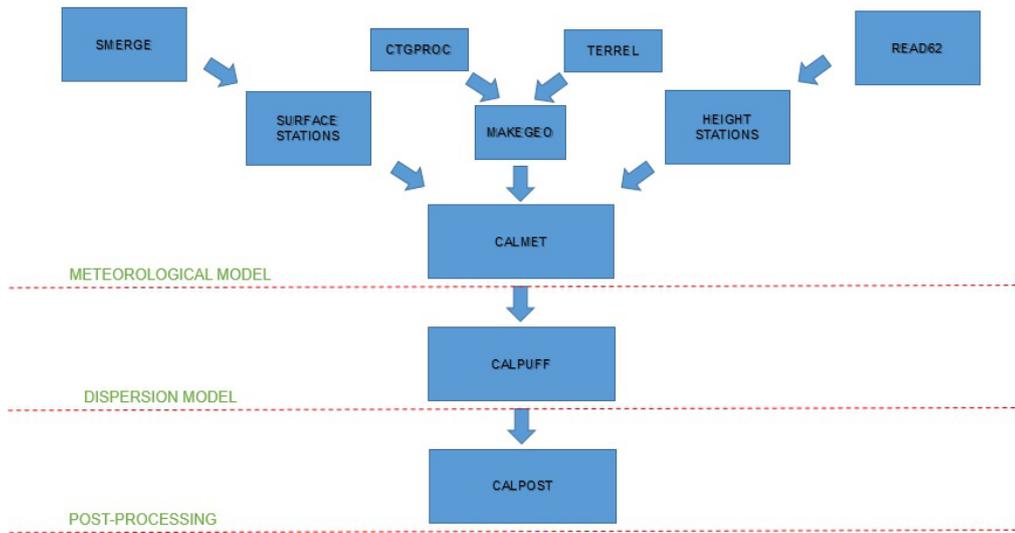


Figura 1.1 – Sistema de Modelagem do CALPUFF [Degrazia et al., 2007a]

$$\sigma_{zt} = \sigma_w t f_z(t/t_{lz}) \quad (1.2)$$

onde σ_v é o desvio padrão horizontal cruzado da componente do vento, σ_w é o desvio padrão da componente vertical do vento, t é o tempo de viagem de um *puff* até o receptor, t_{ly} e t_{lz} são as escalas de tempo Lagrangeanas das componente cruzada e vertical do escoamento. As funções f_y e f_z são as parametrizações estabelecidas por [Draxler, 1976] para uma camada limite neutra/estável.

$$f_y = [1 + 0.9(t/1000)^{1/2}]^{-1} \quad (1.3)$$

$$f_z = [1 + 0.9(t/500)^{1/2}]^{-1}. \quad (1.4)$$

Além disso, para completar as parametrizações atmosféricas da turbulência no modelo de dispersão CALPUFF são utilizadas expressões para o desvio padrão da componente do vento da seguinte forma estabelecida pelo autor [Caughey, 1981].

$$\sigma_v = u_* [1.6C_S(z/L) + 1.8a_n] / (1 + z/L) \quad (1.5)$$

$$\sigma_w = 1.3u_*[C_S(z/L) + a_n]/(1 + z/L), \quad (1.6)$$

onde $C_S = (1 - z/h)^{3/4}$ e $a_n = \exp[-0.9(z/h)]$, com z a altura de observação, h é a altura da camada limite planetária (CLP), L é o comprimento de Obukhov, u_* é a velocidade de fricção local que foi expressa por [Nieuwstadt, 1984] como $u_* = u_{*0}(1 - z/h)^{3/4}$ com u_{*0} sendo a velocidade de fricção superficial.

Um outro modelo utilizado para estudar e prever o impacto ambiental na qualidade do ar é o modelo estocástico Lagrangiano de dispersão denominado de LAMBDA [Ferrero e Anfossi, 1998c]. Os modelos de partícula estocásticos Lagrangeanos são ferramentas eficientes e fundamentais na investigação e estudo dos fenômenos de difusão turbulenta na camada limite planetária. Em um modelo estocástico Lagrangeano de dispersão turbulenta, simula-se o movimento de partículas de fluido sujeitas às flutuações da velocidade. Tais partículas seguem passivamente o escoamento turbulento. Nestes tipos de modelo, para reproduzir os efeitos dos turbilhões, as velocidades das partículas são sujeitas a um forçante aleatório [Rodean, 1996]. Desta forma, tais modelos de dispersão são baseados na equação estocástica de Langevin. Esta equação é derivada assumindo-se que a velocidade pode ser escrita como a soma de um termo determinístico e de um termo estocástico. Neste caso, para cada passo de tempo, a partícula de fluido move-se devido à ação do vento médio e da difusão turbulenta. Esta última é provocada pela ação das flutuações da velocidade do vento. A solução da equação de Langevin é um processo de Markov estocástico contínuo [Wang e Uhlenbeck, 1945]. A posição da partícula e a sua velocidade, em um escoamento turbulento, podem ser considerados processos de Markov no intervalo do espectro de energia turbulenta. Este intervalo espectral situa-se entre as escalas de tempo integral Lagrangeana (turbilhões contendo a energia principal do escoamento), e as escalas de tempo dissipativas de Kolmogorov (turbilhões nos quais a difusividade molecular atua fortemente). Em um modelo estocástico Lagrangeano aplicado na simulação da dispersão de um escoamento turbulento, a trajetória simulada de cada partícula representa uma realização estatística individual do escoamento. Este escoamento é caracterizado por certas condições iniciais e vínculos físicos. Como consequência, o movimento de qualquer partícula é independente de qualquer outra. Desta forma, o campo de concentração, estimado da distribuição espacial das partículas, deve

ser interpretado como uma média realizada sobre o conjunto total de partículas simuladas [Degrazia et al., 2007b].

As quantidades físicas importantes para parametrizar a equação de Langevin em modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos são as variâncias das flutuações de velocidade do vento e as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeanas [Anfossi e Physick, 2005]. Do ponto de vista físico, as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeanas podem variar no espaço e também com o tempo de viagem dos contaminantes. A teoria de difusão estatística de Taylor mostra que o processo de difusão turbulenta é diferente para regiões próximas e distantes de uma fonte pontual contínua. Na proximidade da fonte, as partículas de fluido (contaminantes) conservam alguma memória do seu ambiente turbulento inicial. Diferentemente, para grandes tempos de viagem, esta memória desaparece e as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeanas assumem o seu comportamento assintótico, com as partículas do fluido seguindo apenas as propriedades locais do escoamento [Batchelor, 1949]. Portanto, a consideração deste efeito de memória em modelos de difusão estocásticos Lagrangeanos é de grande importância. O emprego de escalas de tempo variando com a distância da fonte permite descrever corretamente o processo de dispersão em regiões próximas, intermediárias e distantes da fonte de contaminantes. Neste modelo foi empregada uma função densidade de probabilidade Gaussiana de distribuição das partículas na componente horizontal. Na componente vertical a função de probabilidade é não gaussiana. Estas funções de distribuição foram usadas para resolver a equação de Fokker-Planck, que fornecem os parâmetros necessários para descrever o modelo estocástico Lagrangeano.

Mais precisamente, a parametrização turbulenta no modelo estocástico LAMBDA é estabelecida a partir da função estrutura de Kolmogorov no subintervalo inercial. O coeficiente difusivo pode ser escrito como o produto da constante de Kolmogorov C_o e a taxa de dissipação de energia cinética ε . Este produto também pode ser escrito como uma função da variância das flutuações da velocidade do vento σ_i^2 e da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana t_{l_i} de acordo com [Hinze, 1975; Tennekes, 1982]. A entrada numérica mais importante na simulação da dispersão de poluentes quando a equação de Langevin é utilizada são as variâncias da velocidade do vento e o tempo de decorrelação ou energia cinética turbulenta e a constante de Kolmogorov [Timm, 2007].

As performances dos modelos foram estabelecidas pela comparação dos níveis superficiais de concentração de um gás traçador com os resultados do experimento *Over-Land Atmospheric Dispersion* (OLAD). Os testes escolhidos para simular o fenômeno natural da dispersão atmosférica foram os dias 9 e 15 de Setembro de 1997. Os experimentos foram realizados com a liberação de quantidades conhecidas do gás traçador hexafluoreto de enxofre (SF_6) ao longo de uma linha perpendicular à direção predominante do vento. As liberações do teste OLAD 258 foram realizadas no dia 15 de Setembro. Os ensaios ocorreram com liberações superficiais em condições de vento forte (10 m/s) de sudeste em uma camada limite planetária neutra. O ensaio do dia 9 de Setembro foi realizado em uma atmosfera levemente estável, com vento moderado de 5 m/s, também de sudeste com uma camada limite estimada de 250 m. A denominação para este ensaio é OLAD 252.

Os primeiros resultados avaliados foram das simulações do CALPUFF, quando as variáveis micrometeorológicas foram determinadas pelo ferramenta de diagnóstico CALMET. Foram incorporadas todas as estações meteorológicas da Figura 4.1. Portanto, na modelagem de dispersão do modelo CALPUFF quando este foi inicializado pelo sistema de acoplamento CALMET CALPUFF, a variabilidade espacial dos dados meteorológicos e micrometeorológicos estava contida. Na inicialização do CALPUFF sem utilizar o CALMET, entretanto a variabilidade espacial não foi considerada. Nas simulações com modelo LAMBDA, a variabilidade espacial também não foi considerada em razão de o modelo operar somente com esta opção. A partir disso, foram utilizados os dados meteorológicos estabelecidos por [Biltoft et al., 1999].

Portanto, o objetivo principal deste trabalho é avaliar o modelo regulatório CALPUFF, juntamente com o modelo Lagrangeano LAMBDA, com diferentes parametrizações turbulentas estabelecidas neste estudo. Deste modo, uma formulação para a evolução do tempo de escala de decorrelação Lagrangeana é derivada em condições atmosféricas neutra e estável. As expressões estabelecidas foram aplicadas nos modelos de dispersão de poluentes de forma a validar e representar os forçantes mecânicos na dispersão turbulenta.

1.1 Revisão bibliográfica

Diversos estudos de modelagem da dispersão de contaminantes tem utilizado parametrizações da difusão turbulenta (parametrização de turbilhões/vórtices), as quais são empregadas na solução analítica de modelos de poluição do ar em distintas estabilidades atmosféricas. Os autores [Alves et al., 2012] tiveram sucesso no uso de parametrizações da difusão turbulenta dependentes da distância da fonte, em uma camada planetária dominada pelos forçantes mecânicos. Uma solução analítica para a equação da difusão-advecção chamada 2D-GILTT foi utilizada. Os autores [Buske et al., 2012] também testaram parametrizações verticais e dependentes do tempo para a difusão turbulenta com o modelo analítico GILTT para resolver a equação da difusão-advecção. Os autores [Costa et al., 2012] propuseram uma formulação geral para a dispersão de poluentes na atmosfera com a utilização de um perfil vertical do vento e um coeficiente de difusão turbulenta considerando um fechamento local e não local da turbulência. Foi utilizada uma formulação analítica dependente do tempo e tridimensional para a solução da equação de difusão-advecção por uma combinação da técnica de Transformada de Laplace e a técnica de multi-camadas. Diferentemente dos modelos de dispersão Eulerianos, como os modelos gaussianos e GILTT, os autores [Degrazia et al., 2000] apresentaram uma parametrização da turbulência para a camada limite planetária (CLP) para todas as condições de estabilidade atmosférica. A dispersão do poluente foi simulada pelo modelo de partículas Lagrangeanas LAMBDA [Ferrero e Anfossi, 1998b,c][Timm, 2007][Degrazia et al., 2015].

No uso do modelo CALPUFF, um trabalho bastante importante foi desenvolvido pela *U.S. Environmental Protection Agency* (EPA). Avaliações de longos transportes de poluentes da agência ambiental americana ressaltaram a imprevisibilidade como fator de grande preocupação para órgão ambiental. Em testes de 100 km e 600 km, a partir do local de emissão, foi observado um aumento de imprevisibilidade a medida que se estende a distância. No caso da avaliação de 600 km, em torno de 90% dos testes subestimaram as concentrações observadas. Ao contrário do que foi observado para as simulações de 100 km, que apresentaram uma maior superestimativa em relação a concentração observada [EPA, 2012]. Entre os argumentos relativos à carência do modelo CALPUFF deve

se destacar a utilização do modelo CALMET na preparação dos dados meteorológicos. A EPA recentemente alertou que o modelo CALMET pode produzir descontinuidades nos campos de vento, resultando numa degradação destes. Mesmo quando os ventos observados coincidem com os previstos pelo CALMET nos locais das observações [EPA, 2012]. O mesmo trabalho também abordou uma outra dificuldade do modelo CALMET, quando da inicialização da ferramenta de previsão com dados simulados por modelos meteorológicos como *Weather Research and Forecasting* (WRF) e o *PSU/NCAR Fifth Generation Mesoscale Model* (MM5) [EPA, 2012]. A degradação do campo de vento também ocorre em simulações acopladas (*nested*) com modelos meteorológicos. Por isso, em 2009 a EPA lançou um programa que acopla diretamente modelos meteorológicos e o CALPUFF, o *Mesoscale Model Program Interface* (MMIF). O MMIF converte campos de saída de modelo meteorológico de prognóstico para os parâmetros e formatos exigidos para entrada direta em modelos de dispersão. Nas simulações de 100 km, o desempenho do CALPUFF a partir do MMIF, previu concentrações máximas e larguras das pluma de forma comparável ou melhor do que todas as configurações do modo de simulação CALMET CALPUFF. Exceto quando o CALMET utilizou dados do MM5 e de estação de superfície, mas sem observações meteorológicas de ar superior (perfil atmosférico). No caso das simulações de 600 km a melhor performance foi observada sem a utilização do CALMET. O MMIF gerou todos os parâmetros meteorológicos e micrometeorológicos para o CALPUFF. Além de não utilizar o CALMET, a opção por utilizar um *puff* alongado (*slug*) se mostrou mais eficiente. O artigo de [Hernandez-Garces et al., 2015] também retrata a melhor opção na utilização do modelo CALMET. Os autores de [Hernandez-Garces et al., 2015] salientam a necessidade de se utilizar uma combinação de medições meteorológicas de superfície juntamente com modelo meteorológico. Neste caso foram utilizadas saídas do WRF em conjunto com dados de superfície.

Os modelos de dispersão estocásticos Lagrangeanos representam uma das ferramentas computacionais mais recentes e poderosas para a discretização numérica de um sistema físico [Zanneti, 1990]. [Ferrero et al., 1995] desenvolveram o modelo LAMBDA para dispersão tridimensional em terreno plano. Em especial, o modelo LAMBDA tem sido utilizado em um grande número de estudos para auxiliar o processo de aprendizado da turbulência atmosférica e conseqüentemente da dispersão de poluentes. O modelo

LAMBDA provou ser capaz de produzir simulações confiáveis de difusão turbulenta [Ferrero et al., 1995; Ferrero e Anfossi, 1998b; Ferrero et al., 1997]. Mais recentemente, [Timm, 2007] avaliou este modelo em diversas condições atmosféricas. A análise foi empregada com três diferentes experimentos de difusão atmosférica. O primeiro foi o experimento de Copenhague que foi realizado sob condições convectivas. O Prairie Grass foi o segundo experimento a ser avaliado, com avaliações somente dos casos de estabilidade neutra. O experimento de *Idaho National Engineering Laboratory* (INEL) foi o último a ser analisado, o qual foi estudado em condições de vento fraco e atmosfera estável. O trabalho de [Moreira, 2008] estimou a concentração de contaminantes também em diferentes condições de estabilidade da CLP. Os experimentos de Copenhague e Prairie Grass foram simulados. Nestas simulações foi utilizada a parametrização da turbulência proposta por [Hanna, 1982]. Os resultados foram comparados com o campo de concentração medido e simulado por [Timm, 2007], a qual utilizou a parametrização da turbulência obtida por [Degrazia et al., 2000]. Um estudo similar foi desenvolvido por [Degrazia et al., 2007c], o qual estabeleceu escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana também dependentes da distância da fonte. Diferentemente do presente estudo, o trabalho de [Degrazia et al., 2007c] foi estabelecido para atmosfera convectiva. O modelo LAMBDA foi também analisado, porém a comparação ocorreu com os resultados do experimento de Copenhague. Na solução de problemas inversos, o modelo LAMBDA foi empregado para resolver o problema direto, enquanto métodos de otimização estimaram a localização de fontes de emissão [Roberti et al., 2005].

2 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

A camada limite planetária é a região (*CLP*) na qual a parte inferior da atmosfera sofre efeitos superficiais (forçantes), através de trocas verticais de calor, momentum, vapor d'água, emissões de poluentes e a influência do terreno sobre o escoamento de ar. Estes forçantes superficiais, pertencem a *CLP*, quando a escala de tempo observacional é de 1 hora ou menos [Stull, 1988]. Uma das principais características da *CLP* é a variação diurna de temperatura, provocada pelo aquecimento e resfriamento da superfície da terra. A radiação proveniente do sol é o mecanismo que induz estas variações o que não ocorre em grandes altitudes em relação ao solo. Geralmente, durante o dia esta camada pode atingir de 1-2 km de altura e a noite sua espessura reduz-se drasticamente, podendo ser inferior a 100 metros [Panofsky e Dutton, 1984]. A espessura da *CLP*, denominada h , é a região na qual as propriedades atmosféricas são misturadas [Degrazia, 2005]. A responsável por esta mistura, é a turbulência, composta de três mecanismos guiadores, fluxo de momentum, fluxo de calor e parâmetro de empuxo [Venkatram e Wyngaard, 1988]. A partir da interação diária destes mecanismos, pode-se dividir a *CLP* em distintos comportamentos de estabilidade.

2.1 Neutralidade, Estabilidade e Instabilidade Atmosférica

A estabilidade atmosférica na *CLP* é definida pelo comportamento da temperatura e de seu gradiente vertical em função da altura. A atmosfera, em uma certa situação, exhibe um gradiente vertical de temperatura, denominado de gradiente neutro ou adiabático $\gamma_d = 0.0098 \text{ Kelvin}/m$. Porém, existem outras duas situações em que a atmosfera exhibe um comportamento diferente da neutralidade, ambas por consequência do balanço superficial de radiação solar (figura 2.1)[Degrazia, 2005].

Quando a incidência de raios solares aquece o solo terrestre, a radiação que chega a superfície é maior que a perdida, assim parcelas de ar próximas ao solo elevam sua temperatura. Por estarem mais quentes, suas massas específicas diminuem. Tornam-se mais leves, assim forças de empuxo irão acelerá-las para cima, enquanto que parcelas de ar superiores irão descer (mais pesadas). A mistura ou instabilidade atmosférica é estabelecida. Neste caso o gradiente de temperatura é mais acentuado que o gradiente

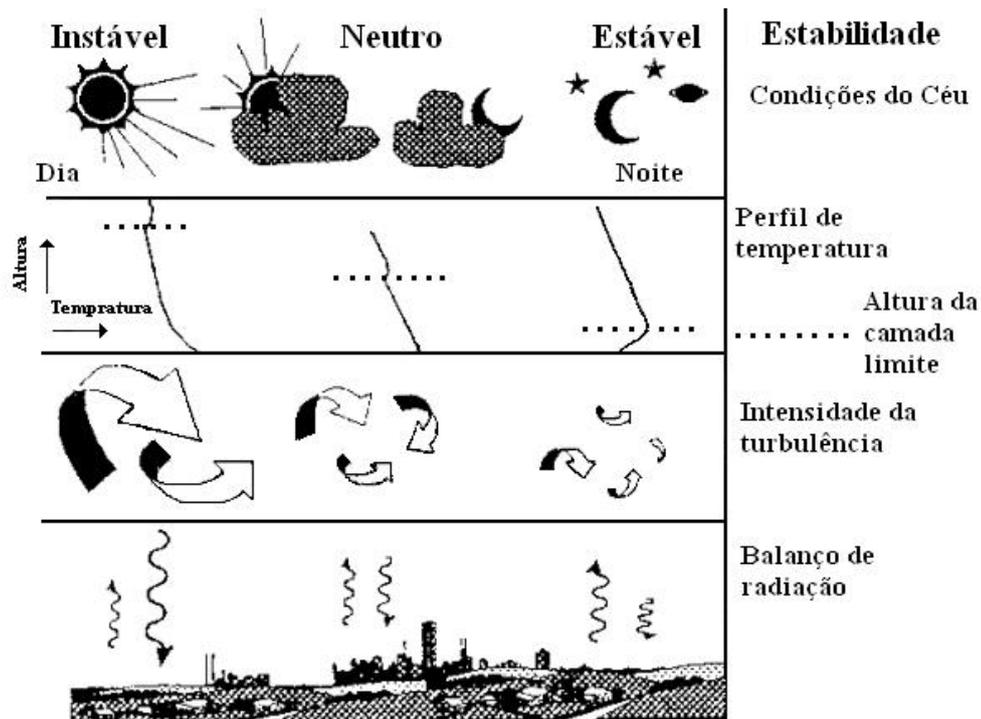


Figura 2.1 – Neutralidade, instabilidade e estabilidade da *CLP* [Erbrink et al., 1997][Degrazia, 2005]

adiabático. Quando a radiação solar pára de incidir sobre o solo, o balanço indica que radiação que chega a superfície é menor que a perda. Esta resfria, assim parcelas de ar próximas ao solo começam a resfriar, amplificando-se até camadas mais elevadas. Estão presentes nas camadas superiores as parcelas de ar mais quentes (leves). Nesta situação o gradiente de temperatura exhibe um comportamento diferente do gradiente adiabático, exibindo um comportamento estratificado da temperatura próxima à superfície (figura 2.1), pois parcelas de ar superiores mais quentes não permitem que as parcelas de ar inferiores mudem de posição. Na figura (2.2) pode ser visto o comportamento da temperatura durante as primeiras horas da manhã, em duas alturas distintas de medição, durante a realização do experimento OLAD. A temperatura à 10 metros, logo no início da manhã, ainda está mais elevada do que a temperatura medida à 2 metros, exibindo na camada superficial um comportamento estratificado da temperatura. Posteriormente, quando a radiação solar começa a aquecer o solo, a temperatura à 2 metros supera a outra [Degrazia, 2005].

Temperatura medida em duas alturas distintas

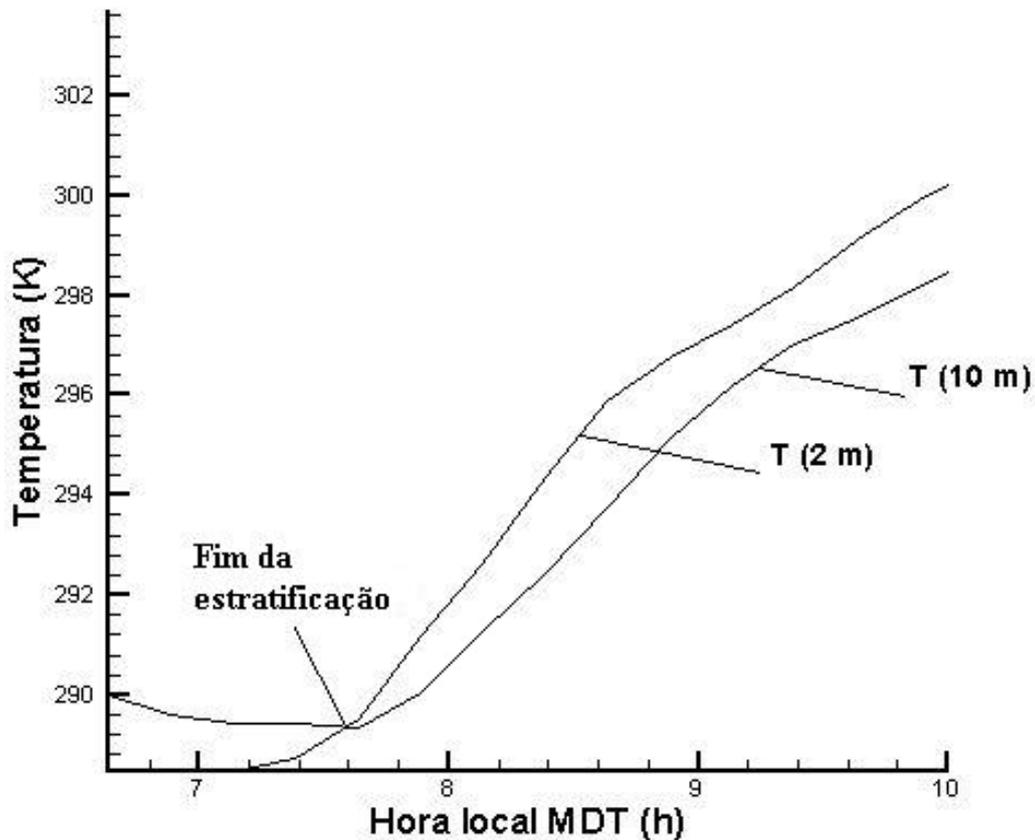


Figura 2.2 – Temperatura em alturas distintas de medição [Degrazia, 2005]

2.2 Estrutura da camada limite planetária *CLP*

Como a dispersão de poluentes é fortemente influenciada, pelo comportamento da estabilidade atmosférica, é de fundamental importância conhecer a *CLP* e dividi-la em comportamentos distintos de estabilidade durante o período de um dia, (figura 2.3), pois as escalas turbulentas que transportam o poluente variam muito de tamanho conforme a estabilidade. As cinco componentes principais desta estrutura são a **camada limite convectiva** ou de mistura (*CLC*), a **camada limite residual** (*CLR*), a camada limite estável (*CLE*), a **camada superficial** (*CS*) e a **camada limite neutra** (*CLN*).

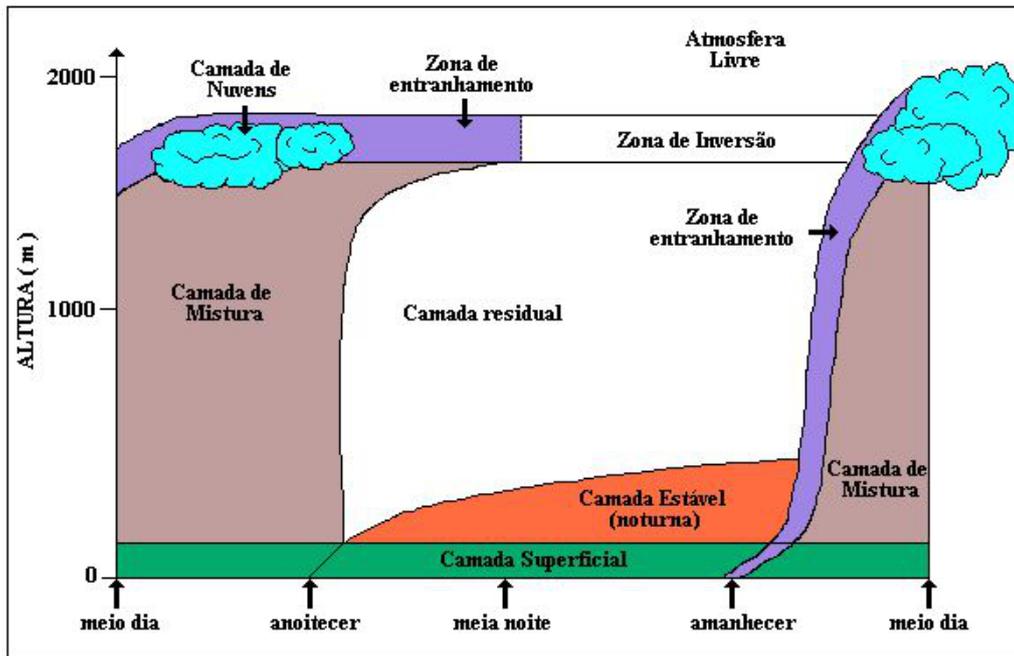


Figura 2.3 – Evolução temporal da CLP [Stull, 1988][Degrazia, 2005]

2.3 Camada limite residual *CLR*

A *CLR* forma-se por volta de meia hora antes do pôr-do-sol, quando as termas cessam, permitindo que a turbulência decaia. Suas características permanecem as mesmas do decaimento recente da camada convectiva. Esta camada não tem contato com o solo, pois se encontra acima da camada limite estável.

2.4 Zona de entranhamento

A zona de entranhamento está comprometida de $0.8h$ a $1.2h$. Nesta região a estrutura da turbulência pode ser dominada por efeitos de entranhamento, pelas características da capa de inversão e pela atmosfera estável acima. Observações de sondas acústicas revelaram penetrações de termas convectivas vindas de baixo. As escalas da *CLC* não podem assumir um comportamento universal nesta região.

2.5 Camada superficial (*CS*)

A camada superficial é parte inferior da camada limite planetária, imediatamente acima à superfície da terra, onde as variações de fluxo verticais podem ser ignoradas. O fluxo de momentum ou tensão cisalhante é definido por [Holtslag e Nieuwstadt, 1986],

$$\tau = \rho u_*^2, \quad (2.1)$$

onde ρ é a massa específica e u_* é a velocidade de fricção, e o fluxo de calor sensível para ar seco é, [Holtslag e Nieuwstadt, 1986],

$$H = \rho C_p \overline{w'T'}, \quad (2.2)$$

onde $\overline{w'T'}$ é fluxo de calor cinemático e C_p é o calor específico a pressão constante. Nesta camada superficial estes dois fluxos são considerados constantes com a altura e a espessura da *CS* é aproximadamente 10% da *CLP* [Panofsky e Dutton, 1984]. A partir destes fluxos superficiais, podem ser determinadas as condições de contorno que refletem o estado físico da *CLP*. Além disso, como forças mecânicas e térmicas influenciam a turbulência na *CS*, um método para sobrepor os efeitos destes dois tipos de forças, foi criado por Monin e Obukhov em 1954, por intermédio da teoria de similaridade [Panofsky e Dutton, 1984]. A essência da similaridade de *M – O* é a hipótese de que o campo médio e as propriedades turbulentas na *CS* dependem da altura z e de três mecanismos ou parâmetros guiadores, fluxo de momentum, fluxo de calor, e faltando expressar o parâmetro de empuxo g/T_0 , onde g é aceleração da gravidade e T_0 é a temperatura superficial. Estes três parâmetros do escoamento definem uma escala de comprimento (comprimento de Monin-Obukhov), definido como [Venkatram e Wyngaard, 1988]:

$$L = -\frac{C_p \rho T u_*^3}{k g H}, \quad (2.3)$$

onde T é a temperatura média do ar, $k = 0.4$ é a constante de Von Karman. L , também pode ser considerado como a altura limite vertical na qual os efeitos mecânicos não podem ser ignorados [Degrazia e Goulart, 2004], e ainda a altura na qual os efeitos mecânicos

se igualam aos efeitos de empuxo [Blackadar, 1997]. Logo, a hipótese de $M - O$ está baseada em intuições físico-matemáticas de que uma determinada variável atmosférica, dependente dos parâmetros de $M - O$, quando adimensionalizadas por z , u_* e θ_* , onde θ_* é:

$$\theta_* = \frac{\overline{w'T'}}{u_*} \quad (2.4)$$

torna-se uma função universal de z/L , onde z/L é denominado de parâmetro de estabilidade. A similaridade de $M - O$ tem funcionado bem para comportamentos observados de perfis de vento, temperatura e de variâncias das quantidades turbulentas na CS [Venkatram e Wyngaard, 1988]. Em condições de fluxo de calor positivo, o valor de L é negativo e quando o fluxo de calor é negativo L é positivo.

2.6 Camada Limite Neutra CLN

Em situações de fluxo de calor vertical proveniente do solo igual a zero, que ocorrem em dias de muito vento ou em dias e noites nublados [Panofsky e Dutton, 1984], forma-se a camada limite neutra. Nesta situação o comportamento da temperatura é estratificado de acordo com o gradiente adiabático de temperatura, mencionado anteriormente. Os forçantes mecânicos prevalecem nesta camada. São estabelecidos pela atrito entre as parcelas de ar em movimento e a superfície terrestre. O cisalhamento entre as parcelas de ar em movimento também ocorrem de forma significativa.

2.7 Camada Limite Instável ou Camada Limite Convectiva CLC

Em situações de fluxo de calor proveniente do solo positivo (dias ensolarados), e algum vento, existem dois mecanismos de movimento na CLP . Um é a turbulência mecânica, formada pelo cisalhamento do vento em relação à superfície. O outro é a convecção de calor, formado pelo gradiente de temperatura vertical [Panofsky e Dutton, 1984]. Ambos formam a Camada Limite Instável e mantêm a turbulência nela [Batchvarova e Gryning, 1990], com intensidade turbulenta bem maior do que em outras situações de estabilidade (figura 2.1).

Valores típicos da espessura h da *CLC* podem variar de 1-2 km no horário de maior fluxo de calor (próximo ao meio dia).

A espessura h é definida como espessura próxima ao solo onde a camada limite exibe um comportamento turbulento bem desenvolvido [Van Ulden e Holtslag, 1985]. Com o perfil de temperatura, obtido por meio de uma radiosonda, é possível determinar h , percebendo a existência de uma pequena estratificação de temperatura (figura 2.4).

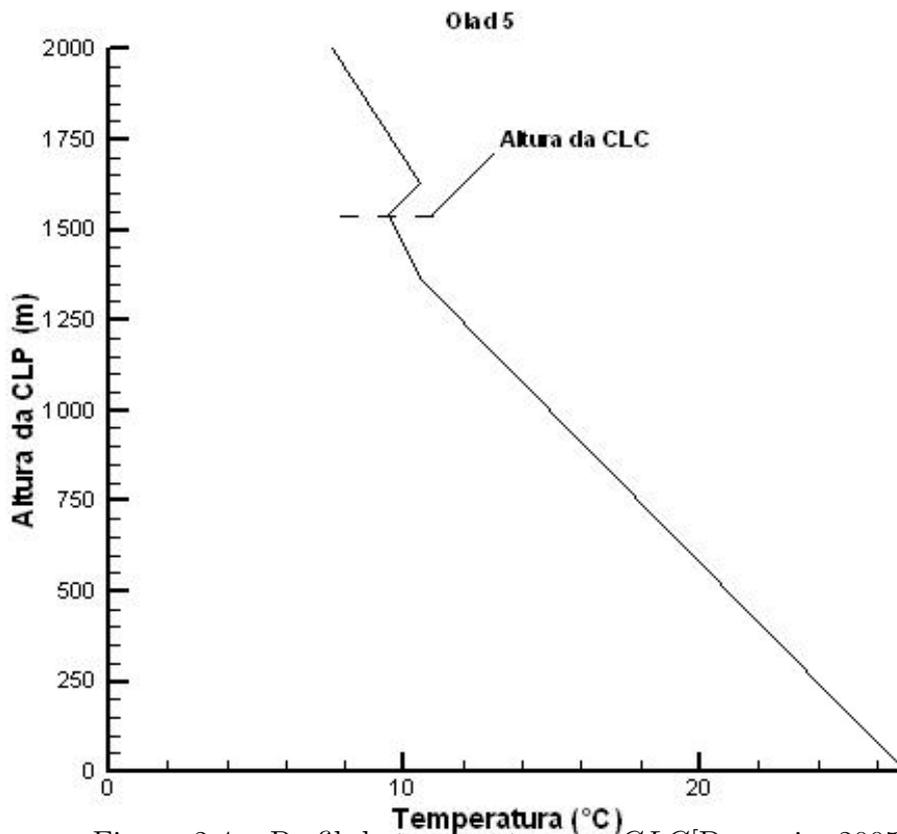


Figura 2.4 – Perfil de temperatura na *CLC*[Degrazia, 2005]

Na *CLC*, a escala de velocidade turbulenta característica deixa de ser u_* , dando lugar a velocidade vertical convectiva w_* ou velocidade das termas,

$$w_* = \left(\frac{gHh}{C_p \rho T_0} \right)^{1/3} \quad (2.5)$$

que passa a ter maior importância, quando o fluxo de calor é positivo, na criação da turbulência convectiva [Degrazia, 2005]. Numa camada bem desenvolvida, w_* pode atingir,

em dias de verão, valores próximos a 2 m/s [Venkatram e Wyngaard, 1988].

2.8 Camada Limite Estável *CLE*

Em noites claras com ventos fracos, quando o fluxo de calor na superfície é proveniente de camadas superiores mais quentes que a superfície (fluxo de calor negativo), forma-se a camada limite estável. Nesta camada, diferentemente da camada convectiva, o cisalhamento é destruído pela estratificação térmica (figura 2.5), pois há uma competição

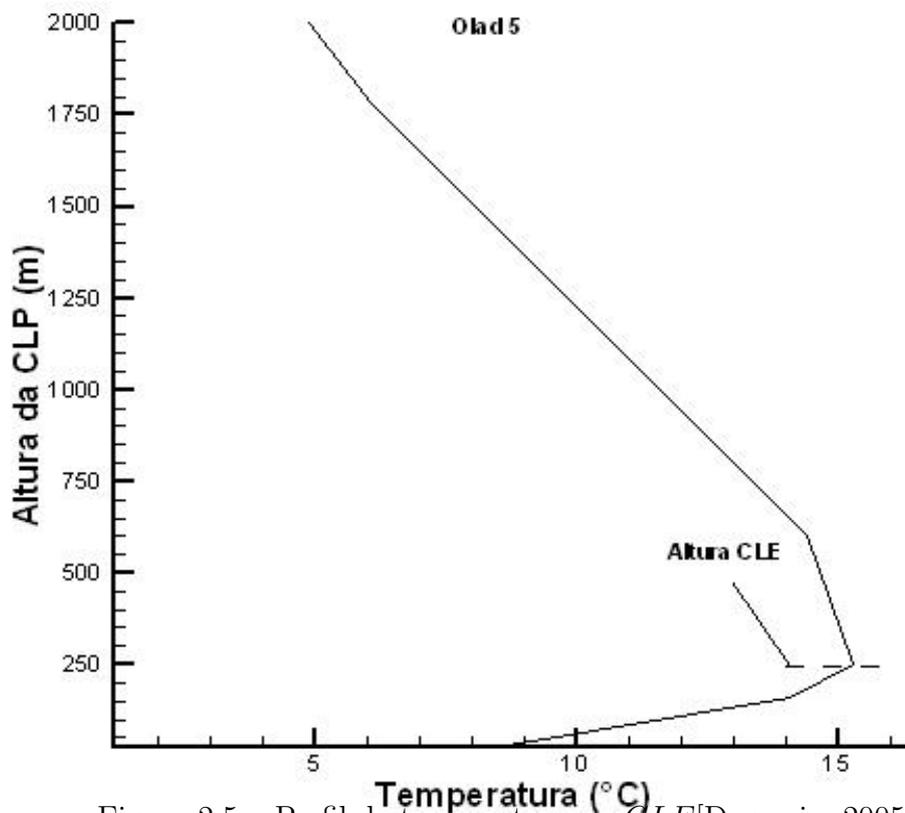


Figura 2.5 – Perfil de temperatura na *CLE*[Degrazia, 2005]

entre cisalhamento e forças de empuxo que tentam manter as parcelas de ar em suas posições originais [Venkatram e Wyngaard, 1988]. Nesta situação, a intensidade turbulenta é muito menor que a encontrada numa *CLC*. Um valor típico da espessura h da *CLE* é 100m. Nesta região, ainda existe turbulência essencialmente mecânica [Panofsky e Dutton, 1984], que não foi suprimida pelo fluxo de calor negativo [Holtslag e Nieuwstadt,

1986]. Uma expressão típica para a espessura da CLE é [Panofsky e Dutton, 1984],

$$h = 0.4 \sqrt{\frac{u_* L}{f}} \quad (2.6)$$

onde f é o parâmetro de Coriolis, definido por:

$$f = 2\Omega \sin(\iota) \quad (2.7)$$

sendo ι a latitude e Ω é a taxa de rotação da terra. Esta é o mecanismo gerador da turbulência em condições estáveis, responsável também pelo crescimento da CLE [Panofsky e Dutton, 1984].

3 FORMULAÇÃO DO MODELO TURBULENTO

A presente abordagem origina-se da equação dependente do tempo de [Batchelor, 1949], para a evolução do tempo de decorrelação Lagrangeano T_{L_i} :

$$T_{L_i} = \frac{\beta_i}{2\pi} \int_0^\infty F_i^E(n) \frac{\sin(2\pi nt/\beta_i)}{n} dn \quad (3.1)$$

com $i = u, v$ e w sendo as componentes ortogonais, onde F_i^E é o espectro Euleriano de energia normalizado pela variância da velocidade do vento σ_i^2 , β_i é o fator de escala definido formalmente como a razão entre as escalas de tempo integral Lagrangeana e Euleriana, n é a frequência, e t é o tempo de viagem. Do ponto de vista físico, F_i^E descreve a energia cinética contida no escoamento distribuída entre as distintas frequências (vórtices). O espectro é estabelecido pela distribuição da variância de uma determinada quantidade, neste caso as componentes turbulentas da velocidade do vento. O fator de escala β_i presente permite estabelecer T_{L_i} Lagrangeano com base na observação de espectro Euleriano. Além disso a Eq. (3.1) contendo β_i , expressa o tempo de decorrelação Lagrangeano em termos de uma razão entre o espectro de energia Euleriano e a variância da velocidade vertical Euleriana.

É de comum conhecimento que a dispersão turbulenta na CLP neutra é gerada por processos mecânicos e está relacionada com o cisalhamento do vento, sendo mais eficaz próximo do solo. Estes mecanismos de força produzem um número elevado de vórtices no escoamento, com infinitos graus de liberdade. A presente abordagem surge a partir dos espectros de velocidade euleriana sob condições neutras e pode ser descrito como uma função de escalas cisalhantes na CLP [Alves et al., 2012]:

$$\frac{nS_i(n)}{u_*^2} = \frac{1.5C_i\Phi_\varepsilon^2 f}{\left[1 + \frac{1.5f^{5/3}}{(f_m)_i^{5/3}}\right](f_m)_i^{5/3}} \quad (3.2)$$

onde $C_i = \alpha_i(0.5 \pm 0.02)(2\pi\kappa)^{-2/3}$; $\alpha_i = 1/4, 4/3$ e $4/3$ para as componentes u , v e w , respectivamente; $\kappa = 0.4$ é a constante de von Karman, $f = nz/U$ é a frequência

adimensional (n sendo a frequência cíclica, U a velocidade horizontal média do vento e z é a altura da observação), $(f_m)_i$ é a frequência adimensional de pico espectral neutro e $u_*^2 = (u_{*0})^2[1 - (z/h)]^{1.7}$ é a velocidade de fricção local para uma CLP neutra, com u_{*0} sendo a velocidade de fricção superficial e h o comprimento da CLP. A taxa de dissipação adimensional é definida como $\Phi_\varepsilon = \kappa z \varepsilon / (u_{*0})^3$, onde ε é a energia cinética turbulenta dissipativa por unidade de tempo e por unidade de massa do fluido, e sua magnitude depende somente dos vórtices mais energéticos. Os valores de α_i , apresentados anteriormente, são estabelecidos do espectro de energia do subintervalo inercial para uma turbulência isotrópica. A integração analítica da equação Eq. (3.2) sobre todo o domínio da frequência estabelece a variância da velocidade Euleriana turbulenta e foi determinada como [Alves et al., 2012; Degrazia et al., 2013]

$$\sigma_i^2 = \frac{1.5zC_i\Phi_\varepsilon^{2/3}u_*^2}{U(f_m)_i^{2/3}} \int_0^\infty \frac{dn}{[1 + 1.5(\frac{nz}{U(f_m)_i})^{5/3}]} \quad (3.3)$$

e

$$\sigma_i^2 = \frac{2.32C_i\Phi_\varepsilon^{2/3}u_*^2}{(f_m)_i^{2/3}} \quad (3.4)$$

a qual é utilizada para normalizar o espectro, portanto o espectro Euleriano pode ser escrito como:

$$F_i^E = \frac{S_i(n)}{\sigma_i^2} = \frac{0.64z}{(f_m)_i} \{1 + 1.5(\frac{nz}{U(f_m)_i})^{5/3}\}. \quad (3.5)$$

Substituindo Eqs. (3.4) e (3.5) na Eq. (3.1) e considerando $\beta_i = 0.55U/\sigma_i$, se estabelece a expressão para o tempo de escala de decorrelação Lagrangeana [Degrazia et al., 2013]

$$T_{L_i} = \frac{0.037z}{C_i^{1/2}\Phi_\varepsilon^{1/3}u_*(f_m)_i^{2/3}} \int_0^\infty \frac{\sin(an)dn}{n[1 + 1.5(\frac{nz}{U(f_m)_i})^{5/3}]} \quad (3.6)$$

Os demais termos da equação (3.6) são definidos como

$$\frac{\beta_i}{2\pi} = \frac{0.057U(f_m)_i^{1/3}}{C_i^{1/2}\Phi_\varepsilon^{1/3}u_*}, \quad (3.7)$$

$$\frac{2\pi t}{\beta_i} = a = \frac{17.4UC_i^{1/2}\Phi_\varepsilon^{1/3}(f_m)_i^{1/3}}{(f_m)_i^{1/3}} \frac{z}{\bar{U}} \frac{Xu_*}{Uz} \quad (3.8)$$

onde uma transposição do tempo para o espaço é aplicada na dependência temporal da equação (3.1) para se obter um T_{L_i} espacialmente dependente, com $X' = Xu_*/Uz$, sendo uma distância adimensional definida pela razão do tempo de viagem X/U e a escala temporal turbulenta de cisalhamento z/u_* . Definindo $n' = bn$ onde $b = [\frac{1.5}{(f_m)_i^{5/3}}]^{3/5} \frac{z}{\bar{U}}$, a equação (3.6) pode ser escrita como

$$T_{L_i} = \frac{0.037z}{C_i^{1/2}\Phi_\varepsilon^{1/3}u_*(f_m)_i^{2/3}} \int_0^\infty \frac{\sin(an'/b)}{[1 + (n')^{5/3}]} \frac{dn'}{n'} \quad (3.9)$$

a qual se expande para

$$T_{L_i} = \frac{0.037z}{C_i^{1/2}\Phi_\varepsilon^{1/3}u_*(f_m)_i^{2/3}} \int_0^\infty \frac{\sin(13.64C_i^{1/2}\Phi_\varepsilon^{1/3}u_*(f_m)_i^{2/3}X'n')}{[1 + (n')^{5/3}]n'} dn'. \quad (3.10)$$

Os parâmetros turbulentos $(f_m)_i$ e Φ_ε devem ser inferidos de observações de campo em condições atmosféricas dominadas pelo cisalhamento do vento na CLP. Para o caso neutro, o pico espectral de frequência $(f_m)_i$ descreve as características espaciais e temporais dos turbilhões (vórtices) contendo a maior energia, e podem ser expressos como as referências [Costa et al., 2012; Chang et al., 2003; Arbage et al., 2008; Olesen et al., 1984]:

$$(f_m)_i = (f_m)_{0i} \left[1 + 0.03a_i \frac{f_c z}{u_{*0}} \right], \quad (3.11)$$

onde $(f_m)_{0i}$ é o pico espectral de frequência na superfície, $f_c = 10^{-4} s^{-1}$ é o parâmetro de Coriolis, e $a_u = 3889$, $a_v = 1094$ e $a_w = 500$ [Degrazia et al., 2000]. No presente es-

tudo, os valores de Φ_ε e do pico espectral de frequências $(f_m)_i$ foram medidos durante um fenômeno meteorológico conhecido como escoamento do vento norte (EVN), que ocorre em escala regional no centro do estado do Rio Grande do Sul, no sul do Brasil [Arbage et al., 2008]. As condições atmosféricas sinópticas associadas ao EVN são caracterizadas por intensas velocidades médias de vento, deste modo o elevado cisalhamento vertical do vento foi produzido predominantemente pela turbulência mecânica. Portanto, uma das principais peculiaridades das presentes parametrizações da turbulência (valores de $(f_m)_i$ e Φ_ε obtidos dos casos EVN) é que são estabelecidas para situações de dispersão turbulenta neutra. Para uma discussão mais detalhada sobre as medições da turbulência obtidas durante os eventos do EVN é sugerido o artigo de [Arbage et al., 2008]: $(f_m)_{0u} = 0.04$, $(f_m)_{0v} = 0.1$ and $(f_m)_{0w} = 0.33$, os quais estão em total acordo com medições micrometeorológicas de experimentos clássicos como Kansas e Minnesota [Olesen et al., 1984]. Numa condição atmosférica neutra é esperado que Φ_ε se aproxime da unidade, devido ao balanço entre a produção de atrito (cisalhamento) e a dissipação viscosa turbulenta na ausência de qualquer produção de empuxo e transporte. Portanto, o valor de $\Phi_\varepsilon = 1.1$ obtido do subintervalo inercial do espectro de velocidade vertical está em boa concordância com os resultados do experimento de Kansas [Olesen et al., 1984; Kaimal et al., 1972] e com predições teóricas [Arbage et al., 2008; Olesen et al., 1984; Kaimal et al., 1972]. Neste ponto, é importante ressaltar que os dados experimentais do EVN tem papel importante, na presente análise, de permitir estabelecer os valores de $(f_m)_i$ e Φ_ε para as equações (3.4), (3.10) e (3.11). Para fortes ventos, como os que ocorrem durante o EVN, uma condição de estabilidade neutra na CLP deve ser considerada. Deste modo, para ventos acima 6 m/s, como observado no EVN e durante os experimentos utilizados para validar as parametrizações, a turbulência mecânica predomina sobre os efeitos térmicos e consequentemente a CLP pode ser assumida numa condição neutra.

O tempo de decorrelação Lagrangeano para as componentes da velocidade do vento u , v e w podem ser derivados da Equação (3.10) assumindo os valores empíricos do EVN. Para proceder, o tempo de decorrelação Lagrangeano pode ser obtido das equações (3.10) e (3.11) como função da distância a favor do vento X' e da altura z usando C_i ,

$(f_m)_{0i}$, $\Phi_\varepsilon = 1.1$ e também h [Arbage et al., 2008; Panofsky e Dutton, 1984; Garrat, 1992]:

$$h = \frac{0.2u_{*0}}{f_c}. \quad (3.12)$$

Assim, as expressões para as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana são derivadas

$$T_{Lu} = \frac{0.6z}{u_{*0}[1 - z/h]^{0.85}[1 + 23.33z/h]^{2/3}} \int_0^\infty \frac{\sin(0.84[1 + 23.33z/h]^{2/3}X'n')dn'}{[1 + (n')^{5/3}]n'}, \quad (3.13)$$

$$T_{Lv} = \frac{0.28z}{u_{*0}[1 - z/h]^{0.85}[1 + 6.56z/h]^{2/3}} \int_0^\infty \frac{\sin(1.82[1 + 6.56z/h]^{2/3}X'n')dn'}{[1 + (n')^{5/3}]n'} \quad (3.14)$$

e

$$T_{Lw} = \frac{0.13z}{u_{*0}[1 - z/h]^{0.85}[1 + 3.0z/h]^{2/3}} \int_0^\infty \frac{\sin(4.03[1 + 3.0z/h]^{2/3}X'n')dn'}{[1 + (n')^{5/3}]n'}. \quad (3.15)$$

Estas novas expressões do tempo de decorrelação serão validadas com dados de concentração medidos em experimentos no campo próximo, intermediário e distante de uma fonte contínua elevada ou próxima ao solo. Estas quantidades permitem a estimativa da dispersão turbulenta dependentes da distância e da altura. Portanto, são importantes expressões na determinação da dispersão atmosférica longitudinal, lateral e vertical de contaminantes.

4 EXPERIMENTO OLAD

O experimento OLAD foi conduzido de 8-25 de setembro de 1997 na localidade de Dugway (*U.S. Army Dugway Proving Ground*), no *West Desert Test Center (Target S)*, que está localizado no centro-oeste do estado de Utah, aproximadamente 1300 m acima do nível do mar. O objetivo principal do teste, foi adquirir informações do deslocamento longitudinal da pluma de poluentes (σ_x) sobre distâncias de 2-20 km. O objetivo secundário do experimento, foi determinar a uniformidade lateral da dispersão da pluma, de uma fonte em linha, perpendicular à direção principal do vento.

O teste foi realizado com a liberação de quantidades conhecidas de hexafluoreto de enxofre (SF_6) ao longo de uma linha perpendicular a direção prevalecente do vento. As liberações foram realizadas por sistemas de disseminação montados em um caminhão e um avião. O sistema de disseminação montado no avião produziu uma liberação de 33 kg/min de emissão, por uma distância de 20 km (fonte em linha de 20km), a 100m do nível do solo. A linha de liberação não foi apresentada na figura, pois não foram realizadas simulações para fontes elevadas. O sistema montado no caminhão produziu a liberação de 1,5 kg/min de emissão, por uma distância de 10 km (fonte em linha de 10 km), sobre a linha vermelha da figura 4.1, a 3m do nível do solo. A liberação do gás traçador durante o teste 258 foi realizada no dia 15 de setembro. Três ensaios foram empregados em condições de vento forte (10 m/s) do quadrante sudeste em uma camada limite planetária próxima da neutralidade. Já no dia 9 de setembro, o experimento foi conduzido em uma camada limite levemente estável, com ventos moderados (5 m/s) do quadrante sudeste. A estimativa da altura da camada de mistura foi de 250 metros. A denominação para o teste do dia 9 de setembro é OLAD 252.

A pluma em linha de poluentes foi carregada (advecção) na direção dos analisadores de concentração. As amostras de concentração foram obtidas, usando-se três linhas de amostragem paralelas às fontes em linha, variando de 2 a 20 km. Existiram dois tipos de amostradores de concentração, um formado por bolsas de amostragem, e o outro por analisadores contínuos. As bolsas de amostragem produziram amostras médias de concentrações de 15 minutos, necessárias para a determinação da uniformidade da pluma ao longo da linha de amostragem. Os analisadores contínuos proveram rápida

resposta das medições de concentração (próxima a 1 segundo), provendo o detalhamento temporal necessário para definir a chegada da pluma e definir o deslocamento longitudinal da pluma. Geralmente, nas primeiras horas da manhã, a velocidade do vento é baixa. Nestas situações, a direção do vento varia bastante (fenômeno de meandro do vento), logo, o deslocamento da pluma pode não ter uma direção principal definida. Por isso, para não permitir que a pluma desviasse dos analisadores, optou-se por uma fonte em linha de comprimento suficiente para acomodar o fenômeno do meandro. Por ter o local do teste, *Target S*, um rumo aberto por 10 km nas direções noroeste e sudeste, com um arranjo de rodovias perpendiculares à direção predominante do vento, provou-se adequado para a realização do experimento. Assim, nos testes de fonte baixa as bolsas de amostragem foram dispostas em linha paralelas à fonte, nas distâncias de 2, 5 e 10 km, sobre as linhas verdes, espaçados de 100 em 100 metros. Os analisadores contínuos também foram dispostos nestas rodovias, porém foram montados em veículos que se deslocavam. Nos testes de fonte elevada (100 m), os analisadores foram dispostos nas distâncias de 10, 15 e 20 km, com as mesmas configurações do teste de fonte baixa.

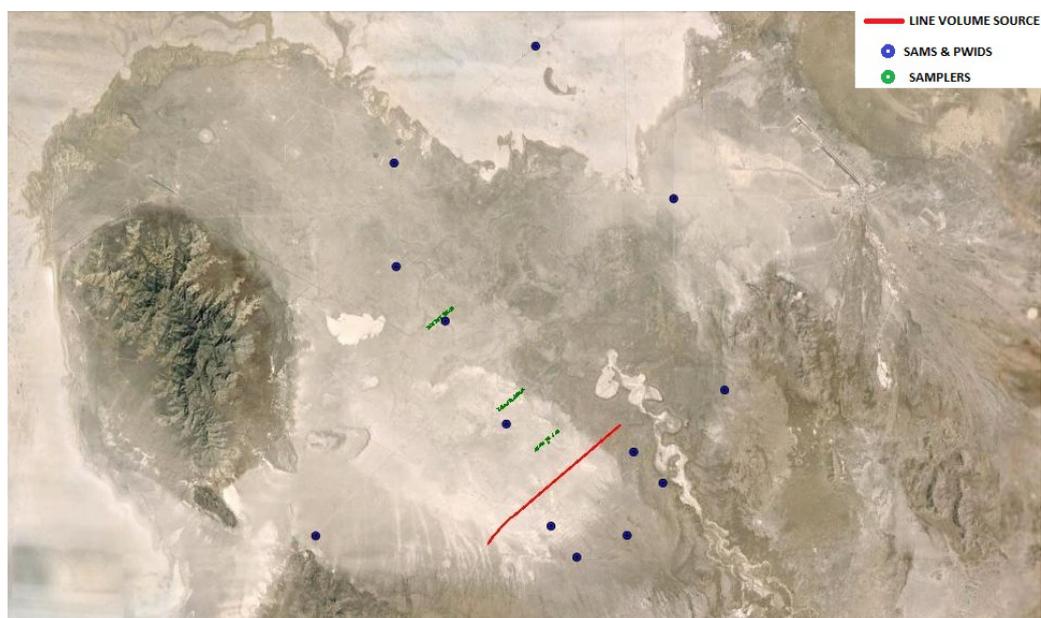


Figura 4.1 – Local do teste OLAD no *Dugway Proving Ground*, com a apresentação da localização da linha de disseminação de contaminantes, linhas de amostragens e locais de medições meteorológicas.

Para a medição das variáveis meteorológicas foram instaladas oito estações de

medição, *PWIDS* (*Portable Weather Information and Display System*) e oito estações *SAMS* (*Surface Atmospheric Measurements Systems*). As *PWIDS* obtiveram dados à 2 metros do solo, de velocidade do vento, temperatura, umidade relativa e direção do vento, com resolução de 10 segundos. Já as estações *SAMS*, proveram medições de velocidade do vento, umidade relativa, direção do vento temperatura, etc, à 10 metros do solo, com resolução de 15 minutos. Além destas estações, foram liberados em horários determinados pelos realizadores, balões meteorológicos (radiosondas, *pibals*). Neste trabalho, analisaram-se todos os dados de velocidade do vento, direção do vento e temperatura, eliminando-se aqueles com problemas de leitura de medição e descartando as estações que não continham uma série temporal contínua de dados [Biltoft et al., 1999].

Para determinar a rugosidade superficial aerodinâmica do terreno (z_0), foi utilizado o método de inspeção, observando que o solo do local de teste é formado, principalmente, por barro seco liso, com presença escassa de gramas e arbustos. Assim, determinou-se que $z_0 = 0.03 \text{ m}$.

5 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO MODELO CALPUFF

Os modelos do tipo *puff* tentam representar uma pluma real por um número de pacotes discretos de poluentes. A maioria dos modelos como dos seguintes autores [Ludwig et al., 1977; van Egmond e Kesseboom, 1983; Petersen, 1986] avaliam a contribuição de um *puff* em um receptor com a abordagem do tipo *snapshot*. Cada *puff* é congelado no tempo em um tempo específico (passo de tempo). Por conseguinte, a concentração neste passo de tempo é computada (amostrada). Depois é permitido ao *puff* se movimentar, alongar, comprimir até o próximo passo de tempo. A concentração em um determinado local é estabelecida pela soma de todos os *puffs* próximos no passo de tempo sob avaliação. Por razão do tipo de aplicação, o passo de tempo e o tempo de amostragem podem variar de uma hora até valores maiores. No modelo CALPUFF o passo de tempo mínimo é de uma hora. Duas alternativas convencionais para a função *snapshot* de amostragem são empregadas no uso do CALPUFF. O primeiro método de amostragem emprega uma função de integração radialmente simétrica para os *puffs* Gaussianos. O segundo esquema utiliza um *puff* não circular (*slug*), alongado na direção do vento durante a emissão, basicamente para limitar a necessidade de emissões frequentes de *puffs*. A equação básica para a contribuição de um *puff* em um receptor é definida por:

$$C = \frac{M}{2\pi\sigma_x\sigma_y} g \exp[-d_a^2/(2\sigma_x^2)] \exp[-d_c^2/(2\sigma_y^2)] \quad (5.1)$$

e

$$g = \frac{2}{(2\pi)^{1/2}\sigma_z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp[-(H_e + 2nh)^2/(2\sigma_z^2)] \quad (5.2)$$

onde C é a concentração superficial, M é a massa de poluente no *puff*, σ_x é o desvio padrão da distribuição Gaussiana na direção predominante do vento, σ_y é o desvio padrão da distribuição Gaussiana na direção cruzada ao vento predominante, σ_z é o desvio padrão da distribuição Gaussiana na direção vertical, d_a é a distância entre o centro do *puff* até o receptor na direção predominante do vento, d_c é a distância entre o centro do *puff* até o receptor na direção cruzada ao vento predominante, g é o termo vertical da equação

Gaussiana, H é a altura efetiva acima do solo do centro do *puff* e h é a altura da camada limite planetária. A soma no termo vertical g , contabiliza as múltiplas reflexões desde o topo da CLP até o solo. Para um *puff* simétrico horizontalmente, com $\sigma_x = \sigma_y$, a (5.1) reduz-se a:

$$C(s) = \frac{M(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \exp[-R^2(s)/(2\sigma_y^2(s))] \quad (5.3)$$

onde, R é a distância do centro do *puff* até o receptor, e s é a distância percorrida pelo *puff*. A dependência da distância nas variáveis da equação (5.3) é indicada como $C(s)$, $g(s)$, $\sigma_y(s)$, $M(s)$ e $R(s)$. Integrando a equação (5.3) sobre todas as distâncias percorridas, ds , durante o passo de tempo, dt , fornece a concentração média \bar{C} .

$$\bar{C} = \frac{1}{ds} \int_{s_0}^{s_0+ds} \frac{M(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \exp[-R^2(s)/(2\sigma_y^2(s))] ds \quad (5.4)$$

onde s_0 é o valor de s no começo do passo de tempo. Uma solução analítica para esta integral pode ser obtida se é assumido que a mais significativa dependência de s durante o passo de tempo está relacionada aos termos $R(s)$ e $M(s)$. A figura a seguir ilustra o movimento de um *puff* nas coordenadas (x_1, y_1) até (x_2, y_2) . Assumindo que a trajetória é um segmento de linha reta, e transformando s em uma trajetória variável adimensional p , a distância radial até o receptor em (x_r, y_r) é:

$$R(s) = [(x_1 - x_r + p dx)^2 + (y_1 - y_r + p dy)^2]^{1/2} \quad (5.5)$$

onde p é zero no começo do segmento da trajetória em (x_1, y_1) , $p = 1$ no fim do segmento da trajetória em (x_2, y_2) e dx e dy são os incrementos X e Y de distância percorrida pelo *puff*. Por exemplo, $dx = x_2 - x_1$ e $dy = y_2 - y_1$. A variação exponencial de M devido a remoção e decorrente de processos de transformações químicas é expressa por uma função linear no intervalo de amostragem (passo de tempo):

$$M(s) = M(s_0) + p[M(s_0 + ds) - M(s_0)]. \quad (5.6)$$

Com a utilização da equação (5.6) e transformando para coordenadas p , a equação (5.4) se torna:

$$\begin{aligned} \bar{C} = \frac{g}{2\pi\sigma_y^2} \{ & M(s_0) \int_0^1 \exp[-R^2(p)/(2\sigma_y^2)] dp + \\ & [M(s_0 + ds) - M(s_0)] \int_0^1 p \exp[-R^2(p)/(2\sigma_y^2)] dp \}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

A solução das integrais na equação (5.7) é expressa em termos de funções de erro e exponenciais:

$$\bar{C} = \frac{g}{2\pi\sigma_y^2} \{ M(s_0)I_1 + [M(s_0 + ds) - M(s_0)]I_2 \}, \quad (5.8)$$

$$I_1 = \left[\frac{\pi}{2a}\right]^{1/2} \exp\left[\frac{b^2}{2a} - \frac{c}{2}\right] \left\{ \operatorname{erf}\left[\frac{a+b}{(2a)^{1/2}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{b}{(2a)^{1/2}}\right] \right\}, \quad (5.9)$$

$$I_2 = \frac{-bI_1}{a} + \frac{1}{a} \exp\left[\frac{b^2}{2a} - \frac{c}{2}\right] \left\{ \exp\left[\frac{-b^2}{2a}\right] - \exp\left[\frac{-1}{2}\left(a + 2b + \frac{b^2}{a}\right)\right] \right\}, \quad (5.10)$$

$$a = (dx^2 + dy^2)/\sigma_y^2, \quad (5.11)$$

$$b = [dx(x_1 - x_r) + dy(y_1 - y_r)]/\sigma_y^2, \quad (5.12)$$

$$c = [(x_1 - x_r)^2 + (y_1 - y_r)^2]/\sigma_y^2. \quad (5.13)$$

O coeficiente de dispersão horizontal σ_y e o termo vertical g , são avaliados e mantidos constantes ao longo do segmento de cada trajetória. Estas duas variáveis são computadas no ponto central do segmento ($p=0.5$). Em simulações que envolvem distâncias de mesoescala, a mudança fracional no tamanho do *puff* durante o passo de tempo é

usualmente pequena, logo, o uso do ponto central para σ_y e g é adequado. Essas suposições reduzem o número de passos de tempo que os coeficientes de dispersão e o termo de reflexão vertical precisam para serem computados. Estas otimizações, entretanto, não são apropriadas para simulações próximas às fontes, onde a taxa de crescimento fracional do *puff* pode ser rápida e a altura da pluma pode variar. Por esta razão, a função de integração de amostragem foi implementada com valores específicos de σ_y e g , estabelecidos no ponto de maior aproximação do *puff* para cada receptor.

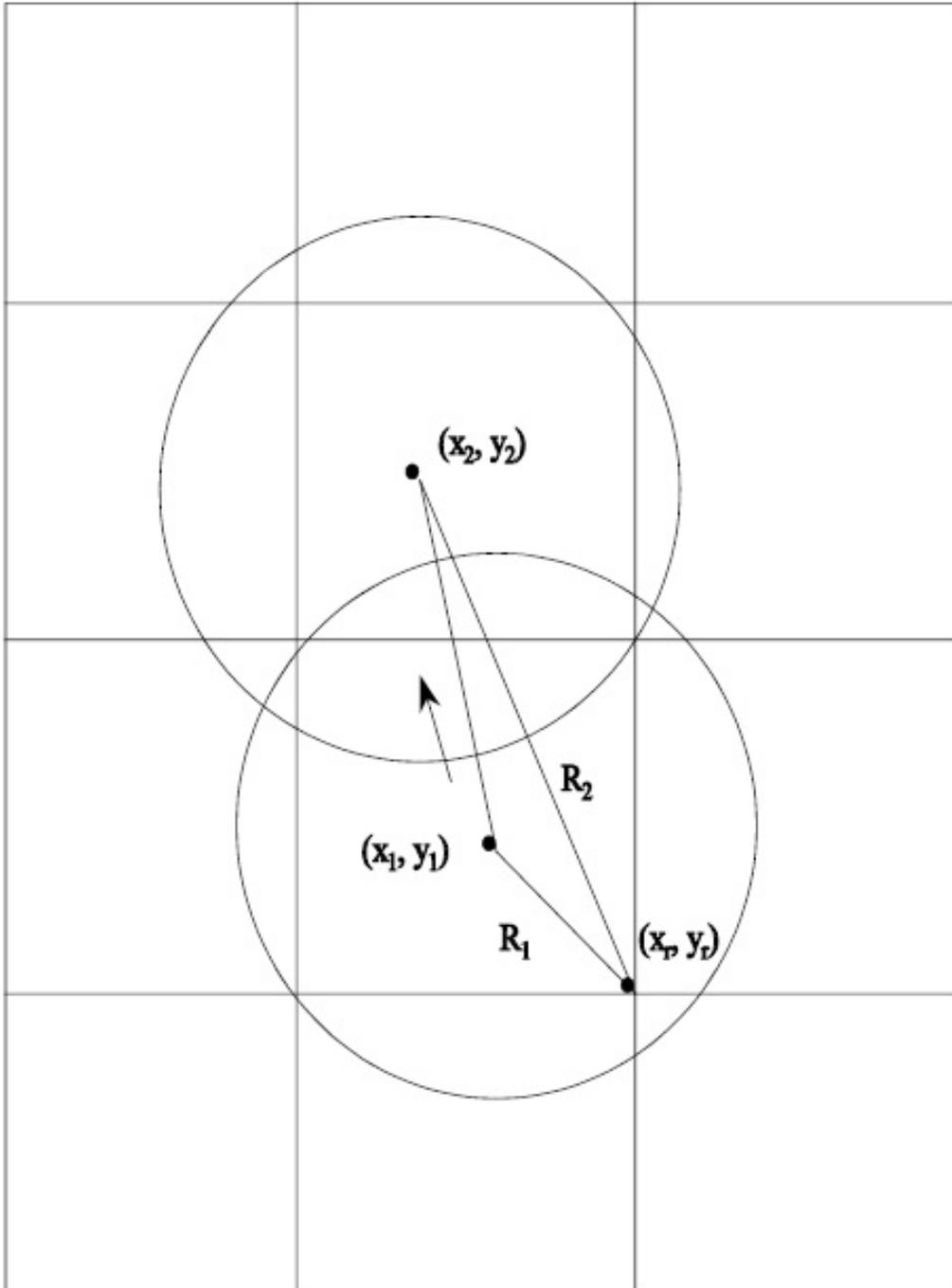


Figura 5.1 – Ilustração do movimento de um *puff* durante um passo de tempo

6 AVALIAÇÃO DO MODELO CALPUFF

A região analisada compreende a área do *West Desert Test Center* presente na Figura 4.1. Nas simulações foram incluídas a localização da fonte de emissão, a quantidade emitida do gás traçador, os amostradores de concentração atmosférica e as estações meteorológicas de superfície e altitude (radiosondas). A topografia foi incorporada na área de modelagem com o uso de imagens de satélite. Estes dados de elevação do terreno permitiram adicionar uma topografia de 90 metros de resolução espacial. Deste modo, nas simulações com o uso do CALPUFF o terreno influencia a dispersão de poluentes no local de estudo. Os dados digitais do terreno foram disponibilizados pela NASA (*National Aeronautics and Space Administration*).

A performance do modelo CALPUFF foi estabelecida, inicialmente, pela comparação dos níveis de concentração superficial do gás traçador hexafluoreto de enxofre com os resultados experimentais. O primeiro teste de avaliação do modelo selecionado, juntamente com as parametrizações do tempo de decorrelação Lagrangeano, foi o experimento OLAD 258, realizado no dia 15 de Setembro de 1997. Neste ensaio foi observada uma camada limite planetária neutra em virtude de uma significativa velocidade do vento de 10 m/s. O tempo de amostragem e de simulação para este primeiro teste foi de 3 horas. O modelo CALPUFF trata as fontes em linha pela aproximação desta por várias fontes de volume ao longo do comprimento da linha de emissão.

Dois tipos de simulações utilizando o modelo CALPUFF foram avaliadas para verificar a performance das parametrizações e do modelo. A primeira simulação foi a do CALMET CALPUFF, na qual as variáveis micrometeorológicas foram determinadas pela ferramenta de previsão CALMET, com a incorporação de todas as estações meteorológicas presentes na Figura 4.1. Portanto, na simulação com CALMET CALPUFF a variabilidade espacial dos dados meteorológicos e micrometeorológicos foram incorporadas na modelagem da dispersão atmosférica.

Na modelagem com a utilização das equações (3.4) e (3.14), a distinção entre os modos de simulação ocorrem nas parametrizações da velocidade de fricção local, na variância turbulenta da velocidade do vento e, principalmente, no tempo de decorrelação Lagrangeano. Esta avaliação do CALPUFF foi baseada em dados superficiais e de perfil

Tabela 6.1 – Parâmetros meteorológicos e micrometeorológicos para as simulações.

MODELO	h (m)	u_{*0} (ms^{-1})	U_{10m} (ms^{-1})	L (m)	Q (gs^{-1})
CALMET-CALPUFF	280-500	0.15-0.65	4.0-10.0	∞	0,024
CALPUFF eq. (3.4) and Eq. (3.14)	600	0.7	10	1000	0,024

atmosférico para computar os resultados com diferentes tipos de parametrizações. Para incorporar estas descrições físicas do escoamento é necessário abandonar a variabilidade espacial dos dados meteorológicos e micrometeorológicos. O CALPUFF no modo SUPERFÍCIE e PERFIL trabalha apenas com valores médios do conjunto total das estações, ou seja, o campo meteorológico médio é equivalente a existência de apenas uma estação em todo o domínio da simulação. Foram utilizados os dados meteorológicos estabelecidos por [Biltoft et al., 1999].

A tabela (6.1) mostra os dados meteorológicos da simulação CALMET CALPUFF e das medições estabelecidas em [Biltoft et al., 1999] que foram adotados nas simulações da dispersão atmosférica com diferentes parametrizações turbulentas do escoamento. A tabela (6.2) apresenta os dados observados (Co) e previstos (Cp) de concentração superficial atmosférica. A figura 6.1 mostra o diagrama de espalhamento da concentração atmosférica superficial prevista em comparação com os dados observados de concentração. As figuras 6.1 e 6.2 apresentam o comportamento das simulações avaliadas neste trabalho.

Em geral, os resultados preliminares da simulação do CALPUFF claramente se deslocam da linha que contém os resultados experimentais. O mesmo é observado na razão Co/Cp entre concentração experimental e prevista. A imprevisibilidade do modelo aumenta para amostradores mais distantes em relação à fonte de emissão, como é observado na figura 6.2. O modelo CALPUFF tem sido adotado pela *U.S. Environmental Protection Agency* como o modelo preferido para avaliar grandes distâncias de transporte de poluentes. Normalmente empregado em simulações que superam os 50 quilômetros de distância entre a fonte e o receptor de interesse. Nos resultados das simulações, para os receptores localizados em distâncias superiores a 5000 metros, a falta de previsão é evidente. Deste modo, deve se ter bastante cuidado em simulações de grandes distâncias quando se emprega o modelo CALPUFF, em virtude da tendência de sub-previsão do modelo com o aumento da distância entre a fonte e o receptor. Com base nos resultados, ambos os

Tabela 6.2 – Concentrações superficiais observadas e previstas em diferentes distâncias da fonte de emissão.

Amostrador	<i>Dist.</i> (<i>m</i>)	<i>Experimento</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	<i>CALPUFF</i> eq.(10), (18) ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	<i>CALMET/CALPUFF</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	2000	2.59	0.89	1.27
2	2000	3.79	0.88	1.23
3	2000	2.48	0.88	1.23
4	2000	2.81	0.89	1.20
5	2000	3.45	0.92	1.33
6	2000	2.45	0.89	1.26
7	2000	2.76	0.89	1.18
8	5000	1.48	0.35	0.33
9	5000	1.17	0.35	0.32
10	5000	1.16	0.35	0.30
11	5000	1.14	0.35	0.29
12	5000	1.30	0.35	0.28
13	5000	1.41	0.35	0.26
14	5000	1.74	0.35	0.23
15	5000	1.31	0.35	0.23
16	5000	1.15	0.35	0.24
17	5000	1.38	0.35	0.24
18	5000	1.38	0.35	0.25
19	5000	1.33	0.35	0.26
20	5000	1.44	0.35	0.26
21	5000	1.43	0.35	0.25
22	5000	1.60	0.35	0.23
23	10000	0.31	0.27	0.17
24	10000	0.35	0.27	0.15
25	10000	0.30	0.27	0.14
26	10000	0.34	0.27	0.14
27	10000	0.46	0.24	0.12
28	10000	0.50	0.22	0.12
29	10000	0.47	0.20	0.10
30	10000	0.47	0.19	0.09
31	10000	0.47	0.19	0.09
32	10000	0.54	0.19	0.09
33	10000	0.52	0.19	0.09
34	10000	0.27	0.19	0.10
35	10000	0.50	0.19	0.10

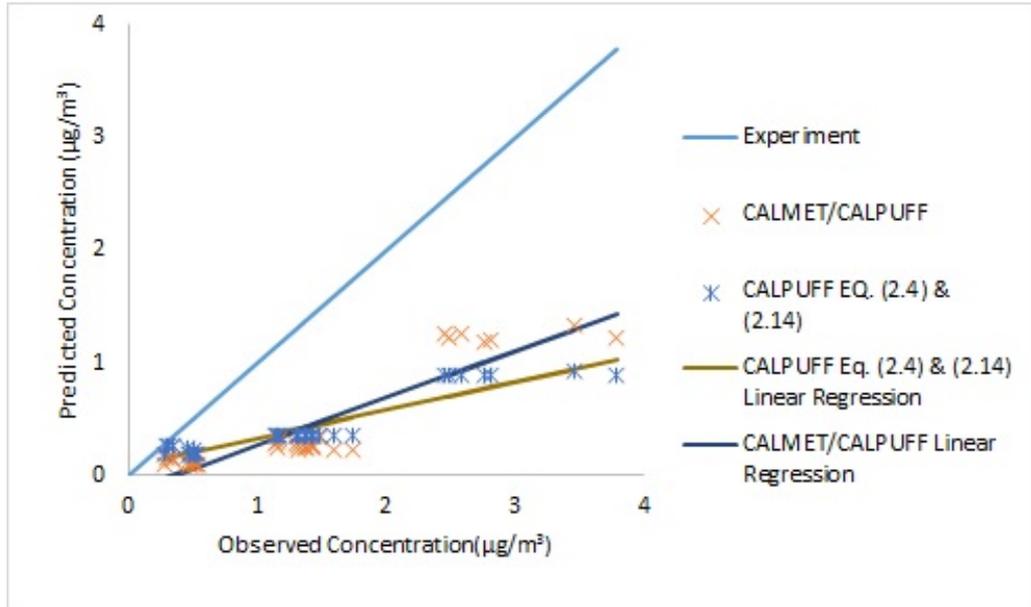


Figura 6.1 – Diagrama de espalhamento dos resultados modelados em comparação com os resultados observados de concentração superficial.

Tabela 6.3 – Comparação dos modelos com a regressão linear.

<i>Modelo</i>	<i>Regr. Linear</i>	<i>COR</i>	κ
CALMET-CALPUFF	$y = 0.4164x - 0.1455$	0.91	0.59
CALPUFF eq.(10) and (18)	$y = 0.2479x - 0.0836$	0.93	0.75

modelos nos distintos modos de simulação, para amostradores localizados próxima à fonte em linha (amostradores em distâncias menores de 2000m), possuem resultados similares e com maior acurácia na previsão da dispersão natural do poluente quando se avalia a razão C_o/C_p . A simulação CALMET CALPUFF estabeleceu resultados mais próximos da linha ideal da razão C_o/C_p próximo à fonte de emissão. Provavelmente, esta característica é associada à presença da variabilidade espacial do escoamento do fluido no modo de simulação CALMET CALPUFF. Ao contrário da nova parametrização do tempo de decorrelação que foi avaliado sem variabilidade espacial, no modo SUPERFÍCIE e PERFIL.

Regressões lineares também foram avaliadas para identificar o desvio da situação ideal conforme figura 6.1. Estas análises ajudam na determinação de como os modelos se correlacionam com dados esperados (caso ideal). A quantidade que mede o desvio é

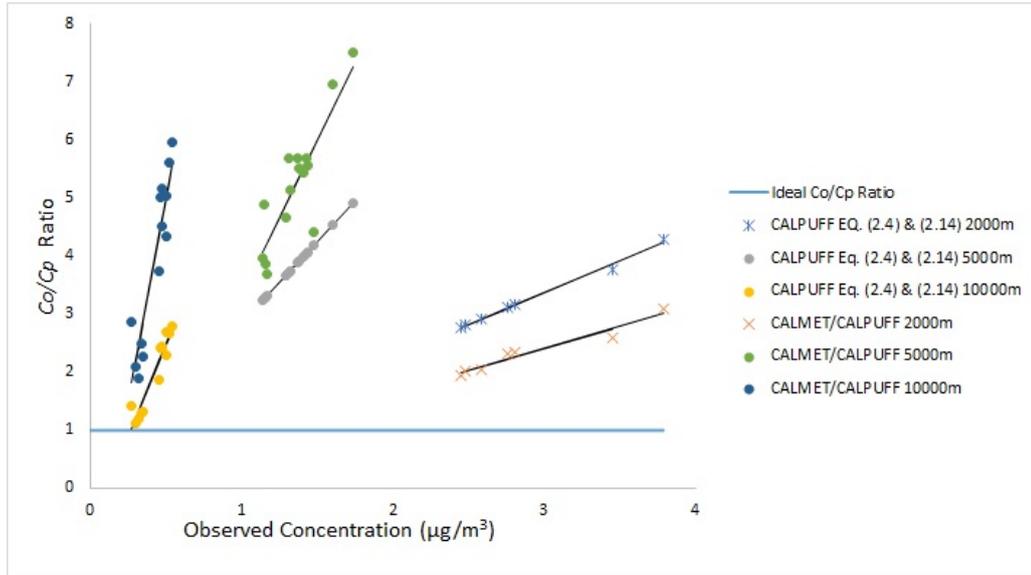


Figura 6.2 – Diagrama de espalhamento da razão Co/Cp em relação a concentração superficial observada.

definida como [Mello, 2010].

$$\kappa = \sqrt{(a - 1)^2 + \left(\frac{b}{C_o}\right)^2} \quad (6.1)$$

No caso ideal κ deve ser zero. O agrupamento dos dados em torno da linha reta pode ser analisado por intermédio do coeficiente de correlação mais próximo a 1.

A nova parametrização do tempo de decorrelação T_{Lv} , com base na equação (3.14) tem seu comportamento variável em função da altura, conforme figura 6.3. Isto permite estabelecer a escala predominante na dispersão atmosférica dependente da altura. Nas simulações empregadas com uso da nova parametrização, foram utilizados valores assintóticos de T_{Lv} estabelecidos pela integração numérica da equação (3.14) e introduzidos no modelo CALPUFF.

A figura 6.4 apresenta o comportamento dos perfis verticais de T_{Lv} a partir da equação (3.14). A dependência da distância da fonte é uma característica importante da nova parametrização. Simulações dependentes da distância foram empregadas para apresentar o comportamento da escala temporal de decorrelação. Particularmente para equação (3.14) foram graficados perfis verticais para três distâncias a partir da fonte

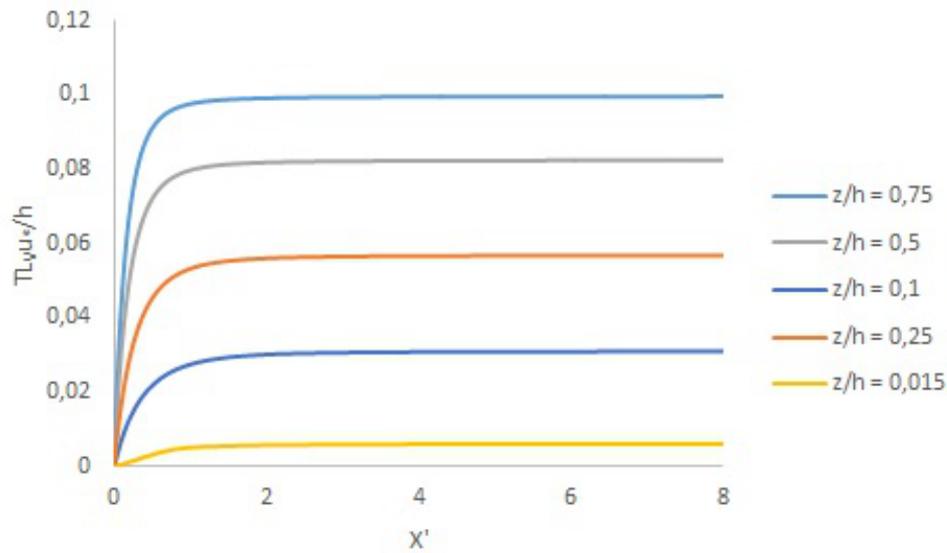


Figura 6.3 – Comportamento do tempo de decorrelação Lagrangeano para cinco alturas distintas $z/h = 0.015$, $z/h = 0.25$, $z/h = 0.1$, $z/h = 0.5$ e $z/h = 0.75$ como estabelecido pela equação (3.14) e o limite assintótico para grandes distâncias a partir da fonte de emissão.

de emissão ($x = 2000, 5000$ e $10000m$). Cada perfil representa um tempo de escala de decorrelação Lagrangeana bem desenvolvido, com a variação na altura entre a superfície $z = 0$ e o topo da camada limite planetária $z = h$.

A performance do modelo CALPUFF com diferentes modos de funcionamento e ainda com a inclusão de novas parametrizações é apresentada na tabela (6.3). A análise da regressão linear compara os resultados observados de concentração atmosférica superficial com os valores previstos pelo modelo. O coeficiente de correlação com base nas equações (3.4) e (3.14) é melhor quando comparado com o modo de simulação CALMET CALPUFF.

À primeira vista o modelo CALPUFF parece não ser adequado na descrição de um fenômeno natural pelo fato de que $R = Co/Cp \neq 1 \pm \delta$. O valor de δ é associado ao comportamento estocástico do fenômeno, enquanto o modelo CALPUFF é determinístico. Mais precisamente δ é também relacionado com o desconhecimento da função de distribuição de probabilidade.

A relação R em função da distância da fonte de emissão como função das concentrações observadas apresentaram elevados coeficientes de correlação, ou seja, acima

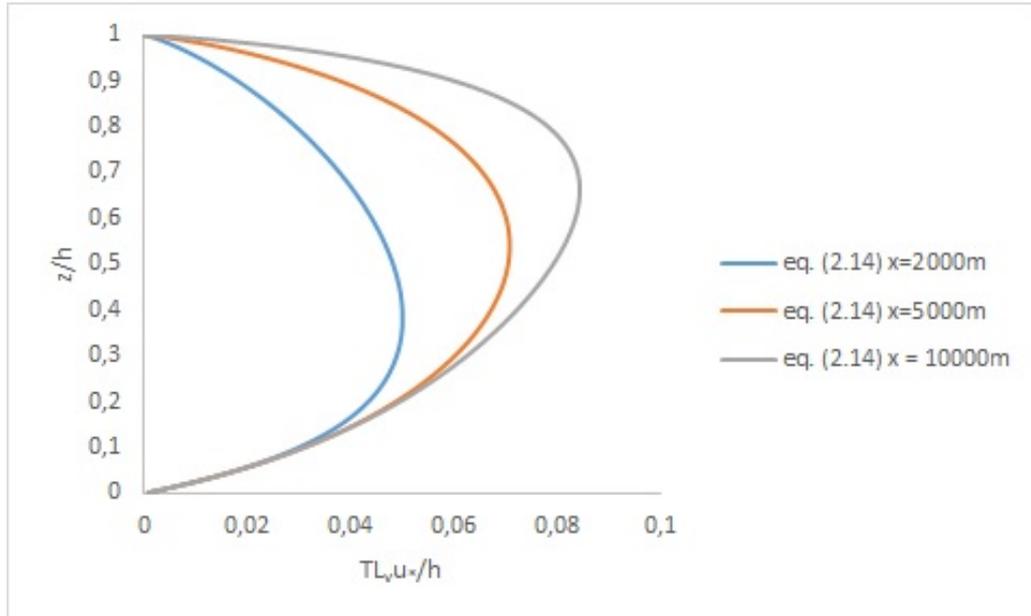


Figura 6.4 – Comportamento dos perfis verticais da escala de tempo de decorrelação Lagrangeano dependentes da distância da fonte. Valores estabelecidos para três diferentes distâncias $x = 2000, 5000$ e $10000m$ a partir da equação (3.14). As distâncias das fontes estão em acordo com as localização dos amostradores do experimento.

de 0.9. Com base neste dado pode ser sugerida uma correção no modelo CALPUFF, a partir de uma escala de correção que depende da concentração e da distância da fonte. Uma explicação física para essa escala de correção não-linear provém do fato de que o modelo CALPUFF implementa uma fonte como liberações instantâneas, enquanto que qualquer processo de emissão real é contínuo. As liberações instantâneas são fortemente influenciadas pelo passo de tempo entre o momento sem emissão e o passo seguinte de emissão. A diferença principal entre um processo real de emissão e uma representação matemática, está no fato de que em emissões contínuas próximo à fonte os gradientes de concentração são menos significativos em ordem de grandeza. Ao contrário disso, quando as liberações instantâneas tentam representar um processo de emissão atmosférica os gradientes são maiores. Conseqüentemente, nas liberações instantâneas o fluxo de poluentes para grandes distâncias é maior. Deste modo, concentrações atmosféricas sempre serão menores quanto mais distante da fonte a observação ocorrer, sempre quando comparadas com uma liberações reais e contínuas. Especialmente no caso do modelo CALPUFF, no qual o mínimo intervalo entre cada passo de tempo é no mínimo de uma hora. Os gradi-

entes menores para as liberações contínuas resultam do fato de que próximo à fonte existe dispersão de poluentes em todas as direções, e não somente na direção predominante do vento, logo com fluxo de poluentes menos significativo para maiores distâncias no caso real. Uma justificativa para este argumento é a figura 6.5 que apresenta as inclinações da razão C_o/C_p como função da concentração para as distâncias medidas no experimento. Portanto, se observa um aumento de inclinação para maiores distâncias o que corrobora com o raciocínio exposto.

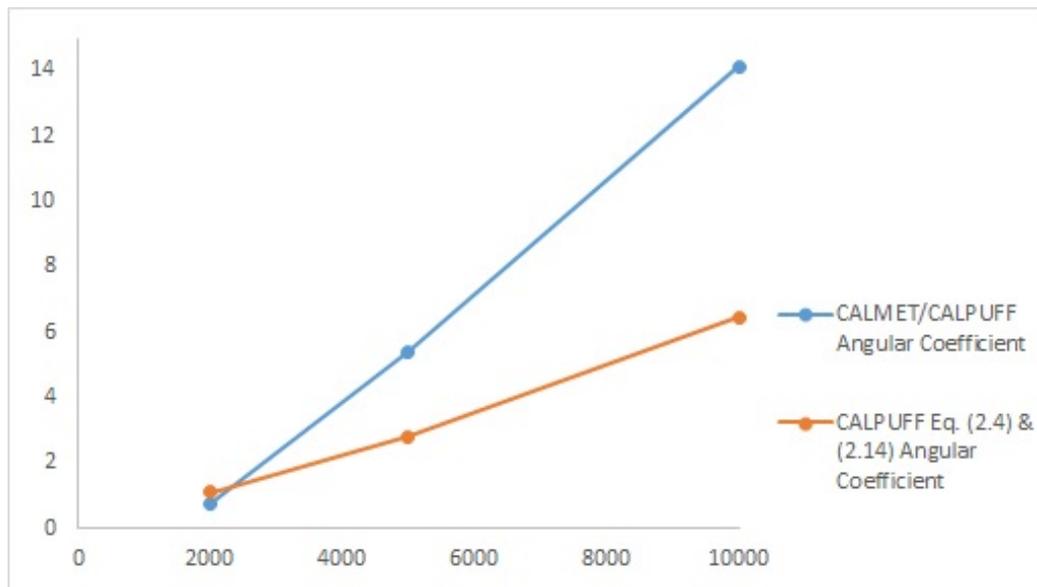


Figura 6.5 – Comportamento dos coeficientes angulares em função da distância, baseada numa regressão linear da razão C_o/C_p apresentada na figura 4.2

Estes resultados mostram a necessidade de corrigir o modelo. Além disso, os coeficientes de correlação elevados estabelecidos com os dados observados, indicam como corrigir as previsões do modelo por uma escala dependente da distância e da concentração. Esta carência do modelo CALPUFF era esperada, em virtude de o CALPUFF ser um modelo linear. Enquanto que o fenômeno da dispersão atmosférica se manifesta de forma não-linear.

7 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO MODELO LAMBDA

O modelo LAMBDA é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para a velocidade aleatória do escoamento [Thomson, 1987]. Assume-se em [Thomson, 1987] que a evolução dos deslocamentos das partículas e da velocidade (x, u) é um processo de Markov, ou seja presente e futuro são estatisticamente independentes quando o presente é conhecido. A velocidade e o deslocamento de cada partícula são representadas pelas seguintes equações [Rodean, 1996]:

$$du_i = a_i(x, u, t)dt + b_{ij}(x, u, t)dW_j(t) \quad (7.1)$$

e

$$dx = (U + u)dt \quad (7.2)$$

onde $i, j = 1, 2, 3$, x é o vetor deslocamento, U o vetor velocidade média do vento, u o vetor Lagrangeano de velocidade (velocidade de uma partícula do fluido associada a flutuação turbulenta de velocidade) [Taylor, 1921]), $a_i(x, u, t)dt$ é um termo determinístico, $b_{ij}(x, u, t)dW_j(t)$ é um termo estocástico e a quantidade $dW_j(t)$ são os incrementos de um processo de Wiener, um incremento aleatório na distribuição Gaussiana com média zero e variância dt .

A partir das descrições de $a_i(x, u, t)dt$ e $b_{ij}(x, u, t)dW_j(t)$ a integração numérica da equação (7.1), fornece a velocidade turbulenta e o resultado complementa a equação (7.2), para o estabelecimento da posição da partícula devido a combinação de efeitos do vento médio e da velocidade turbulenta. Estas equações definem as sucessivas posições das partículas no domínio da simulação sob a influência do vento médio e da velocidade turbulenta.

Primeiramente na determinação do coeficiente $a_i(x, u, t)dt$ é necessário impor a condição de boa mistura, deste modo as trajetórias das partículas devem prevalecer misturadas no escoamento. O critério de boa mistura é satisfeito pela função densidade de probabilidade (PDF) da velocidade Euleriana, $P_E(x, u, t)$, quando a equação de Fokker-

Planck satisfaz as equações (7.1) e (7.2). A equação estacionária de Fokker-Planck é dada como:

$$\frac{\partial P_E}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i P_E) - \frac{\partial}{\partial u_i}(a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_i}(B_{i,j} P_E) \quad (7.3)$$

onde $B_{i,j} = 1/2 b_{i,k} b_{j,k}$ e $P_E(x, u, t)$ é a função densidade de probabilidade Euleriana da velocidade turbulenta. A equação (7.3) fornece a relação entre a função $a_i(x, u, t)$ e as características estatísticas do escoamento turbulento, representada pela distribuição de probabilidade P_E . Logo, os termos do lado direito da equação de Fokker-Planck representam a advecção, a convecção e a difusão turbulenta, respectivamente. O coeficiente determinístico $a_i(x, u, t)$ é obtido por:

$$a_i P_E = \frac{\partial}{\partial u_i}(B_{i,j} P_E) + \phi_i(x, u, t) \quad (7.4)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial u_i} = -\frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i}(u_i P_E) \quad (7.5)$$

com a condição $\phi_i \rightarrow 0$ quando $u \rightarrow \infty$. O coeficiente determinístico a_i é obtido a partir da equação (7.4) como

$$a_i = -B_{i,j} V_{i,k}^{-1}(u_k - U_k) + \frac{\phi_i}{P_E}, \quad (7.6)$$

onde $V_{i,k} = \langle (u_i - U_i)(u_k - U_k) \rangle$. Na equação (7.6), o primeiro termo representa a perda de memória e o segundo termo a correção *drift* a qual é uma função espacial do gradiente de velocidade.

Na equação (7.6) é necessário determinar a função $\phi_i(x, u, t)$. De acordo com Thomson (1987) uma solução particular é a distribuição de velocidade Gaussiana. Por-

tanto, Thomson utilizou a equação (7.5) para obter as seguintes expressões para ϕ_i :

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i}{P_E} = & \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \\ & \frac{\partial V_{i,j}}{\partial x_j} + \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \right. \\ & \left. \frac{V_{i,m}^{-1}}{2} \left(\frac{\partial V_{j,m}}{\partial t} + \right. \right. \\ & \left. \left. U_k \frac{\partial V_{j,m}}{\partial x_k} \right) \right] (u_j - U_j) + \frac{1}{2} (V^{-1})_{i,m} \frac{\partial V_{k,m}}{\partial x_j} (u_j - U_j) (u_k - U_k). \end{aligned} \quad (7.7)$$

O segundo critério requer que o modelo de partícula forneça resultados corretos no subintervalo inercial. Deste modo, o coeficiente $b_{i,j}(x, u, t)$ é determinado pela comparação da função estrutura Lagrangeana da velocidade, derivada a partir da equação (7.1).

$$\overline{(du_i)^2} = b_{i,j}^2 dt, \quad (7.8)$$

com a função estrutura estabelecida pela teoria de Kolmogorov para o subintervalo inercial ($T_k \ll \Delta t \ll T_L$) [Rodean, 1996]:

$$\overline{(du_i)^2} = \delta_{ij} C_o \varepsilon dt. \quad (7.9)$$

Então com as equações (7.8) e (7.9), mostra-se que $b_{i,j}(x, u, t)$ está relacionada com a constante C_o da seguinte forma:

$$b_{i,j} = \delta_{ij} \sqrt{C_o \varepsilon} \quad (7.10)$$

onde δ_{ij} é a delta de Kronecker, C_o é a constante de Kolmogorov e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta mencionada anteriormente. Pode-se perceber que a função estrutura é uma quantidade muito importante para os modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos. O produto $C_o \varepsilon$ também pode ser representado como função da variância das flutuações de velocidade (σ_i^2) e das escalas de tempo de decorrelação Lagrangeano

(T_{L_i}) [Hinze, 1975; Tennekes, 1982]:

$$b_{i,j} = \delta_{ij} \sqrt{C_o \varepsilon} = \delta_{ij} \left(2 \frac{\sigma_i^2}{T_{L_i}}\right)^{1/2}, \quad (7.11)$$

demonstrando que as entradas mais importantes numa simulação numérica de dispersão de poluentes, quando a equação de Langevin é utilizada, são a variância da velocidade do vento σ_i^2 e as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeano T_{L_i} , ou a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta ε e a constante de Kolmogorov C_o [Timm, 2007].

Na representação da velocidade vertical, num modelo estocástico de partículas Lagrangeano, uma assimetria também deve ser considerada. Especialmente na presença de fenômenos físicos conhecidos como *updrafts* e *indrafts*. Ocorrem quando a radiação solar aquece o solo e transfere o calor do solo para as parcelas de ar adjacentes. Logo, uma assimetria existe pelo fato de que os *updrafts* têm maiores velocidades e ocupam menores áreas. Enquanto que os *indrafts* têm velocidades menores e ocupam áreas maiores. Normalmente, este tipo de característica atmosférica é mais perceptível ou ocorre em uma camada limite planetária instável. Contudo, os movimentos assimétricos verticais podem existir e influenciar o movimento da partículas em outras situações de estabilidade [Ferrero e Anfossi, 1998b]. A partir disso, uma PDF assimétrica é requerida e foi proposta por [Luahr e Britter, 1989; Weil, 1990], introduzida por [Baerentsen e Berkowicz, 1984]. A construção da PDF é realizada pela combinação linear de duas distribuições Gaussianas. O modelo de Langevin para a coordenada vertical é escrita da forma a seguir:

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, w, t)dW(t) \quad (7.12)$$

e

$$dz = wdt \quad (7.13)$$

onde todos os termos têm o mesmo significado das equações (7.1) e (7.2). A equação de

Fokker-Planck para a condição estacionária é:

$$\frac{\partial[wP_E(w, z)]}{\partial z} = -\frac{\partial[a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2[b^2(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2} \quad (7.14)$$

onde o significado físico dos coeficientes a e b são os mesmos da equação de Langevin para a coordenada horizontal. De acordo com [Thomson, 1987], uma simplificação pode ser aplicada para o coeficiente b da seguinte maneira $b(z, w, t) = b(z, t)$. Logo, a equação de Langevin pode ser reescrita como:

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, t)dW(t) \quad (7.15)$$

e a equação de Fokker-Planck se torna

$$\frac{\partial[wP_E(w, z)]}{\partial z} = -\frac{\partial[a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2[b^2(z, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2}. \quad (7.16)$$

Novamente a função estrutura Lagrangeana pode ser aplicada para a determinação de $b(z, t)$, resultando nas seguintes equações:

$$b(z, t) = [C_o\varepsilon(z)]^{1/2} \quad (7.17)$$

ou

$$b(z, t) = [C_o\varepsilon(z)]^{1/2} = (2\frac{\sigma_w^2}{T_{Lw}})^{1/2}. \quad (7.18)$$

Nas direções verticais $a(z, w, t)$ depende da PDF Euleriana $P_E(w, z)$ é obtida a partir de (7.16). [Thomson, 1987] estabeleceu que a equação de Fokker-Planck pode ser dividida em duas expressões para satisfazer a condição de boa mistura:

$$a(z, w, t)P_E(w, z) = \frac{\partial}{\partial w} \left(\frac{b^2(z, t)}{2} P_E(w, z) \right) + \phi(z, w, t) \quad (7.19)$$

e

$$\frac{\partial \phi(z, w, t)}{\partial w} = -w \frac{\partial P_E(w, z)}{\partial z} \quad (7.20)$$

com a condição $\phi_i \rightarrow 0$ quando $|w| \rightarrow \infty$.

Neste último caso, duas diferentes abordagens podem ser adotadas para calcular a equação de Fokker-Planck: uma a bi-Gaussiana, truncada na terceira ordem, e a outra uma Gram-Charlier, truncada na terceira ou quarta ordem [Anfossi et al., 1997; Ferrero e Anfossi, 1998a]. A PDF bi-Gaussiana é dada pela combinação linear de duas Gaussianas [Baerentsen e Berkowicz, 1984] e a PDF de Gram-Charlier é um tipo particular de expansão que utiliza funções ortonormais na forma de polinômios de Hermite. Neste trabalho foi utilizada a Gram-Charlier truncada na terceira ordem. A PDF Gram-Charlier, truncada na quarta ordem é dada como [Kendall e Stuart, 1977]:

$$P_E(x, z) = \frac{\exp^{x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} (1 + C_3 H_3 + C_4 H_4) \quad (7.21)$$

onde H_3 e H_4 são os polinômios de Hermite e C_3 e C_4 são os coeficientes dos polinômios de Hermite:

$$H_3 = x^3 - 3x \quad (7.22)$$

$$H_4 = x^4 - 6x^2 + 3 \quad (7.23)$$

$$C_3 = \overline{\mu_3}/6 \quad (7.24)$$

$$C_4 = (\overline{\mu_4} - 3)/24 \quad (7.25)$$

e $\overline{\mu_3}$, $\overline{\mu_4}$ são os momentos de w e $x = w/\sigma_w$. Em uma turbulência Gaussiana a equação

(7.23) reduz-se a uma distribuição normal (C_3 e C_4 igual a zero). Resolvendo as equações (7.19) e (7.20) onde P_E é dada por (7.21) a seguinte expressão para ϕ pode ser obtida:

$$\phi = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \frac{\exp^{-(x^2/2)}}{\sqrt{2\pi}} [1 - C_4 + x^2(1 + C_4) - 2C_3x^3 - 5C_4x^4 + C_3x^5 + C_4x^6]. \quad (7.26)$$

Das equações (7.17), (7.19), (7.21) e (7.26) a seguinte expressão para o coeficiente $a(z, w)$ é dada por [Ferrero e Anfossi, 1998b]:

$$a(z, w) = \sigma_w \frac{\frac{1}{T_{Lw}}(T_1) + \frac{\partial \sigma_w}{\partial z}(T_2)}{T_3}, \quad (7.27)$$

onde

$$T_1 = -3C_3 - x(15C_4 + 1) + 6C_3x^2 + 10C_4x^3 - C_3x^4 - C_4x^5 \quad (7.28)$$

$$T_2 = 1 - C_4 + x^2(1 + C_4) - 2C_3x^3 - 5C_4x^4 + C_3x^5 + C_4x^6 \quad (7.29)$$

$$T_3 = 1 + 3C_4 - 3C_3x - 6C_4x^2 + C_3x^3 + C_4x^4 \quad (7.30)$$

A PDF Gram-Charlier truncada na terceira ordem é obtida quando $C_4 = 0$.

No modelo LAMBDA, o campo de concentração é obtido a partir das trajetórias das partículas no escoamento. Quando o deslocamento das partículas no escoamento turbulento tem comportamento estocástico, a posição de cada partícula em cada passo de tempo, é dada pela maior probabilidade de encontrar essa partícula [Lamb, 1984]. Do ponto de vista numérico, a difusão turbulenta de poluentes na camada limite planetária é muito mais adequada em um sistema de referência Lagrangeano, por possuir menor difusão numérica [Wilson e Sawford, 1996].

As partículas são emitidas a partir da posição da fonte (x_0, y_0, z_0, t) e a concentração foi determinada pela posição do sensor (x, y, z, t) . O domínio de simulação foi dividido em subdomínios centrados em (x, y, z) , representando o volume do sensor. A

concentração foi estabelecida com base no tempo de permanência de cada partícula no volume do sensor. O tempo de residência no volume do sensor foi avaliado pela contagem do número de partículas no intervalo de tempo Δt .

$$C(x, y, z) = S \frac{V_f}{V_S} \frac{1}{N_{PEF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \delta t = S \frac{V_f}{V_S} \frac{\delta t}{N_{PEF}} N_{PVS} \quad (7.31)$$

onde N_{PEF} é o número de partículas emitidas na posição da fonte e em cada passo de tempo Δt , N_{PVS} é o número de partículas no sensor, V_S é o volume do sensor e V_f é o volume da fonte. A concentração em cada sensor foi calculada com a seguinte expressão:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} S_i \frac{V_{f,i}}{V_{s,j}} \frac{\delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (7.32)$$

onde C_j é a concentração no j-ésimo sensor, S_i é a i-ésima fonte, $V_{S,i}$ é o volume do i-ésimo sensor, $N_{PEF,i}$ é o número de partículas emitidas da i-ésima fonte e $N_{PVS,i,j}$ é o número de partículas emitidas da i-ésima fonte que se encontram no j-ésimo sensor. Pode-se, ainda, definir uma intensidade de emissão da i-ésima fonte como sendo:

$$Q_i = S_i V_{f,i} \quad (7.33)$$

e, assim, a equação (7.32) pode ser reescrita como:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} Q_i \frac{1}{V_{s,j}} \frac{\delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j}. \quad (7.34)$$

8 AVALIAÇÃO DOS MODELOS LAMBDA E CALPUFF

Neste capítulo, dois modelos foram utilizados para checar a consistência das parametrizações turbulentas das escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana. O primeiro *software* novamente a ser utilizado é o modelo CALPUFF, descrito anteriormente. No entanto, nesta etapa do estudo apenas o modo com variabilidade espacial dos dados meteorológicos, modo CALMET CALPUFF, foi utilizado. O outro *software* simulado é o modelo estocástico LAMBDA, o qual é baseado na formulação descrita previamente. As performances dos modelos foram estabelecidas pela comparação dos níveis de concentração superficiais simulados quando comparados com os resultados experimentais do gás traçador do experimento OLAD. Os testes foram escolhidos para simular dois dias do mês de setembro, pelo período de duração do experimento. No dia 9 de Setembro a atmosfera estava levemente estável, com ventos moderados de 5 m/s de direção sudeste. A altura da camada de mistura estimada foi de 250 m. A denominação para este teste do dia 9 é OLAD 252. Já no dia 15, ocorreu uma camada limite planetária neutra, devido, principalmente, pela presença significativa de vento forte, em torno de 10 m/s. Este mesmo dia já foi analisado previamente neste estudo, com a denominação de OLAD 258. No teste deste experimento OLAD 258, o período de amostragem utilizado foi de 15 minutos para as simulações com o modelo LAMBDA e de uma hora para o modelo CALPUFF. O período de amostragem, na simulação para representar o experimento OLAD 252, foi de 15 minutos para ambos os modelos, LAMBDA e CALPUFF.

Por ser um modelo de regulação, o CALPUFF, funciona apenas com simulações com passo de tempo mínimo de uma hora. Em consequência disto, foi necessário utilizar um artifício para prever a concentração atmosférica do CALPUFF para um período inferior a uma hora baseado em [Hino, 1968]. A concentração horária foi ajustada para o tempo de exposição de quinze minutos. O procedimento foi estabelecido a partir da seguinte expressão como segue:

$$C_{INT} = C_{MOD} \left[\frac{t_{MOD}}{t_{INT}} \right]^p \quad (8.1)$$

onde C_{INT} é a concentração de interesse revisada com relação ao tempo de exposição,

Tabela 8.1 – Parâmetros meteorológicos e micrometeorológicos para as simulações.

MODELO	h (m)	u_{*0} (ms^{-1})	U_{10m} (ms^{-1})	L (m)	Q (gs^{-1})
CALMET-CALPUFF OLAD 252	40-220	0.02-0.32	1.0-5.2	∞	0,025
CALMET-CALPUFF OLAD 258	60-460	0.1-0.65	4.0-10.0	∞	0,024
LAMBDA OLAD 252	250	0.35	5.4	100	0,025
LAMBDA OLAD 258	500	0.7	10.3	1000	0,024

C_{MOD} é a concentração prevista pelo modelo, t_{MOD} é o tempo médio na simulação (uma hora neste caso), t_{INT} é o tempo de exposição de interesse (quinze minutos para o OLAD 252), e p varia de acordo com (0.35 *Neutro* $< p < 0.65$ *Instavel*). Para esta simulação $p = 0.35$.

Os modelos CALPUFF e LAMBDA tratam as fontes em linha como fontes de volume, onde cada volume é disposto ao longo do comprimento da linha de emissão. Nas simulações com o uso do CALPUFF, foram dispostos 199 volumes sobre a linha de emissão do experimento OLAD. No caso da simulação com o modelo LAMBDA, apenas um único volume foi necessário para representar o volume da fonte em linha do experimento.

Nesta parte do trabalho, o primeiro modelo a ser simulado foi o CALPUFF, no qual todos os dados micrometeorológicos foram determinados pelo modelo meteorológico CALMET. Foram incorporadas todas as estações meteorológicas presentes na figura 4.1. Portanto, na modelagem da dispersão atmosférica com a utilização do CALPUFF a variabilidade espacial meteorológica e micrometeorológica estavam contidas na representação do fenômeno físico da dispersão turbulenta. No caso da simulação do modelo LAMBDA, foi considerado um terreno liso e as variáveis meteorológicas e micrometeorológicas não variaram no espaço. O modelo LAMBDA trabalha com valores médios de dados meteorológicas e micrometeorológicas. O tempo médio é definido pelo operador do modelo. Portanto, no caso do modelo LAMBDA, foi utilizado os dados meteorológicos estabelecidos por [Biltoft et al., 1999].

A tabela 8.1 mostra os dados meteorológicas e micrometeorológicas das simulações do CALMET CALPUFF. São apresentados também os dados de medições estabelecidas por [Biltoft et al., 1999] que foram utilizadas na determinação das parametrizações da dispersão turbulenta, para as simulações do modelo LAMBDA.

A comparação entre os dados de concentração do modelo com os dados observa-

Tabela 8.2 – Concentrações superficiais observadas e previstas a partir de diferentes distâncias da fonte de emissão - Experimento OLAD 252.

Amostrador	<i>Dist.Amostrador</i> (m)	<i>Conc.Observada</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	<i>CALMET – CALPUFF</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	<i>LAMBDA</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	2000	4.63	6.05	9.69
2	2000	12.43	6.01	10.01
3	2000	9.04	6.06	11.98
4	2000	13.62	5.81	11.98
5	2000	11.83	5.66	9.06
6	2000	14.47	7.06	11.03
7	2000	13.70	6.64	9.61
8	2000	13.65	6.56	9.30
9	2000	12.47	6.82	11.03
10	2000	13.29	7.09	10.72
11	2000	0.17	10.00	10.17
12	2000	12.48	6.19	10.24
13	2000	15.75	5.83	10.56
14	2000	16.82	6.60	11.98
15	5000	0.13	0.90	0.39
16	5000	0.10	0.86	0.79
17	5000	1.21	0.83	1.10
18	5000	0.08	0.94	1.10
19	5000	5.93	2.10	1.34
20	5000	0.09	1.12	0.95
21	10000	0.84	0.48	0.56
22	10000	0.88	0.47	0.66
23	10000	0.83	0.46	0.44
24	10000	0.75	0.44	0.48
25	10000	0.83	0.43	0.48
26	10000	0.90	0.41	0.58
27	10000	0.81	0.40	0.54
28	10000	0.83	0.37	0.53
29	10000	0.88	0.35	0.58
30	10000	0.82	0.34	0.54
31	10000	0.75	0.33	0.60
32	10000	0.83	0.32	0.57
33	10000	0.69	0.31	0.60
34	10000	0.66	0.30	0.56
35	10000	0.65	0.29	0.54

Tabela 8.3 – Concentrações superficiais observadas e previstas a partir de diferentes distâncias da fonte de emissão - Experimento OLAD 258.

Amostrador	<i>Dist.Amostrador</i> (<i>m</i>)	<i>Conc.Observada</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	<i>CALMET – CALPUFF</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	<i>LAMBDA</i> ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)
1	2000	2.87	1.37	2.28
2	2000	4.53	1.34	2.41
3	2000	2.62	1.32	2.41
4	2000	3.29	1.23	2.47
5	2000	3.78	1.40	2.38
6	2000	3.29	1.34	2.50
7	2000	4.20	1.24	2.38
8	2000	3.58	1.09	2.28
9	2000	4.26	1.00	2.32
10	2000	4.75	1.10	2.50
11	5000	1.70	0.41	1.19
12	5000	1.34	0.38	1.22
13	5000	1.35	0.35	1.04
14	5000	1.46	0.34	1.11
15	5000	1.40	0.33	0.98
16	5000	1.14	0.31	1.29
17	5000	1.41	0.28	1.20
18	5000	1.38	0.28	1.24
19	5000	1.03	0.29	1.09
20	5000	1.60	0.29	1.15
21	5000	1.56	0.29	1.05
22	5000	1.37	0.27	1.13
23	5000	1.26	0.24	1.30
24	5000	1.14	0.23	1.17
25	5000	1.19	0.23	1.07
26	10000	0.13	0.13	0.07
27	10000	0.17	0.12	0.08
28	10000	0.17	0.11	0.09
29	10000	0.21	0.11	0.08
30	10000	0.17	0.10	0.11
31	10000	0.17	0.09	0.08
32	10000	0.16	0.09	0.08
33	10000	0.23	0.09	0.08
34	10000	0.24	0.09	0.09
35	10000	0.24	0.09	0.17
36	10000	0.20	0.09	0.09
37	10000	0.31	0.09	0.07
38	10000	0.25	0.09	0.07

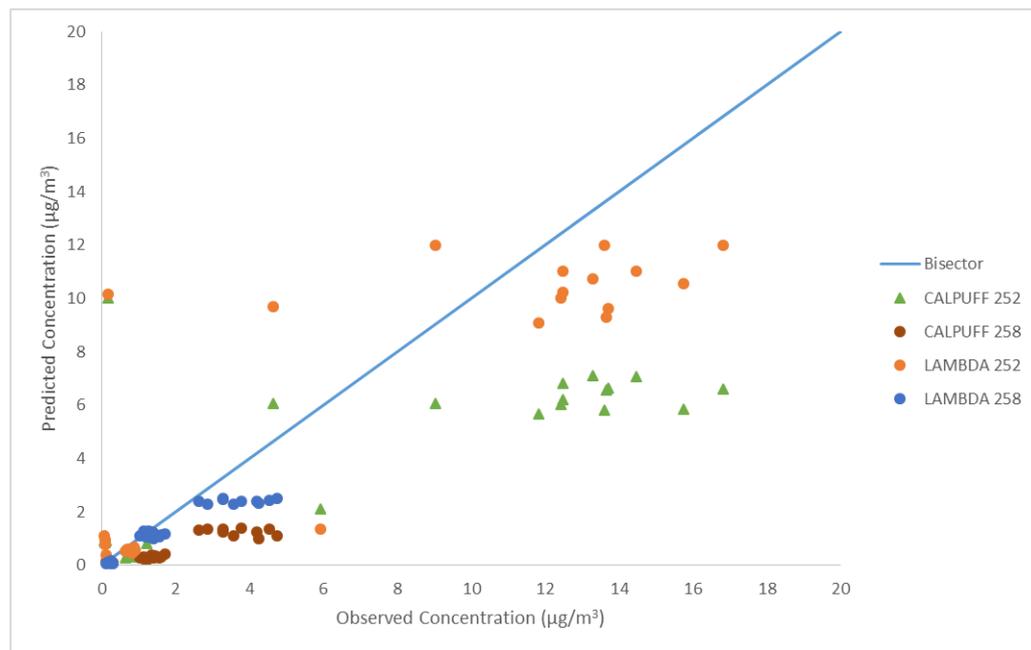


Figura 8.1 – Diagrama de espalhamento dos resultados modelados em comparação com as concentrações superficiais observadas.

dos no experimento OLAD foi realizada por intermédio de índices estatísticos presentes na literatura. Na análise estatística, empregou-se um programa desenvolvido por [Hanna, 1989]. Estes índices estatísticos são recomendados para validação e comparação de modelos, pela Agência de Proteção Ambiental Americana (EPA), pela Força Aérea Americana (*US Air Force*), pelo Instituto Americano do Petróleo (API), bem como pela comunidade científica da área de dispersão de poluentes na atmosfera após o *Workshop "Operational Short-Range Atmospheric Dispersion Models for Environmental Impact Assesments in Europa"*, realizado na Bélgica em 1994.

As notações utilizadas para os índices o e p indicam, respectivamente, as quantidades observadas e preditas, \bar{C} é a concentração de poluentes, e σ é o desvio padrão. Os índices estatísticos aplicados são definidos do seguinte modo:

$$1. \text{ Erro quadrático médio normalizado: } Nmse = \frac{(\bar{C}_o - \bar{C}_p)^2}{\bar{C}_o \bar{C}_p}$$

informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. É uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo.

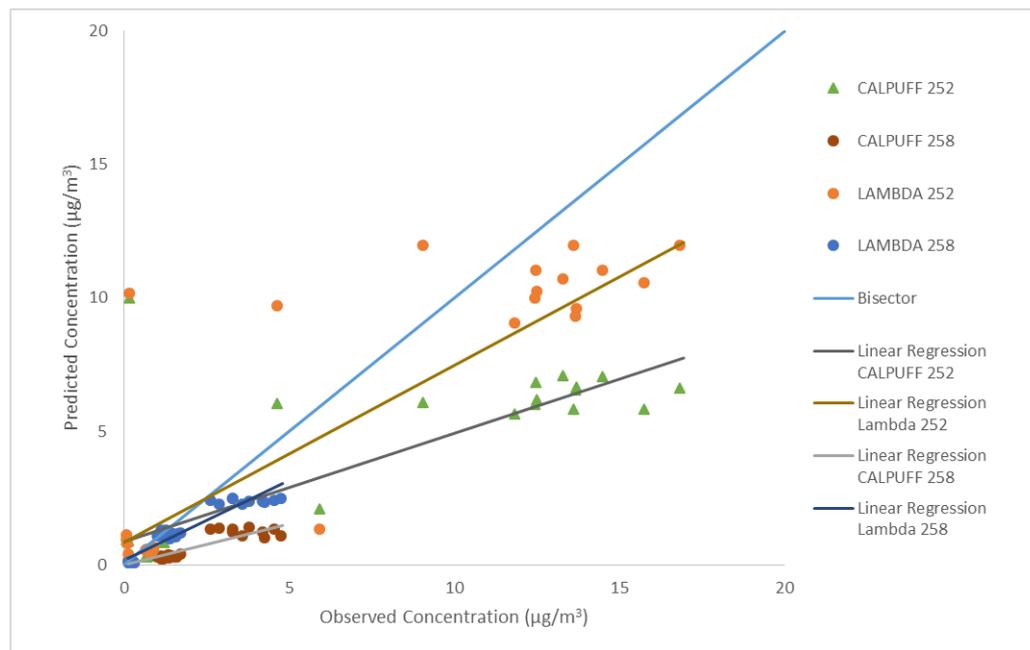


Figura 8.2 – Diagrama de espalhamento dos resultados modelados em comparação com as concentrações superficiais observadas com regressão linear.

2. Coeficiente de correlação: $Cor = \frac{\overline{(C_o - \bar{C}_o)(C_p - \bar{C}_p)}}{\sigma_o \sigma_p}$

descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para um boa performance, o seu valor deve tender 1.

3. Fator de dois: Fa2

fração de dados (%) que estão entre $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$

4. Fração de Inclinação: $Fb = \frac{\bar{C}_o - \bar{C}_p}{0,5(\bar{C}_o + \bar{C}_p)}$

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

5. Desvio fracional padrão: $Fs = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}$

O valor ótimo é zero.

Uma regressão linear também foi avaliada para identificar o desvio da situação ideal. A quantidade que mede o desvio é o κ definido como [Mello, 2010].

As figuras 8.1 e 8.2 apresentam o comportamento das simulações avaliadas neste estudo para os experimentos OLAD 252 e OLAD 258. Em geral as simulações do

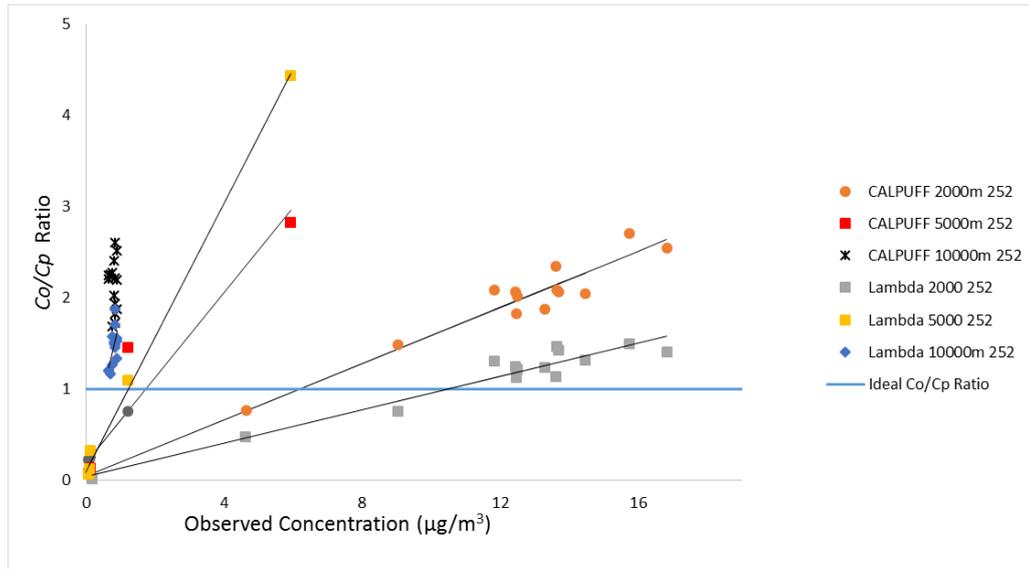


Figura 8.3 – Diagrama de espalhamento da razão C_o/C_p em relação aos dados observados de concentrações superficiais para o experimento OLAD 252.

Tabela 8.4 – Comparação dos modelos com regressão linear.

<i>Modelo</i>	<i>Regr.Linear</i>	<i>COR</i>	κ
CALMET-CALPUFF OLAD 252	$y = 0.4068 * x + 0.8582$	0.82	0.62
LAMBDA OLAD 252	$y = 0.6639 * x + .8341$	0.91	0.37
CALMET-CALPUFF OLAD 258	$y = 0.3072 * x - 0.0059$	0.93	0.69
LAMBDA OLAD 258	$y = 0.5994 * x + 0.1657$	0.95	0.41

CALPUFF claramente se afastam da linha que contém os dados experimentais. O mesmo comportamento é observado quando se avalia a linha de razão C_o/C_p ideal, por intermédio das figuras 8.3 e 8.4. A inacurácia do modelo CALPUFF aumenta a medida que se avalia os resultados simulados para amostradores mais distantes em relação à fonte, como pode ser observado nas figuras 8.3 e 8.4. O comportamento dos resultados das simulações, novamente, apresentaram a mesma característica observada em capítulo anterior. Foi também

Tabela 8.5 – Índices estatísticos para o experimento OLAD calculados com a os dados simulados pelo modelo LAMBDA e o modelo CALPUFF.

<i>Modelo</i>	<i>NMSE</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>	<i>COR</i>	<i>FA2</i>
CALMET-CALPUFF OLAD 252	1.41	0.57	0.67	0.82	0.26
LAMBDA OLAD 252	0.33	0.16	0.22	0.91	0.82
CALMET-CALPUFF OLAD 258	3.13	1.08	1.03	0.93	0.21
LAMBDA OLAD 258	0.37	0.35	0.46	0.95	0.81

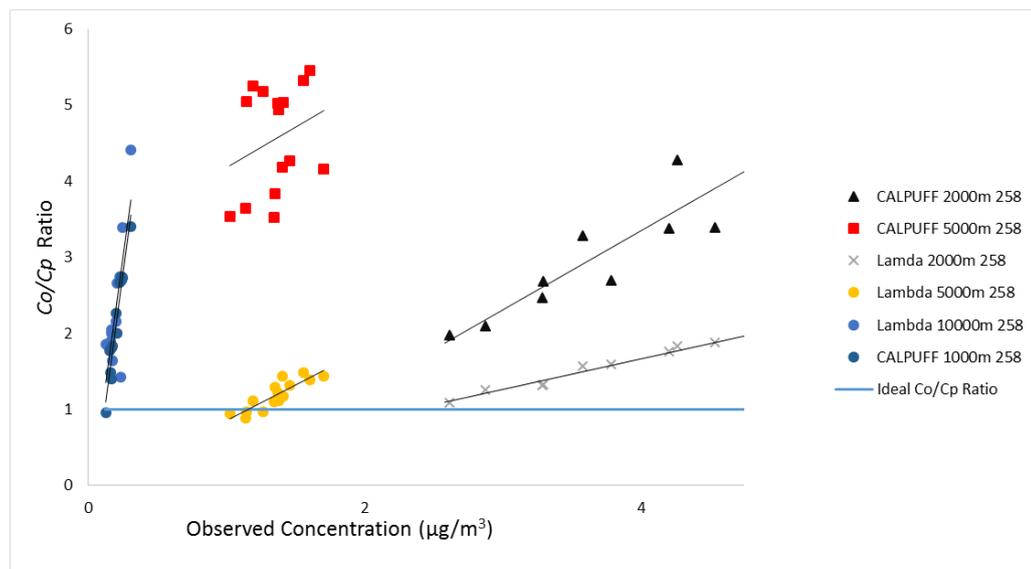


Figura 8.4 – Diagrama de espalhamento da razão C_o/C_p em relação aos dados observados de concentrações superficiais para o experimento OLAD 258.

observado, anteriormente, um aumento da imprevisibilidade quando se afasta da fonte de emissão. Além disso, se mostrou independente da estabilidade atmosférica o comportamento da imprevisibilidade em função da distância da fonte. A camada limite planetária levemente estável apresentou a mesma tendência de uma CLP neutra. Outro fato importante observado está relacionado ao passo de tempo. Nas simulações com o modelo CALPUFF, o mínimo passo de tempo é de uma hora, enquanto que para o caso do modelo LAMBDA o passo de tempo adotado é de um segundo. Por esta razão, a acurácia mais acentuada da abordagem Lagrangeana do modelo LAMBDA apresenta uma vantagem em relação à abordagem Euleriana do modelo CALPUFF. Entretanto, em geral, os resultados para receptores localizados acima de 2000 metros de distância da fonte, a imprevisibilidade é evidente. Portanto, é necessário ser bastante cauteloso para simulações de transporte de poluentes para grandes distâncias, principalmente quando se utiliza o modelo de regulação CALPUFF que apresenta uma tendência de subprevisão para fontes de emissão em linha instantâneas.

O modelo LAMBDA, com base nos resultados das simulações, tem maior acurácia na previsão do fenômeno natural de dispersão de poluentes. Pelo menos nas situações experimentadas dos testes OLAD 252 e OLAD 258. Um fato importante presente é a melhor

previsão do modelo LAMBDA mesmo quando são desconsideradas as variabilidades espaciais dos campos meteorológicos e micrometeorológicos. A desconsideração da topografia foi outro fato importante. O modelo LAMBDA considerou o terreno liso, ao contrário do modelo CALPUFF que utilizou dados de topografia disponibilizados pela NASA. Outra importante consideração é que nas emissões contínuas próxima à fonte os gradientes são menores quando comparados com gradientes de emissões instantâneas. Deste modo, o fluxo de poluentes para grandes distâncias é maior nas liberações instantâneas [Degrazia, 2005]. Como comentado anteriormente, os passos de tempo das simulações contribuem para diminuir a previsibilidade. No caso do modelo CALPUFF, o intervalo entre os passos de tempo é de uma hora (gradiente bastante significativo). Por outro lado, quando o modelo LAMBDA é utilizado o fluxo de poluentes para grandes distâncias é menor. O passo de tempo de um segundo contribui para diminuir a subprevisão. Em receptores distantes, com amostradores sobre as linhas de 5 e 10 quilômetros, a imprevisibilidade também aumenta nas simulações com o LAMBDA. Neste caso a imprevisibilidade também pode estar associada a desconsideração da variabilidade espacial do campo meteorológico. Na situação real do experimentos, a variabilidade espacial da direção e velocidade do vento pode ter desviado a nuvem de poluentes dos amostradores. Embora, o modelo LAMBDA desconsidere a topografia e a variabilidade espacial em comparação ao modelo CALPUFF, a abordagem Lagrangeana tende a desviar menos da linha de razão Co/Cp ideal.

Outra questão importante deve se ressaltar em relação ao modelo Lagrangeano. As simulações do modelo LAMBDA foram desenvolvidas com assimetria na componente vertical de velocidade, com uma PDF de Gram-Charlier truncada na terceira ordem. Essa assimetria foi eficiente na influência nos movimentos das partículas, como fora observado por [Ferrero e Anfossi, 1998b]. Além disso, os experimentos OLAD 252 e OLAD 258 foram realizados durante o amanhecer, deste modo é esperado uma assimetria na distribuição vertical de velocidade. Ao amanhecer, na evolução da camada limite planetária, existe sobreposição de fenômenos meteorológicos entre distintas características de estabilidade atmosférica. A CLP sempre altera sua condição entre atmosfera estável, neutra e convectiva. Portanto, mesmo numa atmosfera com forçantes mecânicos prevaletentes, é esperado a ocorrência de *updrafts* e *indrafts*.

No modelo LAMBDA o domínio horizontal de simulação foi estabelecido de

acordo com as distâncias dos amostradores e a altura da camada limite planetária. O volume da fonte em linha adotada foi de 0.1m x 8000.0m x 0.1m. O domínio de avaliação da concentração para o experimento OLAD 252 foi 11km x 20km x 250m e para o teste OLAD 258 foi 11km x 20km x 500m.

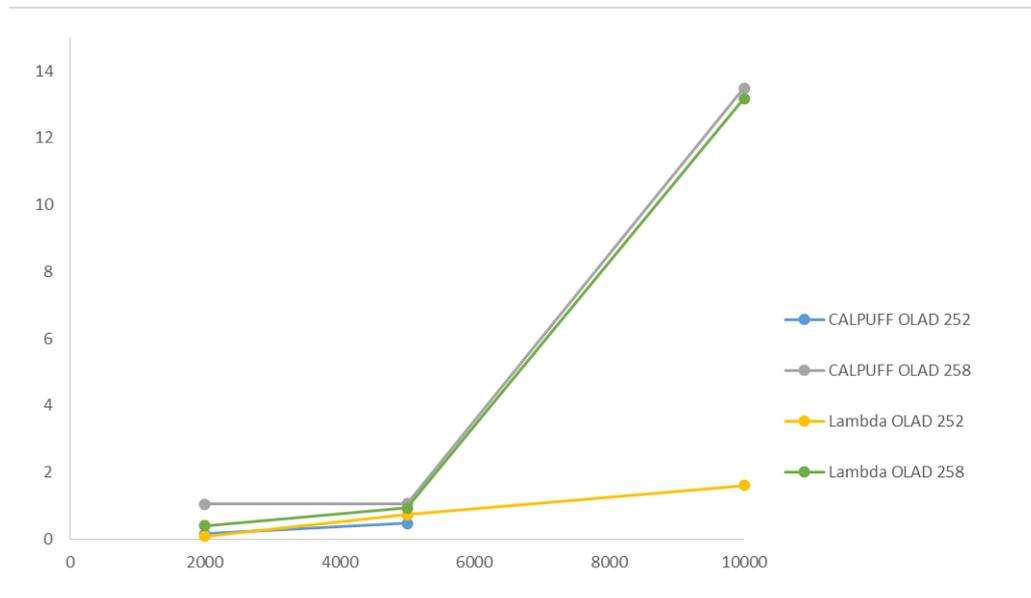


Figura 8.5 – Comportamento do coeficiente angular em função da distância, baseado numa regressão linear em função da razão C_o/C_p presente na figura 8.4.

As figuras 8.6 e 8.7 apresentam os resultados integrados de concentração atmosférica superficial para os experimentos OLAD 252 e OLAD 258, logo é a média entre todos os analisadores de ar na linha de amostragem para cada teste. A variabilidade de concentração foi analisada com diferentes esquemas da PDF para a componente vertical da velocidade e possibilitou, também, checar a influência do número de partículas emitidas. A assimetria na distribuição vertical de velocidade foi bem aplicada como apresentado na figura 8.6 e 8.7. Em relação ao modelo CALPUFF, a difusão numérica é observada na solução com passos de tempo maiores. Já o modelo estocástico, mostra uma menor perda de informação do fenômeno natural da dispersão, o qual supera os efeitos de topografia e da variabilidade do campo meteorológico local.

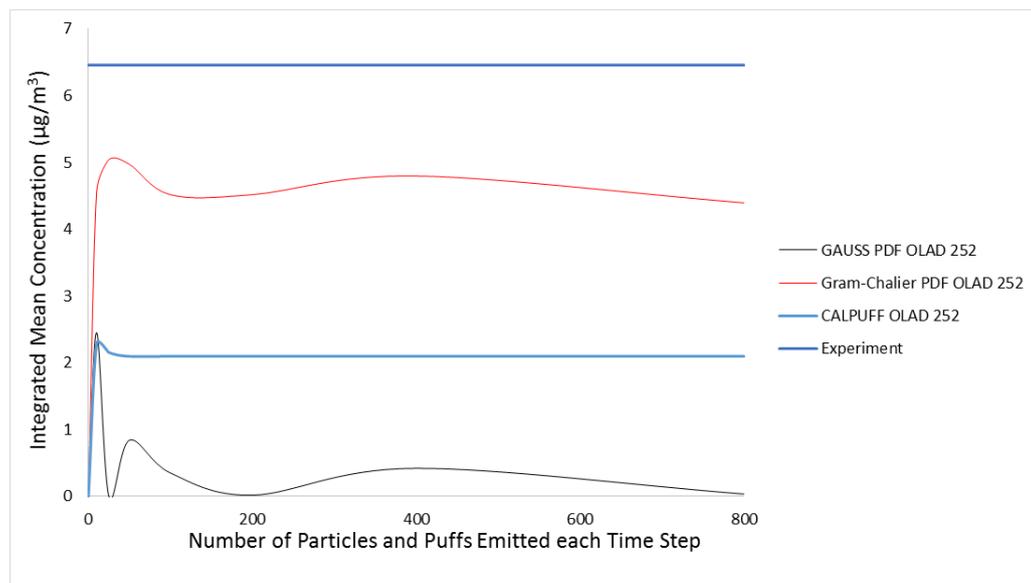


Figura 8.6 – Variabilidade da concentração integrada para o OLAD 252 com distintas funções densidade de probabilidade, número de partículas emitidas para as simulações do LAMBDA e número de *puffs* emitidos para as simulações do CALPUFF.

8.1 Limitações nas abordagens de modelagem numérica

Numa simulação de um fenômeno físico, a representação matemática em conjunto com a representação numérica possibilitam um grande número de incertezas. Parte do pressuposto de que representar um fenômeno com infinitos graus de liberdade, como a turbulência atmosférica, não é viável. Fenômenos naturais, como a dispersão atmosférica, são processos estocásticos. No entanto, as simulações são representações estatísticas, mesmo quando se faz a utilização de um modelo estocástico. Trata-se apenas de um retrato de um universo de múltiplas soluções, com diferentes distribuições de funções de densidade de probabilidade. Na avaliação infinitesimal de um passo de tempo, o processo estocástico é inatingível computacionalmente. Qualquer simulação estocástica será uma retrato parcial de um evento contínuo. O passo do tempo é uma grande limitação da modelagem atmosférica. Maior ainda quando modelos como o CALPUFF são utilizados com passo de tempo de uma hora. A representação estocástica dos movimentos dos poluentes é simulada por uma estatística horária, na qual a carência da representação física é no mínimo esperada. Uma outra parcela de limitação provém da representação de fontes de emissões atmosféricas. As geometrias presentes na representação das emissões não

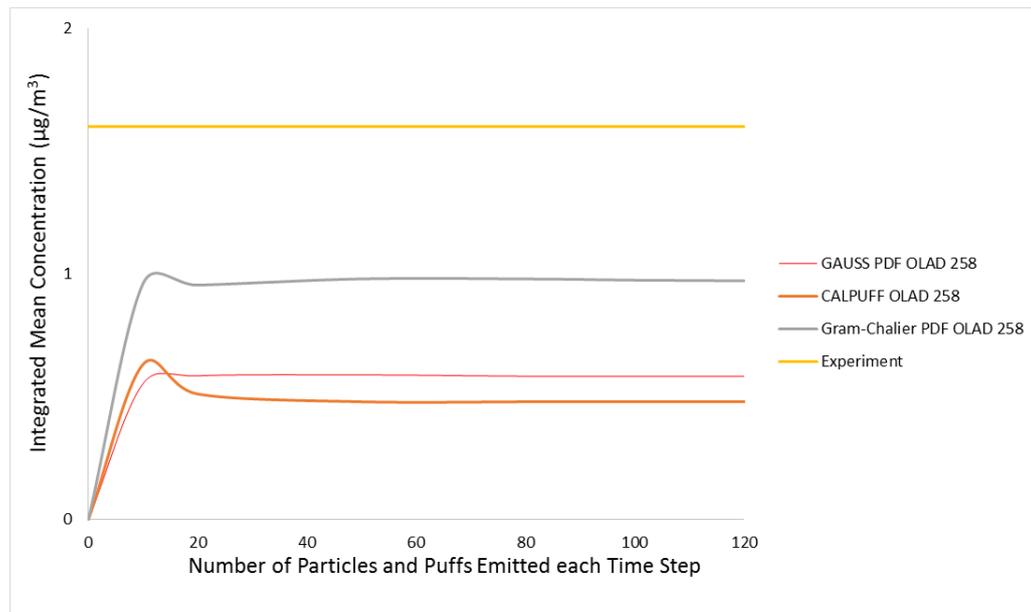


Figura 8.7 – Variabilidade da concentração integrada para o OLAD 258 com distintas funções densidade de probabilidade, número de partículas emitidas para as simulações do LAMBDA e número de *puffs* emitidos para as simulações do CALPUFF.

condizem com a realidade. Por esta razão, o conhecimento do gradiente de concentração quase que no limite infinitesimal do espaço, possibilitaria uma inferência realística do padrão dissipativo e cinético turbulento, com base numa função estrutura do movimento do fluido, conseqüentemente do movimento do poluente. Interações entre fluido e estrutura em pequenas escalas são desprezadas. Exceto o fenômeno do *building downwash* que é estabelecido em simulações do CALPUFF quando existe a presença de prédios nos arredores do local de simulação.

As limitações em relação a característica do experimento não podem ser desconsideradas. Uma questão a cerca disto, está relacionada as emissões atmosféricas do experimento. Durante todos os experimentos, as liberações de SF_6 perduraram por um período sempre inferior ao tempo de amostragem. A principal razão para isto é o fato de que os organizadores queriam avaliar também o o comportamento da nuvem de contaminantes (σ_x), ao longo da direção predominante do vento. Nas simulações com tempo de amostragem superior ao tempo de emissão, ambos os modelos tiveram dificuldade em representar uma emissão não contínua. Durante um evento de amostragem simulado, sempre existiu emissão de partículas ou *puffs* ao mesmo tempo em que existiu amostragem. No entanto,

deve-se ressaltar que a massa total de contaminantes liberada sempre foi respeitada. Na prática o que ocorreu, nestes casos, e que a nuvem de contaminantes sempre apresentou uma dispersão maior (não natural) da massa de poluentes, pois *puffs* ou partículas estavam ao mesmo tempo na posição dos sensores e no local de emissão. O modelo LAMBDA não possibilita simular uma emissão não contínua. O modelo CALPUFF tem algoritmo adaptado para simular emissões não contínuas. No entanto, não foi utilizada esta opção, pois a grande maioria das simulações foram de uma hora e o modelo de regulação CALPUFF tem passo de tempo mínimo de uma hora.

9 CONCLUSÃO

A influência da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana no sistema de modelagem CALPUFF foi avaliada. Para realizar isto uma nova parametrização para a escala de tempo de decorrelação foi proposta. Este método é baseado no espectro de velocidade Euleriana e de uma formulação para a evolução do tempo de escala de decorrelação Lagrangeana. Estes parâmetros foram usados como mecanismos forçantes numa camada limite planetária dominada pelo cisalhamento do vento, para descrever a dispersão turbulenta em função das escalas dominantes numa CLP mecânica. As simulações e resultados sugerem um aumento da inacurácia para longos transportes turbulentos de poluentes. A performance do modelo CALPUFF foi estabelecida baseada na comparação entre o fenômeno natural da dispersão atmosférica e a simulação. O experimento OLAD foi utilizado para avaliar a performance das novas parametrizações. Pela comparação das duas simulações com o modelo CALPUFF, as simulações do CALMET CALPUFF têm melhores resultados somente nos receptores localizados mais próximos à fonte em linha de emissão atmosférica. É possível que este comportamento esteja associado com a variabilidade espacial do escoamento de fluido, que foi presente nas simulações no modo de modelagem CALMET CALPUFF. A nova parametrização foi avaliada no modo SUPERFÍCIE e PERFIL, sem variabilidade espacial do campo meteorológico e micrometeorológico. De acordo com os resultados, a medida que a distância da fonte aumenta, a imprevisibilidade da concentração modelada aumenta, para ambos os modos de simulação do CALPUFF. No entanto, as simulações no modo SUPERFÍCIE e PERFIL, obtiveram melhores resultados no geral. Uma das razões, além da inclusão das novas parametrizações, é o modelo CALMET. Recentemente a agência ambiental americana alertou que o modelo CALMET pode produzir descontinuidades nos campos de vento, resultando numa degradação destes. Mesmo quando os ventos observados coincidem com os previstos pelo CALMET nos locais das observações [EPA, 2012]. Por fim, as equações (3.4) e (3.14) também podem ser utilizadas como novas parametrizações, como é o caso do sistema CALPUFF.

A relação R dependente da distância em função da concentração observada apresentam elevados coeficientes de correlação. Esta constatação sugere que uma correção de escala pode ser introduzida no modelo, a qual depende da razão entre concentração

prevista e concentração observada. Uma explicação física para essa correção não linear de escala em função da concentração vem do fato de que o modelo CALPUFF implementa uma fonte como liberação instantânea, no entanto qualquer processo real de emissão é contínuo. As diferenças aparecem pelo fato de que numa emissão contínua próxima à fonte, os gradientes são menos significativos (menores) em comparação com emissões instantâneas. Conseqüentemente nas liberações instantâneas o fluxo de poluentes para grandes distâncias é maior. Os menores gradientes das liberações contínuas resultam do fato de que existe dispersão de poluentes em todas as direções próximo à fonte, não somente na direção predominante do vento.

Estes fatos mostram a necessidade de corrigir o modelo. Além disso, o elevado coeficiente de correlação determinado com dados observados indica como corrigir o modelo de previsão por uma escala de concentração dependente da distância. Esta carência do modelo original é esperada, em virtude do modelo CALPUFF ser linear, enquanto que o fenômeno se manifesta de forma não linear.

Um segundo modelo foi testado na continuação do trabalho, o qual é normalmente utilizado para prever o impacto ambiental e validar parametrizações turbulentas. Trata-se do modelo estocástico Lagrangeano LAMBDA de dispersão atmosférica [Ferrero e Anfossi, 1998b]. Modelos de partículas, como é o LAMBDA, são ferramentas eficientes e fundamentais na investigação e estudo do fenômeno de difusão turbulenta na camada limite planetária. Neste estudo, os resultados do modelo LAMBDA, enfatizam a habilidade das novas derivações das escalas temporais de decorrelação (T_{L_i}), em representar o desconhecido comportamento estocástico, com as expressões presentes nas equações (3.13), (3.14) e (3.15).

Ainda, uma comparação entre o modelo CALPUFF e o modelo LAMBDA foi realizada. Em ambas as simulações foram avaliados os comportamentos do modelo de regulação CALPUFF e o modelo Lagrangeano em situações de emissões de fontes em linha. Tais tipos existem em grande variedade de atividades industriais e não industriais no meio ambiental. Vias de circulação de veículos pavimentadas e não pavimentadas são os exemplos mais comuns de fontes em linha de emissões. Por exemplo, no setor de exploração mineral, estes dois tipos de emissões atmosféricas contribuem com uma parcela considerável das emissões antropogênicas de material particulado no ambiente.

O experimento *Over-Land Alongwind Dispersion* (OLAD) foi bastante apropriado para avaliar estas ferramentas de previsão de impacto ambiental e conferir a acurácia de ambos os *softwares*. Dois diferentes testes do mesmo experimento foram analisados. Um deles foi o teste OLAD 258 que foi realizado no dia 15 de Setembro de 1997. Este ensaio foi conduzido em condições de vento sudeste forte (10 m/s), em uma camada limite planetária próxima da neutralidade. No dia 9 de setembro de 1997, um segundo ensaio foi conduzido, agora com uma CLP levemente estável. Ventos moderados do quadrante sudeste de 5m/s e uma altura da camada limite planetária de 250 m foram observados. Nas representação dos dois ensaios, ambos os modelos obtiveram um coeficiente de correlação elevado entre dados observados e previstos de concentração atmosférica superficial. No entanto a relação R de C_o/C_p , novamente foi empregada para avaliar a previsibilidade do CALPUFF e LAMBDA. Os resultados também mostraram a necessidade de corrigir o modelo Lagrangeano, exatamente como estabelecido anteriormente para o sistema CALPUFF. Ou seja, exige-se uma correção de escala dependente da concentração e da distância, principalmente quando as simulações são desenvolvidas para distâncias elevadas em relação a posição da fonte emissora. No presente estudo foi constatada uma perda de previsibilidade quando as distâncias, a partir do local de emissão, superam 2000 metros.

Parece satisfatória uma previsão de concentração neste limite de distância, mas na realidade impõe severas limitações para as ferramentas de previsão atualmente existentes. Uma questão importante quando se trata do modelo de regulação CALPUFF, é que este *software*, comumente, é utilizado para distâncias superiores a 50 quilômetros a partir de uma atividade emissora de poluentes. Em estudos de longos transportes de poluentes, a agência ambiental americana (EPA) ressalta que a imprevisibilidade é um fator de grande preocupação para o órgão ambiental. Em testes de 100 km e 600 km, a partir do local de emissão, foram observadas características semelhantes a este estudo, com aumento de imprevisibilidade a medida que se estende a distância. Ver figura 9.1. No caso da avaliação de 600 km, em torno de 90% dos testes subestimaram as concentrações observadas. Ao contrário do que foi observado para as simulações de 100 km, que apresentaram uma maior superestimativa em relação a concentração observada (EPA,2012). Além das carências das duas abordagens simuladas, neste estudo, em relação à distância da fonte, o modelo LAMBDA apresentou um ganho quando comparado ao desempenho

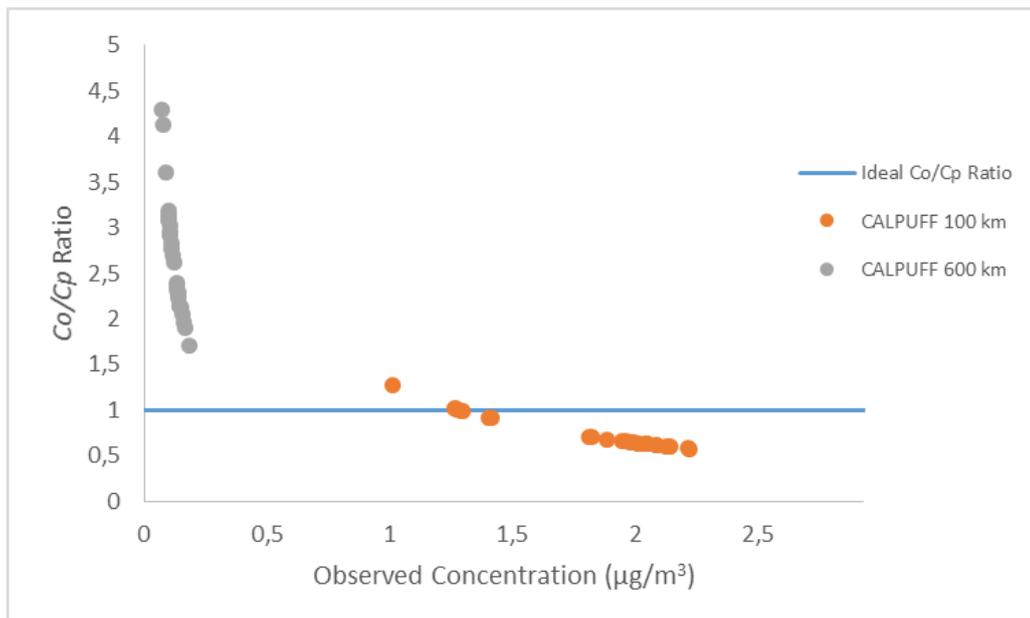


Figura 9.1 – Dados observados em comparação com as simulações do modelo CALPUFF para grandes distâncias de 100km e 600km a partir do ponto de emissão. Gráfico gerado a partir do estudo [EPA, 2012].

do modelo CALPUFF. Mesmo quando foi desconsiderada a homogeneidade do campo meteorológico. Os resultados da razão R desviaram menos da linha ideal entre concentração observada e concentração prevista. Ou seja, numa eventual correção da concentração em função da distância da fonte, a abordagem Lagrangeana seria corrigida em menor proporção, mas não se deve descartar a correção de ambas as abordagens de representação matemática da dispersão atmosférica.

Com relação as simulações somente do modelo LAMBDA, os resultados com maiores índices de correlação (melhor correlação com o fenômeno natural da dispersão de poluentes) foram diagnosticados com a utilização de uma distribuição de probabilidade assimétrica da velocidade do vento vertical. Os testes OLAD 252 e OLAD 258 foram desenvolvidos durante o amanhecer, deste modo deve-se esperar uma assimetria na distribuição vertical de velocidade. Na evolução da camada limite planetária durante o nascer do sol existe uma variedade, ou mesmo uma sobreposição de fenômenos de distintas classes de estabilidade entre estável, neutra e convectiva. Portanto, mesmo numa atmosfera com predominância de forçantes mecânicos (cisalhamento do vento) é esperada a ocorrência de *updrafts* e *indrafts*. Principalmente ao amanhecer, quando os raios

solares induzem os movimentos ascendentes e descendentes de parcelas de ar e também provocam a existência de fenômeno conhecido como fumigação (*fumigation*). Em relação ao modelo CALPUFF, uma maior difusão numérica é observada em razão do maior passo de tempo desta ferramenta. Modelos estocásticos Lagrangeanos apresentam menor perda de informação em relação ao fenômeno natural, e supera, no presente estudo, as carências relacionadas à topografia e a variabilidade espacial da micrometeorologia local.

Na continuidade deste trabalho, diferentes tipos de fontes de emissões atmosféricas podem ser testadas para avaliar o comportamento da razão Co/Cp , que pode permitir a confirmação deste comportamento. Outros experimentos, com diferentes estabilidades atmosféricas podem ser utilizados para testar e confirmar o comportamento, novamente da razão em função da distância da fonte. Tal confirmação é crucial quando se emprega as ferramentas atuais para simulações de transporte e dispersão para grandes distâncias.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Alves, I. P., Degrazia, G. A., Buske, D., Vilhena, M., Moraes, O. L. L., and Acevedo, O. C., 2012. “Derivation of an eddy diffusivity coefficient depending on source distance for a shear dominated planetary boundary layer”, **Physica A**, vol. 391, pp. 6577–6586.

Anfossi, D., Ferrero, E., Sacchetti, D., and T., C. S., 1997. **Bound-Layer Meteorology**, vol. 82, pp. 193.

Anfossi, D. and Physick, W., 2005. “Air Quality Modeling Advanced Topics in Lagrangian Particle Models”, **The EnviroComp Institute, Air and Waste Management Association**, (2).

Arbage, M., Degrazia, G., Roberti, D., Acevedo, O., Moraes, O., Ferraz, S., Welter, G., Timm, A., and Moreira, V., 2008. “Turbulent statistical characteristics associated to the north wind phenomenon in southern Brazil with application to turbulent diffusion”, **Physica A**, vol. 387, pp. 4376–4386.

Baerentsen, J. H. and Berkowicz, R., 1984. **Atmos. Environ.**, vol. 18, pp. 701.

Batchelor, G., 1949. **JAust. Sci. Res.**, vol. 2, pp. 437.

Batchvarova, E. and Gryning, S., 1990. “Applied model for the growth of the daytime mixed layer”, **Boundary-Layer Meteorology**, (56), pp. 261–274.

Biltoft, C. A., Turley, S. D., Watson, T. B., Crescenti, G. H., and Carter, R. G., 1999. “**Over-Land Atmospheric Dispersion (OLAD) Test Summary and Analysis, Customer Report**”. Customer Report, U.S. Army Dug-way Proving Ground, U.S. Army Dugway Proving Ground, USA.

Blackadar, A. K., 1997. “**Turbulence and Diffusion in the Atmosphere**”. Springer, Berlin, Germany.

Buske, D., Vilhena, M. T., Bodmann, B., and Tirabassi, T., 2012. “Analytical Model for Air Pollution in the Atmospheric Boundary Layer. Air Pollution - Monitoring, Modelling and Health”, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 1, pp. 39–58.

Caughey, S. J., 1981. “**Observed characteristics of the atmospheric boundary layer In: Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling**”. F. T. M. Nieuwstadt and Van Dop, Eds, D. Reidel Publishing Company, Boston, MA.

Chang, J. C., Franzese, P., Chayantrakom, K., and Hanna, S. R., 2003. “Evaluations of CALPUFF, HPAC and VLSTRACK with Two Mesoscale Field Datasets”, **Journal of Applied Meteorology**, vol. 42, pp. 453–466.

Costa, C. P., Tirabassi, T., Vilhena, M. T., and Moreira, D. M., 2012. “A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere”, **Journal of Engineering Mathematics**, vol. 74, pp. 159–173.

Degrazia, F. C., 2005. “**Evolução da Camada Limite Planetária para dispersão de poluentes pelo método da da GILTT**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós Graduação de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul.

Degrazia, F. C., Degrazia, G. A., and Vilhena, M. T., 2013. “Derivação de escalas de tempo lagrangeanas dependentes da distância da fonte na camada limite planetária neutra”, **Ciência e Natura**, vol. 35, pp. 139–141.

Degrazia, F. C., Velho, H. F. C., Cintra, R. R., Barbosa, J. P. S., and Moraes, M. R., 2007a. “Sistema de previsão da qualidade do ar para o vale do paraíba”, **Ciência e Natura**, vol. 29, pp. 293–296.

Degrazia, F. C., Vilhena, M. T., Degrazia, G. A., and Boadmann, B. E., 2015. “Comparisons between line source modeling with CALPUFF and Lagrangian particle model LAMBDA”, **Ciência e Natura**.

Degrazia, G., Anfossi, D., Carvalho, J., Mangia, C., Tirabassi, T., and Campos Velho, H., 2000. “Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions”, **Atmospheric Environment**, vol. 34, pp. 3575–3583.

Degrazia, G. A., Carvalho, J. C., Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Roberti, D. R., and Magalhães, S. G., 2007b. “Derivation of a Decorrelation Timescale Depending on Source Distance for Inhomogeneous Turbulence in a Convective Boundary Layer”, **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, (374), pp. 55–65.

Degrazia, G. A., Carvalho, J. C., Moreira, D. M., Vilhena, M. T., Roberti, D. R., and Magalhães, S. G., 2007c. “Derivation of a decorrelation timescale depending on source distance for inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer”, **Physica A**, (374), pp. 55–65.

Degrazia, G. A. and Goulart, A., 2004. “Turbulência e dispersão de contaminantes na camada limite planetária”, **Turbulência**, vol. 4, pp. 73–107.

Draxler, R. R., 1976. “Determination of atmospheric diffusion parameters”, **Atmospheric Environment**, vol. 10, pp. 99–105.

EPA, U. E. P. A., 2012. “**Documentation of the Evaluation of CALPUFF and Other Long Range Transport Models Using Tracer Field Experiment Data**”. ENVIRON International Corporation.

Erbrink, J., Cenedese, A., Cosemans, G., Lasserre-Bigorry, A., Weber, H., and Stubi, R., 1997. “Pre-processing of meteorological data: vertical profiles”, **International Journal of Environment and Pollution**, vol. 8(3-6), pp. 464–477.

Ferrero, E. and Anfossi, D., 1998a. **Int. J. Environ. Pollut.**, vol. 9, pp. 384.

Ferrero, E. and Anfossi, D., 1998b. “Comparison of PDFs, closures schemes and turbulence parameterisations in lagrangian stochastic models”, **International Journal of Environment and Pollution**, vol. 9, pp. 384–410.

Ferrero, E. and Anfossi, D., 1998c. “Sensitivity analysis of Lagrangian Stochastic models for CBL with different PDF’s and turbulence parameterisations”, **In: S.E. Gryning, N. Chaumerliac, (Eds.), Air Pollution Modelling and its Applications XII**, vol. 22, pp. 673–680.

Ferrero, E., Anfossi, D., Brusasca, G., and Tinarelli, G., 1995. “Lagrangian particle model LAMBDA: evaluation against tracer data”, **Int. J. Environment and Pollution**, (5), pp. 360–374.

Ferrero, E., Anfossi, D., Tinarelli, G., and S., T. C., 1997. “An intercomparison of two turbulence closure schemes and four parameterizations for stochastic dispersion models”, **Nuovo Cimento**, (20 C), pp. 315–329.

Garrat, J., 1992. “**The Atmospheric Boundary Layer, in: Cambridge Atmospheric and Space Science Series**”. University Press, Cambridge.

Hanna, S., 1982. “Applications in air pollution modelling. In: Nieuwstadt, F.T.M., van Dop, H. (Eds.)”, **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling**, (5), pp. 275–310.

Hanna, S. R., 1989. “Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods”, **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1385–1395.

Hanna, S. R., Briggs, G. A., Deardorff, J., Egan, B. A., Gifford, F. A., and Pasquill, F., 1977. “AMS workshop on stability classification schemes and sigma curves, summary of recommendations”, **BULL. American Meteorology. Society**, vol. 58, pp. 1305–1309.

Hernandez-Garces, A., Souto, J. A., Rodriguez, A., Saavedra, S., and Casares, J. J., 2015. “Validation of CALMET/CALPUFF models simulations around a large power plant stack”, **Física de la Tierra**, (27), pp. 35–55.

Hino, M., 1968. “Maximum ground level concentration and sampling time”, **Atmospheric Environ**, (6).

Hinze, J. O., 1975. “**Turbulence**”. McGraw-Hill.

Holtslag, A. A. M. and Nieuwstadt, F. T. M., 1986. “Scaling the atmospheric boundary layer”, **J. Applied Meteorology**, (22).

Holtslag, A. A. M. and Van Ulden, A. P., 1983. “A simple scheme for daytime estimates of the surface fluxes from routine weather data”, **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 22(4), pp. 517–529.

Kaimal, J. C., Wyngaard, J. C., Izumi, Y., and Cote, O., 1972. “Spectral characteristics of surface layer turbulence”, **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, vol. 98, pp. 563–589.

Kendall, M. and Stuart, A., 1977. “**The advanced theory of statistics**”. MacMillan, New York, USA.

Lamb, R. G., 1984. “Diffusion in the convective boundary layer”, **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling**, pages 159–229.

Luahr, A. K. and Britter, R. E., 1989. “A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer”, **Atmospheric Environment**, vol. 23, pp. 1911–1924.

Ludwig, F. L., Gasiorek, R. E., and Ruff, R. E., 1977. “Simplification of a Gaussian puff model for real-time minicomputer use”, **Atmospheric Environ**, (11), pp. 431–436.

Mello, K. B., 2010. “**Simulação da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária através da Solução da Equação de Langevin pelo Método de Decomposição**”, Tese de doutorado, Programa de Pós Graduação de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul.

Moreira, V. S., 2008. “**Modelagem lagrangeana aplicada à dispersão de contaminantes em diferentes condições de estabilidade atmosférica**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós Graduação em Física, Universidade Federal de Santa Maria, Rio Grande do Sul.

Nieuwstadt, F. T. M., 1984. “Some aspects of the turbulent stable boundary layer”, **Boundary Layer Meteorology**, vol. 30, pp. 31–55.

Olesen, H., Larsen, S., and Hojstrup, J., 1984. “Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer”, **Boundary Layer Meteorology**, vol. 29, pp. 285–312.

Panofsky, H. A. and Dutton, J. A., 1984. “**Atmospheric Turbulence**”. John Wiley & Sons, New York.

Petersen, W. B., 1986. “A demonstration of INPUFF with MATS data base”, **Atmospheric Environ**, (20), pp. 1341–1346.

Roberti, D. R., Anfossi, D., Campos Velho, H., and Degrazia, G., 2005. “Estimation of emission rate from pollutant sources”, **Proceedings of the 5th International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice**, (R03).

Rodean, H., 1996. **American Meteorological Society**.

Scire, J. S., Francoise, R. R., Mark, E. F., and Yamartino, R. J., 2000a. “**A Users Guide for the CALMET Meteorological Model (Version 5)**”. Earth Tech, Inc.

Scire, J. S., Strimaitis, D. G., and Yamartino, R. J., 2000b. “**A Users Guide for the CALPUFF Dispersion Model (Version 5)**”. Earth Tech, Inc.

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

Taylor, G., 1921. **Proc. Lond. Math. Soc.**, vol. 20, pp. 126.

Tennekes, H., 1982. “Similarity relation, scaling laws and spectral dynamics, in: F.T.M. Nieuwstadt, H. Van Dop (Eds.)”, **Turbulence and Air Pollution Modeling**.

Thomson, D. J., 1987. **J. Fluid Mech.**, vol. 180, pp. 529.

Timm, A. U., 2007. “**Estudo da difusão turbulenta empregando modelos estocásticos lagrangeanos**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós Graduação em Física, Universidade Federal de Santa Maria, Rio Grande do Sul.

van Egmond, N. D. and Kesseboom, H., 1983. “Mesoscale air pollution dispersion models - II. Lagrangian Puff model and comparison with Eulerian grid model”, **Atmospheric Environ**, (17), pp. 267–274.

Van Ulden, A. P. and Holtslag, A. A. M., 1985. “Estimation of atmospheric boundary layer parameters for diffusion applications”, **Journal of Climate and Applied Meteorology**, vol. 24, pp. 1196–1207.

Venkatram, A. and Wyngaard, 1988. “**Air Pollution Modeling**”. American Meteorological Society, Boston, USA.

Wang, M. C. and Uhlenbeck, G. E., 1945. “Theory of Brownian Motion”, **Reviews of Modern Physics**, (17).

Weil, J., 1990. “A diagnosis of the asymmetry in top-down and bottom-up diffusion using a Lagrangian stochastic model”, **Journal Atmospheric Science**, vol. 47, pp. 501–515.

Wilson, J. D. and Sawford, B. L., 1996. “Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere”, **Boundary layer Meteorology**, (78), pp. 191–210.

Zanneti, P., 1990. “**Air Pollution Modeling. Teories, Computational Methods and Available Software**”. Kluwer Academic Publisher, New York, USA.