

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Modelagem da Dispersão de Contaminantes em Condições Estáveis e de Vento Fraco

Viliam Cardoso da Silveira¹

Doutorando em meteorologia, UFSM, Santa Maria, RS

Gervásio Annes Degrazia²

Departamento de Meteorologia, UFSM, Santa Maria, RS

Daniela Buske³

Departamento de Matemática e Estatística, UFPel, Pelotas, RS

Silvana Maldaner⁴

Departamento de Física, UFSM, Cachoeira do Sul, RS

Resumo. O presente trabalho tem como objetivo apresentar uma solução analítica para a equação de advecção-difusão tridimensional em condições de vento fraco em uma camada limite estável dominada por cisalhamento. O modelo inclui a difusão longitudinal que não pode ser negligenciada sobre condições de vento fraco. A solução da equação de advecção-difusão é obtida aplicando a técnica da transformada integral. Para validar a presente metodologia, dados coletados durante o experimento clássico Prairie Grass foram empregados. Para verificar o desempenho do modelo, neste trabalho foram utilizados coeficientes de difusão com formulação integral e algébrica para parametrizar a turbulência. O perfil do vento é descrito por uma lei de potência e similaridade.

Palavras-chave. Vento Fraco, Prairie Grass, Dispersão De Poluentes, Técnica 3D-GILTT.

1 Introdução

A importância do estudo da dispersão de poluentes sobre condições estáveis e de vento fraco vem do fato de que tais situações ocorrem frequentemente na Camada Limite Planetária (CLP) e, portanto, necessitamos derivar novos modelos de dispersão que descrevam esse estado turbulento da CLP. Em condições de vento fraco, os poluentes não se dispersam para longe da fonte, devido a baixa magnitude do vento e com isso, as áreas mais próximas são as mais afetadas.

Muitos modelos foram desenvolvidos para descrever o processo de dispersão de contaminantes em condições de vento fraco. Em 1974, [1] aplicaram um modelo Gaussiano e dividiram cada período computacional em intervalos de tempo de 2 min, somando os resultados

¹viliamcardoso@gmail.com

²gervasiodegrazia@gmail.com

³danielabuske@gmail.com

⁴silvana.maldaner@gmail.com

para determinar a concentração total. Em 1992, [2] usaram um modelo de partícula lagrangiana com o objetivo de levar em conta o fenômeno de meandro do vento. Em 2000, [3] apresentaram expressões para a escala de comprimento lagrangiana, escala de tempo de decorrelação e coeficientes de difusão em todas as elevações e condições de estabilidade e aplicaram para um modelo de dispersão de partícula lagrangiana (LAMBDA) usando o banco de dados de experimento de Copenhagen. Em 2001, [4] simularam a concentração de poluentes ao nível do solo em condições de vento fraco, utilizando um modelo de dispersão lagrangiana. Em 2005, [5] obtiveram a solução da equação de advecção-difusão sob condições estacionárias e de vento fraco aplicando a técnica da transformada de Laplace e considerando a CLP como um sistema de várias camadas (modelo ADMM) [6]. Em 2007, [7] apresentaram um modelo Euleriano onde o problema foi resolvido analiticamente pelo método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*), considerando uma gaussiana na direção de dispersão lateral [8].

Na presente pesquisa, a modelagem da dispersão de contaminantes em condições de vento fraco é apresentada considerando o termo de difusão longitudinal que não pode ser negligenciado em tais situações [7]. A equação de advecção-difusão tridimensional estacionária é resolvida pela técnica 3D-GILTT (*Three-Dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique*) [9]. O modelo emprega duas abordagens para os coeficientes de difusão, uma integral e outra algébrica [10]. O desempenho desse modelo foi realizado considerando o banco de dados do experimento Prairie Grass realizado em condições estáveis e de vento fraco ($u < 2 \text{ m/s}$) [11–13].

2 Materiais e métodos

A advecção e difusão atmosférica podem ser modeladas aplicando a equação de conservação de massa. Utilizando as regras da decomposição de Reynolds e usando a hipótese de transporte por gradiente (teoria K), obtemos a equação de advecção-difusão parametrizada [14]

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right). \quad (1)$$

Os termos do lado esquerdo da equação (1) representam o transporte advectivo e os termos do lado direito representam a difusividade turbulenta.

As condições de contorno para a equação (1) são

$$K_x \frac{\partial \bar{c}(L_x, y, z)}{\partial x} = K_y \frac{\partial \bar{c}(x, 0, z)}{\partial y} = K_y \frac{\partial \bar{c}(x, L_y, z)}{\partial y} = K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, 0)}{\partial z} = K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, h)}{\partial z} = 0, \quad (2)$$

e a condição de fonte é dada por $\bar{u} \bar{c}(0, y, z) = Q \delta(y - y_o) \delta(z - H_s)$, sendo Q a taxa de emissão da fonte g/s , h a altura da CLP (m), H_s a altura da fonte (m), L_x e L_y os limites para longe da fonte (m) nas direções x e y , respectivamente, e δ é a função delta de Dirac.

Assumindo que as componentes do vento horizontal (\bar{v} e \bar{w}) são nulas e ainda que o coeficiente de difusão K_y tem dependência somente na direção z ($K'_y = 0$), a seguinte

equação é obtida

$$-\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + K_y \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) = 0. \quad (3)$$

Assim, a equação (3) é resolvida pela combinação das técnicas da transformada de Laplace e GILTT [7, 8, 15]. Essa técnica da transformada integral combina uma expansão em série com uma integração. Na expansão, é usada uma base trigonométrica determinada com a ajuda de um problema auxiliar de Sturm-Liouville. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo uso da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. O sistema resultante de equações diferenciais ordinárias é analiticamente resolvido usando a transformada de Laplace e diagonalização [15].

2.1 Parametrização da turbulência

O desempenho do modelo em simular as concentrações observadas foi feito utilizando duas abordagens para os coeficientes de difusão, uma integral e outra algébrica. Essa será a primeira vez que a abordagem integral será considerada no presente modelo. A formulação integral é baseada na teoria da difusão estatística de Taylor [10] e descreve a turbulência na CLP em condições estáveis. Além do mais, essa formulação leva em conta o efeito de memória da pluma de poluentes, modelado pela função de autocorrelação na teoria da difusão de Taylor. Esse efeito de memória desaparece para grandes tempos de viagem da pluma de poluentes e as partículas fluídas são somente influenciadas pelas propriedades locais da turbulência.

$$\frac{K_\alpha}{u_* h} = \frac{0,07\sqrt{c_i}(1-z/h)^{3/4}z/h}{(f_m)_i^{4/3}} \int_0^\infty \frac{\text{sen}[(18,24(1-z/h)^{3/4}X^*)(f_m)^{2/3} \frac{z}{h} n']}{(1+n'^{5/3})n'} dn'. \quad (4)$$

Um resultado aproximado para a abordagem integral é a abordagem algébrica que reproduz resultados praticamente similares [10]

$$K_\alpha = \frac{2\sqrt{\pi}0,64u_*ha_i^2(1-z/h)^{\alpha_1}(z/h)X^*[2\sqrt{\pi}0,64a_i^2(z/h)+8a_i(f_m)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X^*]}{[2\sqrt{\pi}0,64(z/h)+16a_i(f_m)_i(1-z/h)^{\alpha_1/2}X^*]^2}, \quad (5)$$

sendo $i = (u, v, w)$, u_* a velocidade de fricção, X^* a distância adimensional ($X^* = \frac{xu_*}{\bar{u}h}$), h a altura da camada limite estável, α_1 uma constante, $a_i = \frac{(2,7c_i)^{1/2}}{(f_m)_{n,i}^{1/3}}$, sendo $c_{v,w} = 0,4$ e $c_u = 0,3$ e $(f_m)_i$ a frequência do pico espectral [3]

$$(f_m)_i = (f_m)_{n,i} \left(1 + 3,7 \frac{z}{\Lambda} \right), \quad (6)$$

sendo, $(f_m)_{n,i}$ é a frequência do pico espectral na estratificação neutra [$(f_m)_{n,w} = 0,33$; $(f_m)_{n,v} = 0,16$; $(f_m)_{n,u} = 0,045$], z a altura acima do solo e Λ o comprimento de Monin-Obukhov local descrito como

$$\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{5/4}. \quad (7)$$

2.2 Perfis do vento

O vento é parametrizado por uma lei de potência e por uma lei de similaridade [16]. A lei de potência do vento é descrita por

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^{0,1}, \quad (8)$$

sendo \bar{u} e \bar{u}_1 as velocidades médias horizontais do vento nas alturas z e z_1 . A lei similaridade do vento pode ser escrita por

$$\bar{u} = \frac{u_*}{k} \left[\ln\left(\frac{z}{z_0}\right) - \psi_m\left(\frac{z}{L}\right) \right] \quad z \leq z_b, \quad \bar{u} = \bar{u}(z_b) \quad z > z_b, \quad (9)$$

sendo $z_b = \min[|L|; 0,1h]$, $k \cong 0,4$ é a constante de von-Kárman e z_0 é o comprimento de rugosidade. A função de estabilidade ψ_m é dada em termos da relação de Businger $\psi_m\left(\frac{z}{L}\right) = -4,7\frac{z}{L}$.

2.3 Dados experimentais

Para validar o modelo em condições estáveis e de vento fraco ($u < 2 \text{ m/s}$), dados reportados no experimento clássico Prairie Grass [17] foram utilizados. Essa informação de vento fraco nunca foi utilizada até o momento no presente modelo. A altura de liberação do traço dióxido sulfúrico foi de 0,5 m. A altura do receptor foi 1,5 m. Os amostradores foram colocados em arcos de 50, 100, 200, 400 e 800 m. A altura de referência do vento é de 2 m. A velocidade de fricção (u_*) foi calculada com base na seguinte expressão $u_* = \frac{0,4\bar{u}(z_r)}{\ln(z_r/z_0)}$. O comprimento de Monin-Obukhov (L) foi obtido seguindo a metodologia proposta por [18] $L = 1100u_*^2$. A altura da camada limite planetária estável (h) foi calculada utilizando a formulação proposta por [19] $h = 0,4(u_*L/f_c)^{1/2}$.

3 Resultados e discussão

Os resultados da simulação são mostrados nas Figuras 1 e 2 e Tabela 1. A Figura 1 mostra o diagrama de espalhamento das concentrações observadas e simuladas usando coeficientes de difusão integral e vento potência e similaridade, respectivamente. Bons resultados são obtidos com qualquer uma das duas parametrizações do perfil do vento.

A Figura 2 mostra o diagrama de espalhamento das concentrações observadas e simuladas usando coeficientes de difusão algébrico e vento potência e similaridade, respectivamente. Bons resultados são obtidos quando utilizamos tanto coeficientes de difusão integral quanto algébrico, mostrando o bom desempenho do presente modelo em simular as concentrações observadas.

Na Tabela 1 está listado o desempenho estatístico [20] do modelo, as concentrações simuladas estão de acordo com as concentrações observadas. O coeficiente de correlação (COR) e fator de 2 (FAT2) são próximos de um e o erro quadrático médio normalizado (NMSE), viés fracional (FB) e o desvio padrão fracional (FS) são próximos de zero, indicando bom desempenho do modelo. Resultados similares são obtidos quando lei de

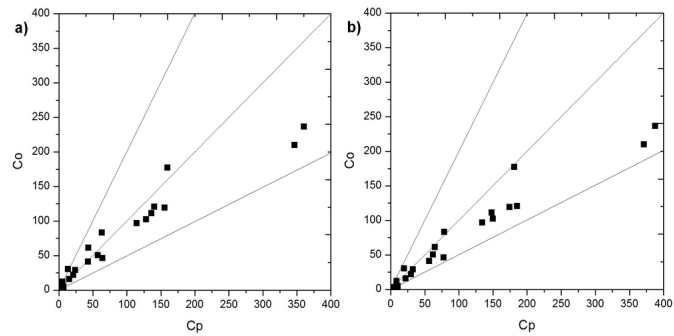


Figura 1: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas e simuladas usando coeficientes de difusão integral com a) lei potência do vento e b) lei similaridade do vento.

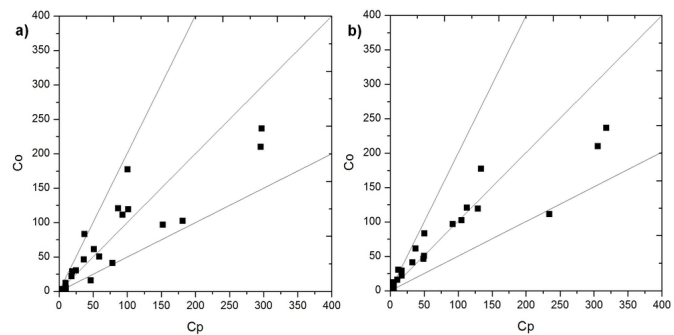


Figura 2: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas e simuladas usando coeficientes de difusão algébrico com a) lei potência do vento e b) lei similaridade do vento.

potência e similaridade do vento e coeficientes de difusão integral e algébrico são usados. Melhores resultados para COR e FAT2 são obtidos quando usamos a abordagem integral para os coeficientes de difusão.

4 Conclusões

A escolha da parametrização turbulenta nos modelos de poluição do ar tem uma importante contribuição no cálculo da concentração de contaminantes na CLP. Portanto, a parametrização descreve os processos de difusão e transporte observados na baixa atmosfera. O desempenho de cada modelo depende da forma com que os parâmetros turbulentos são relacionados com a evolução dos padrões turbulentos da CLP. Duas parametrizações turbulenta em um modelo Euleriano tridimensional foram testadas nesse trabalho.

O modelo é baseado na solução da equação de advecção-difusão. A solução é obtida aplicando a técnica da transformada integral. O modelo foi testado com coeficientes de difusão integral e algébrico. O perfil do vento foi representado por uma lei de potência e por uma lei de similaridade. Os resultados da simulação utilizando coeficientes de difusão integral e algébricos foram positivos quando comparados com o banco de dados observado

Tabela 1: Desempenho estatístico do presente modelo.

Integral	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
Vento potência	0,26	0,96	0,90	-0,19	-0,41
Vento similaridade	0,36	0,97	0,95	-0,33	-0,47
Algébrico	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
Vento potência	0,25	0,89	0,85	-0,08	-0,24
Vento similaridade	0,26	0,93	0,85	-0,09	-0,35

no experimento Prairie Grass. Bons resultados são também obtidos quando lei potência e similaridade do vento são usadas para parametrizar o perfil do vento. Os resultados estatístico mostram uma boa concordância entre os dados observados experimentalmente e simulados pelo presente modelo.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Ensino Superior (CAPES), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS) pelo suporte financeiro parcial para o desenvolvimento desta pesquisa.

Referências

- [1] J. F. Sagendorf and C. R. Dickson. Diffusion under low wind-speed, inversion conditions. *Technical Memorandum ERL ARL-52, U. S. National Oceanics and Atmospheric Administration*, 1974.
- [2] G. Brusasca, G. Tinarelli, and D. Anfossi. Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions. *Atmospheric Environment*, 26A:707–723, 1992.
- [3] G.A. Degrazia, D. Anfossi, J.C. Carvalho, C. Mangia, T. Tirabassi, and H.F. Campos Velho. Turbulence parameterisation for pbl dispersion models in all stability conditions. *Atmospheric Environment*, 34:3575–3583, 2000.
- [4] D. Oettl, R. A. Almbauer, and P. J. Sturm. A new method to estimate diffusion in stable, low-wind conditions. *Journal of Applied Meteorology*, 40:259–268, 2001.
- [5] D. M. Moreira, J. C. Carvalho, and T. Tirabassi. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. *Atmospheric Environment*, 39(20):3643–3650, 2005.
- [6] D. M. Moreira, M. T. Vilhena, D. Buske, and T. Tirabassi. The giltt solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary pbl. *Atmospheric Environment*, 40:3186–3194, 2006.

- [7] D. Buske, M. T. Vilhena, D. M. Moreira, and T. Tirabassi. Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, 41:5496–5501, 2007.
- [8] D. M. Moreira, M. T. Vilhena, D. Buske, and T. Tirabassi. The state-of-art of the gilt method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. *Atmospheric Research*, 92:1–17, 2009.
- [9] D. Buske, M. T. Vilhena, C. F. Segatto, and R. S. Quadros. A general analytical solution of the advection-diffusion equation for fickian closure. In *Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; P. Harris*, volume 1, chapter 4, pages 25–34. Birkhauser, Boston, 2011.
- [10] G. A. Degrazia, M. T. Vilhena, and O. L. L. Moraes. An algebraic expression for the eddy diffusivities in the stable boundary layer: a description of near-source diffusion. *Il Nuovo Cimento*, 19C:399–403, 1996.
- [11] M.L. Barad. Project prairie grass, a field program in diffusion. *Geophysical Research*, I (59):299, 1958.
- [12] M.L. Barad. Project prairie grass, a field program in diffusion. *Geophysical Research*, II (59):218, 1958.
- [13] D. A. Haugen. Project prairie grass, a field program in diffusion. *Geophysical Research Papers*, III:686, 1959.
- [14] A. K. Blackadar. *Turbulence and diffusion in the atmosphere: lectures in Environmental Sciences*. Springer-Verlag, 1997.
- [15] D. Buske, M. T. Vilhena, T. Tirabassi, and B. Bodmann. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. *Journal of Environmental Protection*, 4:1–10, 2012.
- [16] H. A. Panofsky and J. A. Dutton. *Atmospheric Turbulence*. John Wiley & Sons, New York, 1984.
- [17] H. E. Cramer, F. A. Record, and H. C. Vaughan. Diffusion measurements during project prairie grass. *Project Prairie Grass*. Acessado em 15-01-2015. Disponível em "http://www.jsirwin.com/PGrassVol1Chap5.pdf".
- [18] P. Zannetti. *Air Pollution Modelling*. Computational Mechanics Publications, Southampton, 1990.
- [19] S. S. Zilitinkevith. On the determination of the height of the ekman boundary layer. *Boundary Layer Meteorology*, 3:141–145, 1972.
- [20] S. R. Hanna. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmospheric Environment*, 23:1385–1395, 1989.