

1. INTRODUÇÃO

Os problemas ambientais causados pelo rápido desenvolvimento industrial e tecnológico têm conduzido à investigação da dispersão de poluentes na atmosfera. Esta investigação tornou-se uma atividade de extrema importância para a proteção da qualidade do ar. Do ponto de vista de saúde pública, a preocupação está relacionada aos níveis de concentração dos poluentes nas proximidades das fontes emissoras. O conhecimento detalhado do processo de dispersão próximo à fonte pode ser usado para avaliar o impacto ambiental causado pela emissão e agir no sentido de solucionar o problema da forma mais conveniente.

No estudo da dispersão de poluentes na atmosfera, duas fases devem ser consideradas: observação de campo e modelagem numérica. A primeira consiste em medidas dos valores de concentração e dos principais parâmetros meteorológicos que influenciam a dispersão. A segunda fase consiste no desenvolvimento de modelos para simular numericamente as medidas efetuadas, dando uma interpretação suficientemente correta do fenômeno físico observado. As observações de campo são muitas vezes dificultadas por problemas operacionais e pelos altos custos. Como consequência, a modelagem numérica torna-se uma ferramenta importante para descrever os processos de dispersão na atmosfera.

Os modelos de simulação computacional podem ser classificados em: i) modelos de pequeno, médio e longo alcance, em função do fenômeno atmosférico a ser estudado, uma vez que estes assumem características muito diferentes dependendo das escalas espacial e temporal simuladas e ii) modelos para fontes: pontual, área ou linha, dependendo do tipo de fonte a ser simulada. A principal subdivisão dos modelos de dispersão, do ponto de vista físico, é feita entre modelos Lagrangeanos e Eulerianos. A diferença básica entre as aproximações Lagrangeana e Euleriana é que o sistema de referência Lagrangeano segue o movimento atmosférico médio, enquanto o sistema de referência Euleriano encontra-se fixo em relação à Terra.

No modelo Euleriano descreve-se o andamento temporal da concentração de uma substância em relação a um sistema de referência fixo em relação à Terra. O processo dispersivo é então formulado por uma equação diferencial de conservação de massa. No modelo Lagrangeano, calcula-se a concentração de uma substância através da determinação da trajetória de massas de ar ou de partículas, que seguem passivamente o escoamento. Nestes modelos, as grandezas físicas que descrevem as trajetórias são especificadas em termos probabilísticos.

Um dos tipos de modelos Lagrangeanos mais utilizados é o modelo estocástico de partículas Lagrangeano. Neste tipo de modelo Lagrangeano, a dispersão de um poluente é simulada através do movimento de partículas fictícias (partículas marcadas), cujas trajetórias permitem o cálculo do campo de concentração. Essas partículas devem ser pequenas o bastante para poderem seguir o movimento dos menores turbilhões (da ordem da escala de Kolmogorov) e ao mesmo tempo grandes o suficiente para conterem um grande número de moléculas.

O comportamento de uma pluma de poluentes na atmosfera é um processo complexo, o qual é influenciado pelas características da emissão, efeitos do terreno, perfil do vento, estratificação e turbulência. Basicamente, plumas emitidas na atmosfera elevam-se sob a ação de seu momentum e empuxo iniciais (se a pluma possui temperatura maior do que a temperatura ambiente). Para termoeletricas e outras fontes industriais, a maior contribuição para a ascensão da pluma vem a partir do fluxo de calor. Dependendo da quantidade de calor liberada a partir da fonte, a pluma pode elevar-se centenas

de metros na atmosfera e este fenômeno pode contribuir substancialmente para a diluição dos constituintes da pluma antes de alcançarem o nível do solo.

A correta estimativa da ascensão da pluma (*plume rise*) é um dos requerimentos básicos para a determinação das concentrações ao nível da superfície de poluentes emitidos por fontes industriais. De fato, a máxima concentração ao nível da superfície é inversamente proporcional ao quadrado da altura efetiva da pluma (Anfossi et al., 1993), onde a altura efetiva (h_e) é o resultado da soma da altura da fonte (H_s) e da ascensão da pluma de poluentes (Δh) (FIGURA 1).

Em modelos Eulerianos e Gaussianos, a altura efetiva da pluma é geralmente computada por meio de expressões analíticas simples e inserida no modelo como um parâmetro de entrada. Ao contrário, nos modelos estocásticos Lagrangeanos, a inclusão do efeito de empuxo da pluma pode ser feita dinamicamente, isto é, cada partícula, em cada instante de tempo, pode ser impulsionada pela velocidade e direções locais do vento, estabilidade do ambiente e turbulência (tanto turbulência ambiente como a turbulência gerada pela pluma). Conseqüentemente, é possível obter um grau de definição e de exatidão não alcançáveis através de outras técnicas de simulação.

O objetivo deste trabalho é implementar no modelo LAMBDA (LAgrangian Model for the Buoyant emission Dispersion in Atmosphere) um método semi-empírico para a determinação da ascensão da pluma devido ao empuxo. LAMBDA é um modelo de partículas estocástico Lagrangeano tridimensional concebido para simular a dispersão de poluentes sobre terreno plano e pode usar os momentos superiores das flutuações de velocidade do vento. O método semi-empírico para ascensão da pluma é baseado na solução de um sistema de equações de conservação do volume da pluma, do fluxo de empuxo e do fluxo de momentum.

O modelo LAMBDA é utilizado para simular a dispersão de um poluente ativo emitido durante o experimento de Kincaid (Hanna e Paine, 1989). No experimento de Kincaid, o poluente foi emitido a partir de uma fonte elevada e coletado em diversas posições ao nível da superfície. Valores de máxima concentração são utilizados para uma comparação com as simulações do modelo. Uma análise estatística é realizada para avaliar as simulações.

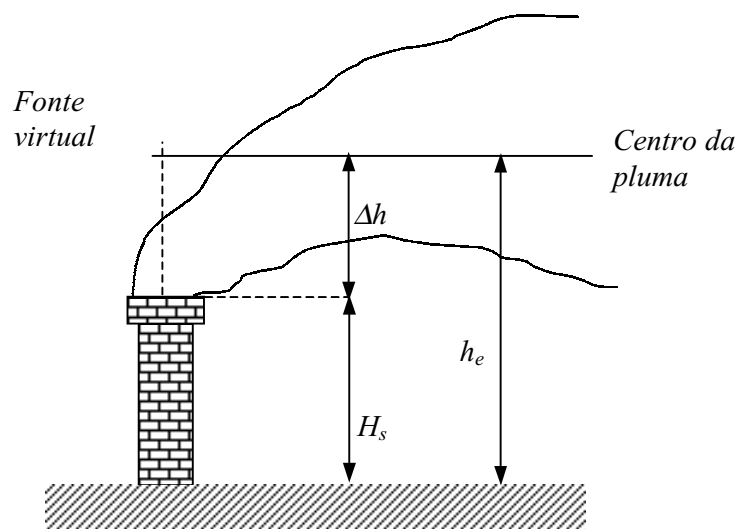


FIGURA 1: Representação esquemática do comportamento de ascensão da pluma.
Fonte: Anfossi et al., 2003.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Camada Limite Planetária e Generalidades sobre a Dispersão

Nesta seção define-se Camada Limite Planetária e apresentam-se as suas mais importantes características. Além disso, descreve-se como ocorre o processo de dispersão nesta região da atmosfera.

2.1.1 Características da Camada Limite Planetária

A atmosfera é um conjunto de gases, vapor d'água e partículas, as quais constituem o ar que envolve a superfície da Terra. Ela é usualmente dividida em camadas em função do perfil médio de temperatura. A camada mais baixa da atmosfera, a troposfera, é caracterizada por apresentar uma diminuição da temperatura com a altura. Esta camada pode atingir, em média, a profundidade de 11 km. A troposfera ainda pode ser dividida em duas partes, a parte mais baixa é diretamente afetada pelo contato direto com a superfície da Terra e é conhecida como Camada Limite Planetária (CLP), que vai desde a superfície terrestre até a altura na qual esta superfície exerce influência importante no escoamento do ar. A espessura desta camada sofre mudanças no tempo e no espaço, variando de aproximadamente 10 m até em torno de 2 a 3 km, e depende da taxa de aquecimento e resfriamento da superfície da Terra, do cisalhamento do vento, da rugosidade da superfície, dos movimentos verticais

de larga escala, da advecção horizontal de calor e umidade, entre outros fatores. A parte superior da troposfera, região que fica acima da CLP é chamada de Atmosfera Livre e o fluxo de ar nesta camada não é turbulento.

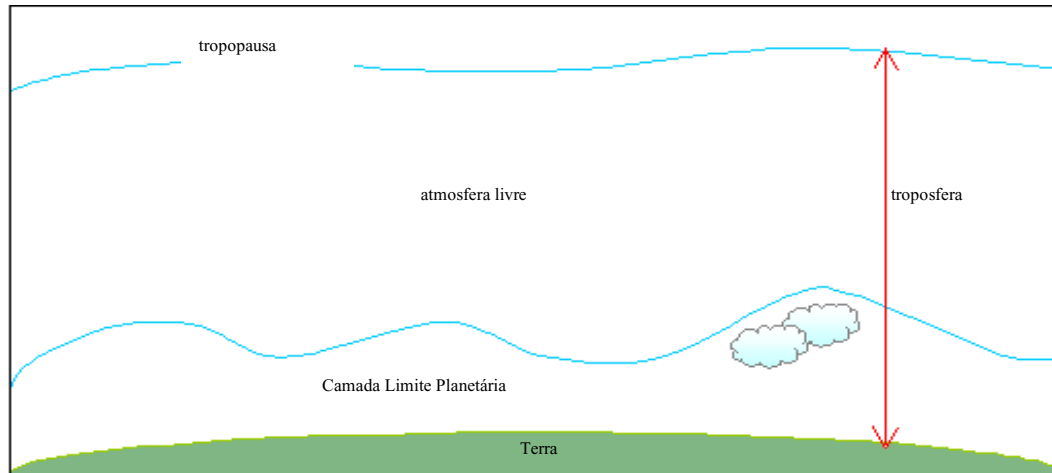


FIGURA 2: Divisão da troposfera em função da influência da superfície no escoamento do ar.
Fonte: Stull; 1988.

Segundo Garrat (1992), a CLP possui características que variam com a altura e, portanto, pode ser classificada, a partir da superfície, em: Camada Limite Laminar ou Subcamada Interfacial (a qual possui poucos milímetros de espessura, onde a difusão molecular é um importante processo de transferência de calor e massa entre a superfície e o ar), Camada Superficial (onde o fluxo de ar é principalmente dependente das características da superfície e é pouco afetado pelo movimento de rotação da Terra) e Camada de Ekman (onde o fluxo de ar depende muito pouco da natureza da superfície e é bastante influenciado pelo movimento de rotação da Terra).

A evolução da CLP é controlada pelos transportes turbulentos induzidos pela diferença de temperatura entre a atmosfera e a superfície terrestre (produção térmica) e pelos ventos em baixos níveis (produção mecânica). Este fenômeno acontece devido ao aquecimento e resfriamento do solo ao longo de 24 horas. O solo absorve cerca de 90% da radiação solar e, desta forma, a variação diurna da temperatura é bastante acentuada próximo ao solo e não

ocorre a grandes altitudes. As massas de ar quente que se elevam a partir da superfície são chamadas termas, turbilhões ou vórtices.

Quantidades tais como umidade, calor, momentum e poluentes são transportados na baixa atmosfera, na horizontal pelo vento médio, e na vertical pela turbulência.

Segundo Stull (1988), sobre a superfície terrestre, sob condições de alta pressão, a CLP tem uma estrutura temporal bem definida durante o dia. Normalmente, em um período de 24 horas, a CLP pode ser classificada quanto aos seus forçantes como: Camada Limite Convectiva (ou Camada de Mistura), Camada Residual e Camada Limite Estável. Se nuvens estão presentes na Camada de Mistura, a mesma é subdividida em Camada de Nuvens e Subcamada de Nuvens.

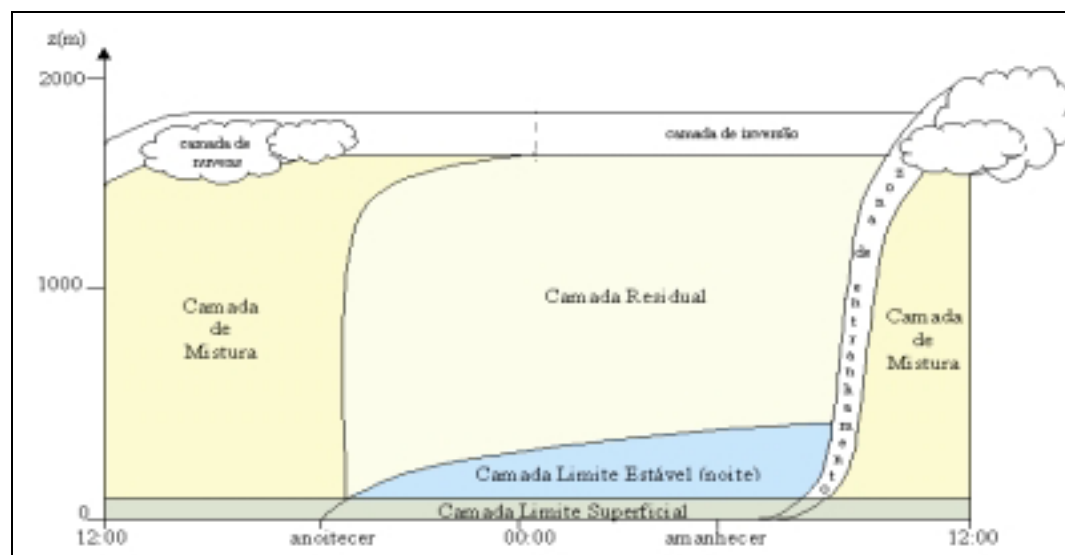


FIGURA 3: Evolução temporal da Camada Limite Planetária.
Fonte: Stull; 1988.

Camada Limite Convectiva

Ao amanhecer, o fluxo vertical de calor que ocorre no sistema Terra-atmosfera é positivo. Isto ocorre porque a radiação advinda do sol acaba por atingir a superfície da Terra, aquecendo-a, antes que o ar tenha sido aquecido.

Assim, a Terra, mais quente que a atmosfera, cede calor sensível por condução para o ar em contato com ela, gerando um fluxo vertical de calor sensível positivo. O ar aquecido torna-se mais leve que o ar logo acima e, por isso, tende a subir; enquanto o ar mais frio tende a descer e também se aquecer devido ao contato com a superfície. Este movimento convectivo ocorre sucessivamente dando origem a Camada Limite Convectiva. Sendo assim, a turbulência existente nesta camada é, em maior parte, produzida por efeito térmico, podendo também ser gerada por células convectivas e pelo cisalhamento do vento.

A CLC atinge uma altura típica de 1000 a 2000 metros no meio da tarde; acima deste limite tem-se a camada de inversão que atua como uma tampa, suprimindo os movimentos verticais e restringindo o domínio da turbulência.

Durante o decorrer do dia, as termas vão alcançando alturas cada vez maiores. A existência de nuvens, por sua vez, reduz a insolação ao nível do solo, reduzindo desta forma também a intensidade das termas. É justamente nestes dias que a CLC pode exibir um crescimento menor que em outros e torna-se menos turbulenta ou até estratificada, se as nuvens forem suficientemente espessas. Já em dias de céu claro sobre terra firme, o fluxo turbulento de calor superficial aumenta fortemente após o sol nascer, atinge seu máximo próximo ao meio dia e então começa a decair. Pode-se, desta forma, definir a CLC como aquela região da atmosfera que se estende do solo ($z = 0$) até a base de uma inversão elevada ($z = z_i$), e que é caracterizada por uma forte mistura vertical gerada pelo fluxo vertical de calor positivo.

Sobre terra firme a CLC pode ser considerada como uma estrutura de três camadas, diferenciadas em função dos parâmetros predominantes, considerados relevantes para a descrição da turbulência (velocidade de fricção superficial $(u_*)_0$; o fluxo vertical de calor $g(\overline{w'\theta_v'})_0/\overline{\theta_v}$ onde g é a aceleração da gravidade, $\overline{\theta_v}$ é a temperatura potencial virtual média; o parâmetro de Coriolis f_c e a altura da Camada Limite Convectiva z_i , que é usualmente tomada como a altura da base da inversão mais baixa. A primeira, chamada de Camada Limite Superficial, onde predomina a turbulência mecânica, está restrita a

alturas menores do que $z < |L|$, onde z é a altura acima do solo e L é o comprimento de Monin-Obukhov, definido como:

$$L = - \frac{(u_*)^3}{\kappa \frac{g}{\theta_v} (\overline{w'\theta_v'})_0},$$

onde $(\overline{w'\theta_v'})_0$ é o fluxo de calor turbulento na superfície e $\kappa=0,4$ é a constante de Von Karman. Para uma CLC bem desenvolvida, $|L|$ apresenta valores típicos entre 10 m e 100 m de modo que em geral $z_i/|L| \geq 10$ (Panofsky e Dutton, 1984). A segunda, chamada de Camada de mistura, compreende a região entre $|L| < z < z_i$, onde z_i é a altura da camada limite convectiva. Devido à forte mistura vertical, a turbulência nesta região pode ser considerada quase homogênea.

As dimensões dos grandes turbilhões convectivos são expressas em função de z_i e as velocidades turbulentas são proporcionais a escala de velocidade convectiva w_* , que é expressa por:

$$w_* = \left(\frac{g}{\theta_v} (\overline{w'\theta_v'})_0 z_i \right)^{\frac{1}{3}}$$

Valores típicos de z_i e w_* são, respectivamente, 1000-2000 m e 2 m/s (Weil e Brower, 1984).

A escala de tempo convectiva, z_i/w_* , em muitos casos é da ordem de 10 a 20 minutos. Este é um típico período de tempo para o ar circular entre a superfície e o topo da camada de mistura. Então, mudanças no fluxo de calor superficial e outros forçantes superficiais podem se comunicar com o resto da Camada de Mistura em um curto espaço de tempo (aproximadamente 15 minutos).

Em regiões próximas ao topo da CLC, localiza-se a terceira camada, chamada Camada Interfacial, ou Zona de Entranhamento, que é caracterizada por apresentar um fluxo de calor negativo. Na camada interfacial, todas as variáveis aproximam-se gradualmente dos valores observados na Atmosfera Livre (acima de $1,2z_i$). A Zona de Entranhamento é a região de ar

estaticamente estável no topo da Camada Limite Convectiva, onde existe entranhamento de ar da Atmosfera Livre para dentro da Camada de Mistura.

Camada Residual (CR)

Pouco antes do pôr-do-sol, a quantidade de radiação que atinge a superfície terrestre já não é mais suficiente para manter aquele processo convectivo intenso que gera turbulência. Então, ocorre um decaimento desta turbulência convectiva, isto é, ocorre um decaimento dos grandes turbilhões que formam a CLC, resultando numa Camada Residual, que é uma camada na qual a turbulência existente é um resíduo daquela gerada convectivamente, durante o dia. As variáveis de estado e de concentração iniciais desta camada são as mesmas da CLC previamente existente. Na ausência de advecção, traçadores passivos dispersados durante o dia dentro da camada de mistura, permanecerão durante a noite na CR.

A Camada Residual é neutramente estratificada, o que faz com que a turbulência existente nesta camada seja aproximadamente igual em todas as direções. Esta camada não fica em contato com o solo, mas tem sua base modificada pelo avanço da Camada Limite Estável, que surge durante noite. O restante da CR não é afetado pelo transporte das propriedades da superfície, o que faz com que esta camada não se adapte completamente às definições de Camada Limite Planetária, as quais afirmam que a atmosfera é considerada CLP até a altura na qual há influência da superfície no escoamento do ar. Portanto, deve-se considerar a Camada Residual como uma exceção às regras nos estudos da CLP.

Camada Limite Estável

Durante a noite, surge a Camada Limite Estável, a qual é fortemente influenciada pela taxa de resfriamento radiativo e pela taxa de advecção da turbulência mecânica.

Mesmo antes do sol se pôr, o fluxo vertical de calor sensível torna-se negativo. Com isso, a turbulência começa a decair e passa a ser dominada por pequenos turbilhões, resultando em uma estrutura turbulenta estavelmente

estratificada. O fluxo de calor sensível negativo indica que a atmosfera é quem está cedendo calor para a Terra, o que demonstra que a superfície terrestre está mais fria do que o ar em contato com ela. Este resfriamento da superfície terrestre ocorre porque a quantidade de radiação proveniente do Sol que atinge a superfície é inferior a quantidade de radiação que ela está emitindo. O ar em contato com a superfície passa então a ceder calor por condução para ela, esfria-se e, conseqüentemente, estabiliza-se.

De uma maneira bastante simplificada, pode-se caracterizar uma Camada Limite Estável como pouco ou muito estável, dependendo do comportamento do vento e do resfriamento radiativo. A existência de uma CLE muito estável é favorecida em noites de céu claro (quando o resfriamento radiativo é bastante intenso), em localidades baixas (para onde o ar frio se desloca) e localidades protegidas por obstáculos (o que favorece a diminuição do vento próximo à superfície). Ao contrário, a existência de uma CLE pouco estável ocorre em noites de céu nublado e em localidades altas e desprotegidas de obstáculos.

2.1.2 Generalidades da Dispersão na CLP

No processo de dispersão atmosférica, os poluentes gasosos e particulados emitidos na CLP são dispersos pelo vento médio (responsável pelo transporte) e pela turbulência (responsável pela difusão). Outros fatores importantes para a dispersão são: a presença de obstáculos orográficos ou de edifícios, a altura de emissão, a geometria da fonte, a velocidade de emissão e o tipo de poluente. Nas regiões urbanas, os maiores prejuízos para a atmosfera são ocasionados pelo tráfego veicular, o qual produz substâncias que reagem quimicamente por efeito da radiação solar.

Quando a camada de mistura está formada, o processo de dispersão na CLP ocorre principalmente devido às circulações convectivas (termas) que formam regiões de fluxos de ar ascendente (áreas de *updrafts*) e regiões de fluxos de ar descendente (áreas de *downdrafts*). Enquanto as áreas de *updrafts* apresentam menor extensão espacial (~40%) e fluxo de ar mais intenso, as áreas de *downdrafts* apresentam maior extensão espacial (~60%) e fluxo de ar menos intenso. Pela lei de conservação de massa, o ar quente subindo tem

uma velocidade maior do que o ar frio que desce. Modelos numéricos mostram que esta estrutura assimétrica da CLC é responsável por padrões de dispersão vertical que são distintos dos tradicionais padrões Gaussianos. Esta assimetria na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés na CLC. Devido a forte mistura presente na CLC, o resultado final consiste em uma distribuição uniforme dos poluentes, independentes da altura de emissão.

Os poluentes emitidos em uma Camada Residual tendem a se dispersar em razões iguais nas direções lateral e vertical, apresentando uma forma cônica, como mostra a FIGURA 4.

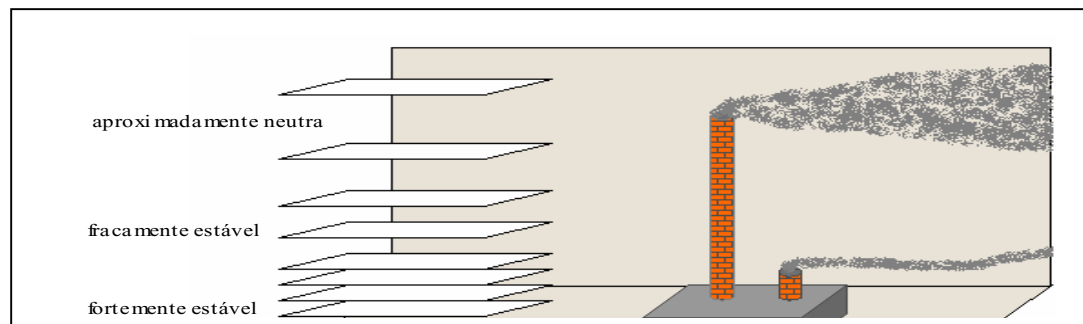


FIGURA 4: Diferença entre o comportamento de uma pluma dispersada na Camada Limite Estável e outra na Camada Residual.
Fonte: Stull, 1988.

Em virtude da baixa intensidade da turbulência, no caso da existência de uma camada muito estável junto à superfície, o poluente emitido dentro da CR raramente vai ser disperso em direção ao solo. Esta pluma pode ser advecada a centenas de quilômetros a partir da fonte de emissão. Segundo Stull (1988), os poluentes emitidos dentro da CR podem se dispersar até sua base e colidir com o topo da Camada Limite Estável. A forte estabilidade estática e a diminuição freqüente na turbulência reduzem a mistura para baixo dentro da

CLE. O topo da pluma de poluentes pode, algumas vezes, continuar a ascender dentro do ar neutro. Isto é denominado “*lofting*”.

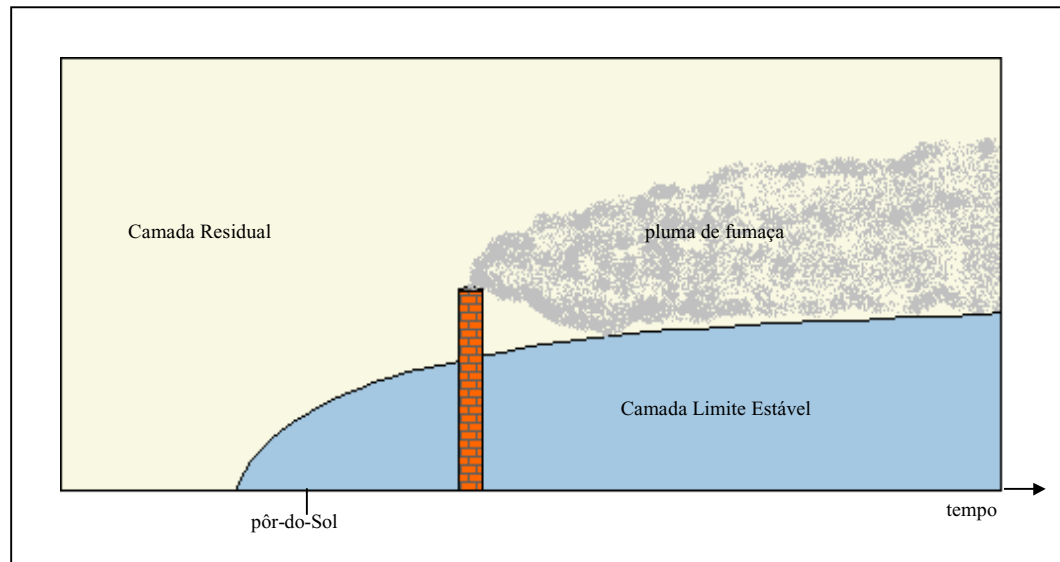


FIGURA 5: Lofting de uma pluma dispersada na Camada Residual.
Fonte: Stull, 1988.

Stull (1988) também comenta que poluentes não passivos podem reagir com outros elementos durante a noite para criar compostos que não são emitidos originalmente a partir da superfície. Alguns gases químicos podem reagir para formar aerossóis ou partículas dentro da CR, que podem, posteriormente, precipitar.

2.2 Modelos de Partículas Lagrangeano

A investigação do processo de dispersão atmosférica utilizando modelos de partículas Lagrangeanos é uma das ferramentas computacionais mais recentes e poderosas utilizadas na discretização numérica de um sistema físico. Esta técnica tem sido empregada com sucesso no estudo e na compreensão de uma grande variedade de estruturas complexas existentes na natureza. O seu uso é particularmente útil na obtenção de representações realistas da turbulência em fluídos. A modelagem por simulação de partículas

reproduz de uma maneira direta o fenômeno de transporte turbulento e evita, desta maneira, as incertezas numéricas presentes em modelos Eulerianos (Zannetti, 1990). As partículas, de fato, apresentam uma natureza Lagrangeana, uma vez que elas se movem seguindo o fluxo principal. Por esta razão, elas são freqüentemente chamadas de partículas Lagrangeanas.

Os modelos de partículas usam um certo número de partículas computacionais (partículas fictícias) para simular a dinâmica de um parâmetro físico selecionado.. As partículas seguem o movimento turbulento, descrevendo trajetórias aleatórias. Para descrever tal comportamento, as velocidades das partículas estão sujeitas a uma forçante aleatória.

O movimento das partículas pode ser produzido por pseudovelocidades semi-aleatórias geradas usando o Método de Monte Carlo. No Método de Monte Carlo a evolução do movimento de uma partícula difundindo-se na atmosfera forma um processo de Markov. Este método é baseado na equação de Langevin, a qual é derivada a partir da hipótese que a velocidade da partícula, em um determinado intervalo de tempo, é dada pela soma de um termo determinístico e um termo estocástico. Em aplicações que envolvem a descrição da dispersão de poluentes no ar, cada partícula move-se, em cada passo de tempo, por pseudovelocidades que levam em conta às três componentes básicas da dispersão: o transporte devido à velocidade média do fluido, as flutuações turbulentas aleatórias das componentes do vento e a difusão molecular.

Como descrito antes, os modelos de partículas Lagrangeanos são baseados na Equação de Langevin. A velocidade e a posição de cada partícula, a cada passo de tempo, é obtida integrando-se numericamente as seguintes equações:

$$\frac{du_i}{dt} = a + b\xi(t) \quad (1a)$$

e

$$\frac{dx}{dt} = U + u \quad (1b)$$

onde $i = u, v, w$, u é a velocidade Lagrangeana, x representa o vetor deslocamento, U é o vetor velocidade média do vento, o primeiro termo do lado direito da equação é um termo determinístico e o segundo é um termo estocástico. O coeficiente determinístico a contém duas informações: a informação de perda de memória (*fading memory*) da velocidade em um tempo anterior e a informação da correção *drift*, a qual satisfaz a condição *well-mixed* (se as partículas de um gás estão uniformemente distribuídas em uma camada, devem permanecer desta forma a medida que o tempo passa). O coeficiente estocástico b representa a difusão turbulenta. O produto do coeficiente b e da função aleatória $\xi(t)$ representa as acelerações aleatórias devido às flutuações de pressão com tempos de correlação curtos. $\xi(t)$ é um número aleatório proveniente de uma distribuição de probabilidade Gaussiana. No coeficiente a , a perda de memória é uma função da escala de tempo Lagrangeana para a autocorrelação de velocidade e a correção drift é uma função do desvio padrão de velocidade.

Integrando-se numericamente a equação (1a), calculam-se os valores de velocidade turbulenta, os quais serão introduzidos na equação (1b). Esta última, por sua vez, é integrada para fornecer as posições das partículas devido aos efeitos combinados do vento médio e da turbulência. Estas equações determinam as sucessivas posições das partículas no domínio de cálculo utilizando os valores de velocidade média do vento e os valores da turbulência (através das variâncias das componentes de velocidade do vento), diretamente de medidas ou simulações feitas por um outro modelo externo ao modelo de partículas. Conhecendo-se a posição e a massa de cada partícula, pode-se calcular a concentração em qualquer ponto do domínio de simulação através da contagem das partículas.

Embora os modelos de partículas Lagrangeanos tenham uma base matemática complexa, sua implementação é geralmente simples e intuitiva, permitindo levar em conta situações complexas tais como a presença de diferentes topografias ou não-homogeneidade do terreno, baixas velocidades do vento e variações espaciais e temporais dos campos meteorológicos. Não existem limitações nem sobre as formas nem sobre as dimensões das fontes

poluentes que podem ser simuladas pelos modelos estocásticos Lagrangeanos.

2.3 *Plume Rise* em Modelos Estocásticos Lagrangeanos

Muitas formulações foram propostas para incorporar o empuxo da pluma de poluentes em Modelos de Partículas Lagrangeanos. A maioria delas provou dar resultados confiáveis quando comparadas a dados de laboratório e de campo. Algumas destas formulações são apresentadas abaixo e incluem métodos empíricos e semi-empíricos.

Nos Modelos Estocásticos Lagrangeanos, a posição das partículas na vertical é calculada, em cada passo de tempo, de acordo com a equação abaixo:

$$z(t + \Delta t) = z(t) + (W + w)\Delta t \quad (2)$$

onde W representa a velocidade vertical média (geralmente igual a zero em terreno plano) e w é a velocidade devida à turbulência ambiente, a qual é obtida pela equação de Langevin. A idéia é, portanto, adicionar a velocidade vertical devida ao empuxo da pluma, w_b , à equação (2) para obter:

$$z(t + \Delta t) = z(t) + (W + w + w_b)\Delta t \quad (3)$$

Assim, a dispersão da pluma na vertical ocorre como uma consequência da turbulência ambiente, w , e da turbulência induzida pela ascensão da pluma devido ao empuxo, w_b .

2.3.1 Métodos Empíricos

Os Métodos Empíricos baseiam-se em fórmulas funcionais e parâmetros numéricos obtidos de dados experimentais. Nesta seção realiza-se uma breve

descrição dos métodos propostos por Zannetti e Al-Madani (1984), Cogan (1985), Shimanuski e Nomura (1991) e Anfossi et al. (1993).

2.3.1.1 O Método de Zannetti e Al-Madani (1984)

A primeira tentativa de incluir a ascensão da pluma em Modelos Estocásticos Lagrangeanos foi feita por Zannetti e Al-Madani (1984), contabilizando a variação vertical do vento e da estabilidade. Os autores obtiveram esta velocidade vertical extra, diferenciando a equação para o cálculo do *plume rise* em relação ao tempo:

$$\Delta h(t) = \left(1,58 - 0,414 \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) F_b^{1/3} U_a^{-1/3} t^{2/3} \quad (4)$$

onde $F_b = g v_{so} r^2 (T_{so} - T_{ao}) / T_{so}$, F_b é o fluxo de empuxo, $\partial \theta / \partial z$ é o gradiente vertical de temperatura potencial, U_a é a velocidade horizontal do vento que pode variar com a altura, g é a aceleração da gravidade, r é o raio da fonte, v_{so} é a velocidade de saída da pluma, T_{so} é a temperatura de saída da pluma e T_{ao} é a temperatura ambiente na altura da fonte de emissão. Ambos, $\partial \theta / \partial z$ e U_a são obtidos para várias alturas.

Da mesma forma, a contribuição do *plume rise* é determinada para todas as partículas contanto que elas estejam na mesma altura e tenham a mesma idade. A pluma propaga-se na vertical como consequência apenas da turbulência gerada pelo ambiente. Esta última aparece na equação estocástica para a velocidade vertical. Este método pode simular corretamente a altura média da pluma (contanto que seja usada a fórmula analítica correta), mas a propagação, particularmente em condições convectivas é subestimada. Os autores não indicaram como computar o tempo em que a ascensão da pluma para de contribuir para o movimento vertical das partículas.

2.3.1.2 O Método de Cogan (1985)

Cogan (1985) foi o primeiro a tentar modelar o processo de entranhamento, muito embora o tenha feito sobre uma base empírica. O procedimento desenvolvido por ele é o seguinte: a pluma é dividida em camadas de espessura constante e cada camada é separada em uma região interior e uma região exterior. Na região interior a temperatura de cada partícula é computada em função de sua distância ao centro de massa.

2.3.1.3 O Método de Shimanuski e Nomura (1991)

Shimanuski e Nomura (1991) tentaram simular numericamente as imagens instantâneas de uma pluma de chaminé sob condições convectivas. Sua técnica é baseada em uma única trajetória de partículas, cujas flutuações de velocidade estão espacialmente correlacionadas. A maneira pela qual o campo de correlação espacial varia é geralmente baseada na subdivisão da pluma em células tridimensionais, cujas dimensões estão relacionadas com a escala de turbulência local. A função espacial de auto-correlação é obtida de maneira empírica e todas as trajetórias dentro da célula assumem o mesmo valor para a função espacial de auto-correlação. O efeito do empuxo é descrito aproximadamente atribuindo uma velocidade vertical inicial a cada partícula. A estabilidade do ar não afeta diretamente o movimento das partículas, mas o cálculo da escala de turbulência é levado em consideração na definição das dimensões das células. Os autores não forneceram a comparação com plumas reais, mas demonstraram que suas imagens são bastante realistas.

2.3.1.4 O Método de Anfossi et al. (1993)

Anfossi et al. (1993), computaram w_b por meio de equações empíricas para a ascensão da pluma em fase de transição. Os autores assumiram que a linha central da pluma cresce de acordo com a fórmula para calcular o *plume rise* que descreve tanto a fase de transição quanto a fase final para diferentes condições de estabilidade:

$$\Delta h(t) = 2,6 \left(\frac{\overline{F_b} t^2}{U_a} \right)^{1/3} (t^2 s + 4,3)^{-1/3} \quad (5)$$

onde s é o parâmetro de estabilidade do ambiente dado pela expressão:

$$s = \frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z}.$$

Por fim, w_b é calculado para cada partícula, pela relação:

$$w_b = \frac{\Delta z}{\Delta t} = \frac{[\Delta h(U_a, s, t + \Delta t) - \Delta h(U_a, s, t)]}{\Delta t} \quad (6)$$

onde $\Delta h(U_a, s, t + \Delta t)$ e $\Delta h(U_a, s, t)$ são obtidos através da equação (5). Em geral u e s variam com z , seus valores médios na camada estão entre z_1 e $z_1 + \Delta z$ (onde z_1 é a altura da partícula no instante de tempo t e Δz é o incremento vertical de ascensão da pluma). Em uma atmosfera real o *plume rise* termina quando a pluma está estabilizada. Como consequência o cálculo da contribuição do *plume rise* para o movimento vertical das partículas é suspenso quando uma das seguintes condições for satisfeita:

- (i) a inclinação da linha central da pluma é menor do que o valor dado, tal como 0,005;
- (ii) w_b é menor do que o valor do desvio padrão da velocidade vertical do vento σ_w .

Como podemos ver na equação (3), a turbulência ambiental afeta continuamente a ascensão e propagação da pluma. Então, a contribuição do empuxo para a velocidade vertical w_b é introduzida na equação (3) como um parâmetro de entrada.

2.3.2 Métodos Semi-Empíricos

Métodos Semi-empíricos interessantes para a incorporação dos efeitos do empuxo em Modelos Estocásticos Lagrangeanos, foram propostos por

Luhar e Britter (1992), Hurley e Physick (1993), Hurley (1999-2000) e Weil (1994). Estes métodos computam a ascensão média da pluma resolvendo diretamente as equações de conservação de massa, momentum e energia.

2.3.2.1 O Método de Luhar e Britter (1992)

O método de Luhar e Britter (1992) contabiliza os efeitos do empuxo na dispersão da pluma na CLP incluindo a ascensão média da pluma e a dispersão devida à turbulência gerada pela pluma. Para inserir a velocidade média da pluma, os autores adicionaram um novo termo de aceleração à equação de Langevin, para a componente vertical da velocidade. O novo termo de aceleração foi baseado na seguinte expressão:

$$g \frac{(\rho_a - \rho(t))}{\rho_a} = -U_a \frac{dW}{dx} \quad (7)$$

onde $\rho(t)$ é a densidade da pluma no decorrer do tempo t , sendo $(t = x/U_a)$ e ρ_a é a densidade do ar atmosférico. Neste modelo, supõe-se que na CLP os efeitos da estabilidade do ambiente e do vento na dispersão e na ascensão da pluma podem ser negligenciados desde que a temperatura potencial e o vento horizontal não variem com a altura. Este método utiliza as equações de conservação em uma formulação válida para a Camada Limite Neutra. A solução destas equações para a velocidade vertical média W para as três fases de desenvolvimento da pluma foi usada na equação (7). Durante a fase inicial, a fase intermediária e a fase final, a turbulência gerada pela pluma, a turbulência ambiente e a energia contida nos vórtices, respectivamente, governam a ascensão da pluma. A expressão para W , na fase inicial da ascensão, é:

$$W = \left(\frac{4}{9\beta^2} \right)^{1/3} F_b^{1/3} x^{-1/3} \quad (8)$$

onde β é a constante de entranhamento.

Luhar e Britter (1992) enfatizaram a importância de incluir os efeitos da turbulência ambiental no cálculo de W . O efeito do momentum inicial da pluma também foi incluído. Para contabilizar a dispersão devida a turbulência gerada pela pluma, o modelo assume que a massa, a velocidade e a aceleração das partículas têm uma distribuição Gaussiana em relação à linha central da pluma. Assim, o modelo usa dois números aleatórios extraídos da distribuição Gaussiana: um para a componente da aceleração aleatória devido à turbulência ambiente e o outro para a aceleração aleatória devido ao empuxo.

2.3.2.2 O Método de Hurley e Physick (1993)

Hurley e Physick (1993) computaram a velocidade vertical de cada partícula como a soma da velocidade da pluma devido ao empuxo e momentum inicial e a uma perturbação estocástica devido aos efeitos da turbulência gerada pela pluma e pelo ambiente. No entanto o problema de simular o processo de entranhamento não foi resolvido uma vez que a suposição clássica do entranhamento – o raio da pluma aumenta linearmente com a altura – é imposta tanto na parte determinística quanto na estocástica.

A velocidade vertical determinística é obtida integrando-se, em cada passo de tempo, as equações abaixo,

$$\frac{dF_b}{dt} = -\frac{sF_m}{2.25} = -p^2 F_m, \quad (9a)$$

$$\frac{dF_m}{dt} = F_b, \quad (9b)$$

$$\frac{d\Delta h}{dt} = w_p, \quad (9c)$$

onde F_b é o fluxo de empuxo da pluma, F_m é o fluxo de momentum, w_b é a velocidade de ascensão e $p^2 = s/2.25$.

2.3.2.3 O Método de Weil (1994)

Neste método, também foi adicionado um termo de aceleração extra na equação de Langevin para a determinação do *plume rise*. Este termo é obtido através da solução numérica das equações de conservação de massa, do momentum horizontal, momentum vertical e energia, que são dadas respectivamente por:

$$\frac{d}{ds_c}(U_{sc} R^2) = 2R\beta w_b \quad (10a)$$

$$\frac{d}{ds_c}(U_{sc} R^2 \Delta u) = -R^2 w_b \frac{dU_a}{dz} \quad (10b)$$

$$\frac{d}{ds_c}(U_{sc} R^2 w_b) = gR^2 \frac{(\rho_a - \rho_s)}{\rho_s} \quad (10c)$$

$$\frac{dF_b}{ds_c} = s w_b R^2 \quad (10d)$$

onde s_c é a distância ao longo da linha central, U_{sc} é a velocidade ao longo da linha central, Δu é a diferença entre a velocidade horizontal da pluma e do ambiente, ρ_s é a densidade da pluma e ρ_a é a densidade do ar.

Neste modelo considera-se que o parâmetro de entranhamento que aparece na equação (10a) é modificado pela turbulência ambiente e gerada pela pluma. Conseqüentemente a equação (10a) torna-se:

$$\frac{d}{dt}(U_{sc} R^2) = 2\beta R U_{sc} |w_b| + 2\gamma_1 R U_{sc} v_e \quad (11)$$

onde foi usada a identidade $(d/dt = U_{sc} d/ds_c)$, v_e é a velocidade de entranhamento e γ_1 é um parâmetro empírico. O primeiro termo do lado direito da equação (10b) representa o entranhamento devido à turbulência gerada pela pluma, enquanto que o segundo termo descreve a turbulência ambiente.

Para o empuxo da pluma, considera-se $U_{sc} = U_a$, e v_e é dada por:

$$v_e = \frac{v_a}{1 + \gamma_2 \frac{F_b}{(U_a v_a^2 R)}} \quad (12)$$

onde v_a é a velocidade relativa a duas partículas separadas por uma distância R . Nestas aproximações o raio R é definido como “a região que inclui todo o empuxo do fluido”.

Weil (1994) observou que quando a pluma atinge a altura de inversão de temperatura (topo da CLP), a velocidade vertical da pluma torna-se zero. Weil também concluiu que, apesar das diferenças nos modelos, a média dos campos computados por este modelo é muito similar àsquelas produzidas pelo modelo de Luhar e Britter (1992).

2.3.2.4 O Método de Hurley (1999-2000)

Hurley (1999, 2000) propôs um método alternativo para incluir o plume rise induzido pela turbulência em modelos Lagrangeanos. Este método se baseia nas equações de conservação de empuxo, momentum e volume da pluma e como é um dos assuntos principais desta dissertação será melhor detalhado na metodologia.

3. METODOLOGIA

3.1 O Modelo LAMBDA

O modelo LAMBDA é um modelo de partículas Lagrangeano baseado na forma generalizada da equação de Langevin para a velocidade aleatória (Thomson, 1987). Em diversas simulações da dispersão de poluentes atmosféricos, o modelo LAMBDA obteve resultados confiáveis (Brusasca et al., 1992; Anfossi et al., 1997; Ferrero et al., 1998; Carvalho et al., 2002).

Para condições de dispersão turbulenta não-estacionária e não-homogênea velocidade turbulenta é calculada pela equação de Langevin tridimensional:

$$du_i = a_i(x_i, u_i)dt + b_i(x_i, u_i)dW_i(t) \quad (13)$$

onde $i = u, v, w$, x é o deslocamento, u é a velocidade turbulenta, a é um coeficiente determinístico, b é um coeficiente de difusão e dW é um incremento aleatório com distribuição normal (média 0 e variância dt). O deslocamento de cada partícula é dado por:

$$dx_i = (U_i + u_i)dt \quad (14)$$

onde U é a velocidade média do vento.

Seguindo Thomson (1987), o coeficiente a depende da Função Densidade de Probabilidade Euleriana, $P(x_i, u_i)$, da velocidade turbulenta e deve ser determinada a partir da equação de Fokker-Planck para condições estacionárias:

$$\frac{\partial(u_i P)}{\partial x_i} = -\frac{\partial(a_i P)}{\partial u_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2(b_i^2 P)}{\partial u_i^2} \quad (15)$$

A equação de Fokker-Planck pode ser dividida em duas equações:

$$a_i P = \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{b_i^2}{2} P \right) \phi_i(x_i, u_i) \quad (16a)$$

e

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P) \quad (16b)$$

com a condição $\phi_i \rightarrow 0$ quando $u_i \rightarrow \infty$, as quais satisfazem uma condição necessária para os modelos estocásticos, denominada *well-mixed* (uma vez que as partículas de um poluente estão bem misturadas, elas permanecerão desta forma a medida que o tempo passa). A seguinte equação para $a_i(x_i, u_i)$ é portanto, obtida:

$$a_i(x_i, u_i) = \frac{1}{P} \left[\frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{b_i^2}{2} P \right) + \phi_i(x_i, u_i) \right] \quad (17)$$

Nas duas direções horizontais considera-se que a PDF é Gaussiana. Na direção vertical, devido a não-uniformidade das condições turbulentas e / ou convecção, a PDF é não-Gaussiana. Neste caso, duas diferentes aproximações para a PDF podem ser adotadas a fim de calcular a equação de Fokker-Planck: uma bi-Gaussiana, truncada na terceira ordem, e uma Gram-Charlier, truncada na terceira e quarta ordens (Ferrero e Anfossi, 1998). A PDF

bi-Gaussiana é dada pela combinação linear de duas Gaussianas e a PDF Gram-Charlier é dada pela expansão em série de polinômios de Hermite.

O coeficiente estocástico $b_i(x_i, u_i)$ é obtido a partir da função de estrutura Lagrangeana (a média de conjunto do quadrado das variações da velocidade Lagrangeana no intervalo de tempo Δt):

$$D(\Delta t) = \left\langle [u_i(t + \Delta t) - u_i(t)]^2 \right\rangle = \left\langle (\Delta u_i)^2 \right\rangle \quad (18)$$

Para o subintervalo inercial de Kolmogorov ($\tau_K \ll \Delta t \ll \tau_L$), onde τ_K é a escala de tempo de Kolmogorov, τ_L é a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana e Δt é o passo no tempo, temos que:

$$D(\Delta t) = C_0 \varepsilon(x_i, t) \Delta t \quad (19)$$

onde C_0 é a constante de Kolmogorov (entre 2 e 7 – Rodean, 1994; Degrazia e Anfossi, 1998) e $\varepsilon(x_i, t)$ é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta. Tomando a média de conjunto do quadrado da Equação de Langevin e aplicando algumas condições para o processo incremental dW , pode-se obter que:

$$\left\langle (\Delta u_i)^2 \right\rangle = b_i^2 \Delta t \quad (20)$$

Então, a partir das equações (19) e (20), mostra-se que $b_i(x_i, u_i)$ está relacionado com a constante C_0 da seguinte forma:

$$b_i(x_i, u_i) = \delta_i \sqrt{C_0 \varepsilon} \quad (21)$$

onde δ_i é o delta de Kronecker. Também é possível escrever a expressão $(C_0 \varepsilon)^{1/2}$ como uma função da variância da velocidade turbulenta σ_i^2 e da escala de decorrelação Lagrangeana τ_{L_i} (Rodean, 1994):

$$C_0 \varepsilon = 2 \frac{\sigma_i^2}{\tau_{L_i}} \quad (22)$$

Em aplicações práticas, as equações (13) e (14) precisam ser discretizadas. O modelo LAMBDA utiliza um esquema de Euler explícito para a equação de Langevin e um esquema implícito para o cálculo do deslocamento das partículas (Fresch e Wilson, 1995), ou seja,

$$(u_i)_{N+1} = (u_i)_N + (a_i)_N \Delta t + (b_i)_N (\Delta W_i)_N \quad (23a)$$

e

$$(x_i)_{N+1} = (x_i)_N + (u_i)_{N+1} \Delta t \quad (23b)$$

No modelo LAMBDA, a concentração é determinada através da contagem das partículas em um volume imaginário na posição x, y, z :

$$C(x_i, t) = \frac{m_p N_v}{V_c} \quad (24)$$

onde m_p é a massa da partícula, N_v é o número de partículas dentro do volume e V_c é o volume da célula. A massa da partícula é determinada por:

$$m_p = \frac{Q N_{\Delta t}}{N_p} \quad (25)$$

onde Q é a taxa de emissão, $N_{\Delta t}$ é o número de passos no tempo e N_p é o número de partículas emitidas por passo de tempo.

3.2 O Método CSIRO

O método que considera o comportamento de ascensão da pluma, implementado no modelo LAMBDA, é sugerido por Hurley (1999, 2000). Este

método determina a velocidade vertical de cada partícula como a soma da velocidade da pluma devido ao empuxo e ao efeito do momentum inicial e da perturbação estocástica devido aos efeitos combinados da turbulência ambiente e da turbulência gerada pela pluma.

Pelo método sugerido por Hurley (1999, 2000), a velocidade vertical da pluma, w_b , é obtida integrando numericamente, em cada passo de tempo, as equações de conservação do volume da pluma (G), do fluxo de empuxo (F_b) e do fluxo de momentum (F_m):

$$\frac{dG}{dt} = 2R \left(\alpha w_b^2 + \beta U_a w_b^2 + \gamma u_p E^{1/2} \right) \quad (26a)$$

$$\frac{dF_b}{dt} = -s \frac{F_m}{u_p} \left(\frac{1}{2.25} U_a + w_b \right) \quad (26b)$$

$$\frac{dF_m}{dt} = F_b \quad (26c)$$

onde

$$G = \frac{T_a}{T_s} u_p R^2 \quad (27)$$

$$F_m = \frac{T_a}{T_s} u_p R^2 w_b \quad (28)$$

$$w_b = \frac{F_m}{G} \quad (29)$$

$$F_b = u_p R^2 g \frac{(T_s - T_a)}{T_s} \quad (30)$$

$$R = \sqrt{\frac{G + (F_b/g)}{u_p}} \quad (31)$$

$$u_p = \sqrt{U_a^2 + w_b^2} \quad (32)$$

e

$$U_a = \sqrt{u^2 + v^2} \quad (33)$$

Nas equações (26) – (33), T_a é a temperatura ambiente, T_s é a temperatura da pluma, R é o raio da pluma, u_p é a velocidade horizontal da partícula, U_a é a velocidade horizontal do vento, u é a componente zonal do vento, v é a componente meridional do vento, s é o parâmetro de estabilidade, definido como em (5), E é a energia cinética turbulenta e $\alpha = 0.1$, $\beta = 0.6$ e $\gamma = 0.1$.

As componentes estocásticas do vento são calculadas pela equação de Langevin. Para simulações do “*plume rise*” na CLP assume-se a forma Gaussiana da PDF para as duas componentes horizontais, enquanto na vertical é usada uma distribuição não-Gaussiana.

As propriedades da turbulência associadas com a ascensão da pluma podem ser representadas pela distribuição das variâncias de velocidade em cada direção, assim como os efeitos da taxa de dissipação da energia cinética devido ao “*plume rise*”. A dimensão de plumas em qualquer ponto pode ser representada pelo raio da pluma $R = \beta \Delta h(x)$. Assumindo a distribuição Gaussiana e usando $\sigma = R/\sqrt{2}$, as dimensões resultantes da pluma são $\sigma_y = R$ e $\sigma_z = R/2$. Diferenciando estas equações em relação ao tempo e usando o fato que $dR/dt = \beta dh_e/dt = \beta w_b$, obtemos a expressão para as componentes da variância de velocidade devido aos efeitos do “*plume rise*”:

$$\sigma_{up}^2 = \sigma_{vp}^2 = (\beta w_b)^2 \quad (34a)$$

$$\sigma_{wp}^2 = \left(\frac{\beta w_b}{2} \right)^2 \quad (34b)$$

O efeito de empuxo da pluma afeta, de forma direta, somente a componente vertical. Contudo, às três componentes da variância da velocidade, utilizadas na Equação de Langevin, são influenciadas. Portanto, as equações para as componentes da variância de velocidade são:

$$\sigma_u^2 = \sigma_{ua}^2 + \sigma_{up}^2 \quad (35a)$$

$$\sigma_v^2 = \sigma_{va}^2 + \sigma_{vp}^2 \quad (35b)$$

$$\sigma_w^2 = \sigma_{wa}^2 + \sigma_{wp}^2 \quad (35c)$$

onde o subscrito a refere-se à turbulência do ar ambiente e o subscrito b refere-se à turbulência devido ao empuxo da pluma.

A partir de observações é possível determinar os valores de temperatura de saída da pluma T_{s0} , temperatura ambiente na altura da fonte de emissão T_{a0} , velocidade de saída da pluma v_{s0} e raio da fonte de emissão r_s e, assim, calcular os valores iniciais para o fluxo de empuxo, fluxo de momentum, volume da pluma e raio da pluma:

$$F_b = g r_s^2 v_{s0} \frac{(T_{s0} - T_{a0})}{T_{s0}} \quad (36)$$

$$F_m = v_{s0}^2 r_s^2 \frac{T_{a0}}{T_{s0}} \quad (37)$$

$$G_s = \frac{F_m}{v_{s0}} \quad (38)$$

e

$$R_s = \sqrt{\frac{v_{s0}}{\sqrt{u_0^2 + v_{s0}^2}}} \quad (39)$$

onde w_b será igual a v_{s0} e u_p e U_a são determinados pelas Equações (32) e (33). Depois que o efeito de ascensão da pluma está ativo, todas as equações de (26) a (34) são utilizadas. O empuxo da pluma é terminado quando $\varepsilon_p \left[1.5 w_p^3 / \Delta h(x) \right] \leq \varepsilon_a \left[\sigma_w^2 / (C_0 \Delta t) \right]$ (condições instáveis) ou quando o empuxo de uma partícula torna-se menor ou igual a zero (condições estáveis).

3.3 Parametrização da Turbulência

Como foi descrito na seção 3.1, o coeficiente determinístico a e o coeficiente estocástico b na Equação de Langevin dependem do produto da constante de Kolmogorov pela taxa de dissipação de energia cinética turbulenta $C_0 \varepsilon$. Este produto pode ser calculado através de parametrização

para a variância da velocidade turbulenta σ_i^2 e para a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana τ_{L_i} , como descrito pela relação (22), onde $i = u, v, w$. A presente aplicação considera o esquema de parametrização da turbulência sugerido por Rizza et al. (2004).

O ponto de partida para esta formulação é a teoria estatística de Taylor (Taylor, 1921; Batchelor, 1949) que fornece a relação entre a razão de dissipação e o tempo de viagem t para partículas fictícias:

$$\sigma_\alpha^2 = 2\sigma_i^2 t^2 \int_0^\infty F_i^L(n) \frac{\sin^2(\pi n t)}{(\pi n t)^2} dn \quad (40)$$

onde: $\alpha = x, y, z$, $i = u, v, w$, F_i^L é a função densidade espectral Lagrangeana, σ_i^2 é a variância da velocidade do vento e n é a frequência.

Estas funções espectrais Lagrangeanas F_i^L , são quantidades quase impossíveis de avaliar, assim por meio da fórmula de Hay-Pasquill (1959), podemos escrever:

$$nF_i^L(n) = \beta_i n F_i^E(\beta_i n)$$

onde β_i é a razão entre as escalas de tempo integrais Lagrangeana e Euleriana e F_i^E é o espectro Euleriano normalizado pela variância de velocidade σ_i^2 , assim temos:

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\sigma_i^2 \beta_i^2}{\pi^2} \int_0^\infty F_i^E(n) \sin\left(\frac{\pi n t}{\beta_i}\right) \frac{dn}{n^2} \quad (41)$$

É importante apontar que a normalização da função densidade espectral Euleriana, deve satisfazer a condição:

$$\int_0^\infty F_i^E(n) dn = 1 \quad (42)$$

As vezes é mais fácil normalizar cada componente do espectro com a própria variância, como sugerido por Degrazia et al. (2000), mas isto claramente viola as leis de conservação, uma vez que satisfaz a restrição imposta pela equação (42), pois $\int_0^{\infty} \left[(S_{ib}^E / \sigma_{ib}^2) + (S_{is}^E / \sigma_{is}^2) \right] dn = 2$, onde S_{ib}^E e S_{is}^E são os espectros Eulerianos dimensionais, σ_{ib}^2 e σ_{is}^2 são as variâncias de velocidade e os subscritos b e s indicam os termos de produção de cisalhamento e empuxo, respectivamente.

As parametrizações são obtidas pela superposição linear de uma componente térmica, produzida pelo empuxo, uma componente mecânica produzida pelo cisalhamento, negligenciando a interação entre elas (Hinze, 1975, p. 232; Højstrup, 1982; Frisch, 1995, p. 105). A superposição linear dos dois mecanismos ocorre somente quando existe independência estatística entre as componentes de Fourier dos mecanismos em questão; isto acontece quando os intervalos de número de onda contendo energia dos dois espectros estão bem separados (Mangia et al., 2000).

Com base na teoria de Taylor, Batchelor (1949) propôs a seguinte relação dependente do tempo para os coeficientes de difusão:

$$K_{\alpha} = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_{\alpha}^2}{dt} = \frac{\sigma_i^2 \beta_i}{2\pi} \int_0^{\infty} F_i^E(n) \frac{\sin(n\pi t / \beta_i)}{n} dn, \quad (43)$$

onde $\sin^2(n\pi t / \beta_i) / n^2$ é a função filtro passa-baixa que leva em conta o tempo de viagem da pluma. De acordo com Wandel e Kofoed-Hansen (1962), β_i pode ser escrito como:

$$\beta_i = \left(\frac{\pi \bar{U}^2}{16 \sigma_i^2} \right)^{1/2} \quad (44)$$

onde $\bar{U}$ é a velocidade média do vento.

Para grandes tempos de viagem, a função filtro passa-baixa na Equação (43) seleciona a frequência característica ($n \rightarrow 0$) que descreve os turbilhões

mais energéticos. Neste caso, $F_i^E(n) \approx F_i^E(0)$ o coeficiente de difusão torna-se independente do tempo de viagem a partir da fonte e pode ser expresso como uma função das propriedades locais da turbulência:

$$K_\alpha = \frac{\sigma_i^2 \beta_i F_i^E(0)}{4}. \quad (45)$$

A partir da Equação (45) nós podemos também determinar a escala de decorrelação Lagrangeana, dada por:

$$T_{Li} = \frac{K_\alpha}{\sigma_i^2} = \frac{\beta_i F_i^E(0)}{4}. \quad (46)$$

Assumindo a hipótese de superposição linear para os processos térmico e mecânico, pode-se modelar o espectro Euleriano dimensional como:

$$S_i^E(n) = S_{ib}^E(n) + S_{is}^E(n), \quad (47)$$

O espectro Euleriano adimensional é obtido normalizando espectro Euleriano dimensional com a variância total ($\sigma_i^2 = \sigma_{ib}^2 + \sigma_{is}^2$):

$$F_i^E(n) = \frac{S_{ib}^E(n) + S_{is}^E(n)}{\sigma_i^2} \equiv \frac{S_{ib}^E(n) + S_{is}^E(n)}{\sigma_{ib}^2 + \sigma_{is}^2}. \quad (48)$$

De acordo com Olesen et al. (1984), $S_{ib}^E(n)$ pode ser dado por

$$\frac{n S_{ib}^E(n)}{w_*^2} = \frac{0.98 c_i f \psi_{\epsilon b}^{2/3} (z/z_i)^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3} \left[1 + 1.5 \frac{f}{(f_m^*)_i} \right]^{5/3}}, \quad (49)$$

onde w_* é a escala de velocidade convectiva, $\psi_{\epsilon b} = \epsilon_b h / w_*^3$ é a função taxa de dissipação molecular adimensional associada à produção térmica, ϵ_b é a taxa

de dissipação de energia cinética turbulenta associada à produção térmica dada por Højstrup (1982), z_i é a altura da CLP convectiva, $f = nz/U$ é a frequência reduzida, $(f_m^*)_i = z/(\lambda_m)_i$ é a frequência reduzida do pico do espectro convectivo, $(\lambda_m)_i$ é o comprimento de onda do pico do espectro obtido de acordo com Kaimal et al. (1976) e $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi\kappa)^{-2/3}$ com $\alpha_u = 0.5 \pm 0.05$ e $\alpha_i = 1, 4/3, 4/3$ para as componentes u , v e w , respectivamente.

Segundo Degrazia e Moraes (1982), $S_{is}^E(n)$ pode ser escrito como

$$\frac{nS_{is}^E(n)}{u_*^2} = \frac{1.5 c_i f \Phi_{\varepsilon_s}^{2/3}}{(f_m)_i^{5/3} \left[1 + 1.5 \frac{f^{5/3}}{(f_m)_i^{5/3}} \right]} \quad (50)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, $\Phi_{\varepsilon_s} = (\varepsilon_s \kappa z)/u_*^3$ é a função taxa de dissipação associada à produção mecânica, ε_s é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta associada à produção mecânica dada por Højstrup (1982) e $(f_m)_i$ é a frequência reduzida do pico do espectro neutro obtida de acordo com Olesen et al. (1984) [$(f_m)_u = 0.045$, $(f_m)_v = 0.16$, $(f_m)_w = 0.33$].

Considerando as Equações (45) e (46) e assumindo a hipótese de superposição linear dada pela Equação (47), as expressões para os coeficientes de difusão e escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana para grandes tempos de viagem podem ser dadas por:

$$K_\alpha = \frac{\beta_i}{4} [S_{ib}^E(0) + S_{is}^E(0)] \quad (51)$$

e

$$T_{Li} = \frac{\beta_i}{4} \left[\frac{S_{ib}^E(0) + S_{is}^E(0)}{\sigma_i^2} \right]. \quad (52)$$

Tomando o limite das Equações (49) e (50) quando $n \rightarrow 0$, pode-se obter as expressões para o espectro adimensional na origem $S_{ib}^E(0)$ e $S_{is}^E(0)$:

$$S_{ib}^E(0) = \lim_{n \rightarrow 0} S_{ib}^E(n) = \frac{0.98 c_i (z/u) w_*^2 \Psi_{\epsilon b}^{2/3} (z/h)^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3}} \quad (53 \text{ a})$$

e

$$S_{is}^E(0) = \lim_{n \rightarrow 0} S_{is}^E(n) = \frac{1.5 c_i (z/u) u_*^2 \Phi_{\epsilon s}^{2/3}}{(f_m^*)_i^{5/3}}. \quad (53 \text{ b})$$

Integrando analiticamente o espectro Euleriano dado pelas Equações (49) e (50) sobre todo o domínio de frequências, pode-se obter as componentes da variância da velocidade do vento mecânica e térmica:

$$\sigma_{ib}^2 = \int_0^\infty S_{ib}^E(n) dn = \frac{1.06 c_i \Psi_{\epsilon b}^{2/3} (z/h)^{2/3} w_*^2}{[(f_m^*)_i]^{2/3}} \quad (54 \text{ a})$$

e

$$\sigma_{is}^2 = \int_0^\infty S_{is}^E(n) dn = \frac{2.32 c_i (\Phi_{\epsilon s}^{2/3})^{2/3} u_*^2}{[(f_m^*)_i]^{2/3}}. \quad (54 \text{ b})$$

A partir das quais é possível obter a variância total ($\sigma_i^2 = \sigma_{ib}^2 + \sigma_{is}^2$).

Nas Figuras 6 e 7 são apresentados os perfis verticais dos coeficientes de difusão e escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana. A Figura 6 é obtida através da substituição das Equações (53a) e (53b) na Equação (51). A Figura 8 é obtida através da substituição das Equações (54a) e (54b) em Equação (52). As figuras mostram perfis típicos da CLP. Para efeito de comparação, a Figura 8 apresenta os perfis das escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana para o caso em que cada componente do espectro é normalizada com a própria variância, como sugerido por Degrazia et al. (2000). Nota-se que quando a normalização é realizada como sugerido em Degrazia et al. (2000), os valores para a escala de tempo são bem maiores. Esta diferença pode implicar, certamente, em mudanças nos valores de concentrações previstas por um modelo de dispersão Lagrangeano.

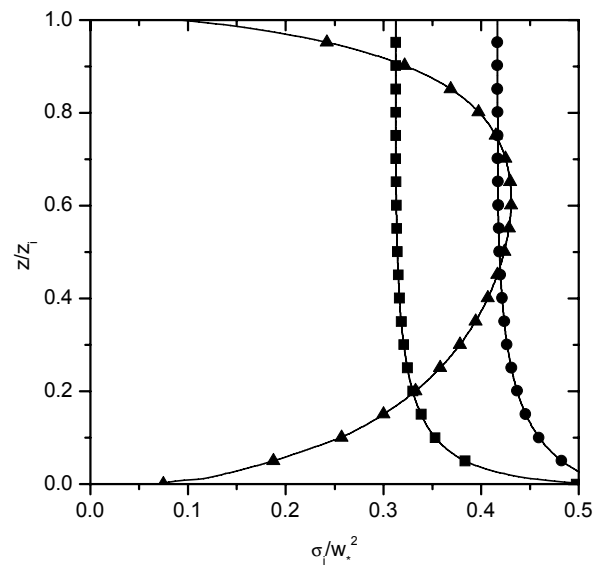


FIGURA 6 – Perfis de variância da velocidade turbulenta adimensional [σ_u^2 (■), σ_v^2 (●), σ_w^2 (▲)] de acordo com a equação (14) para uma condição tipicamente convectiva ($L = -10$ m, $z_i = 1000$ m e $w_* = 2.0$ m/s). Fonte: Rizza et al., 2004.

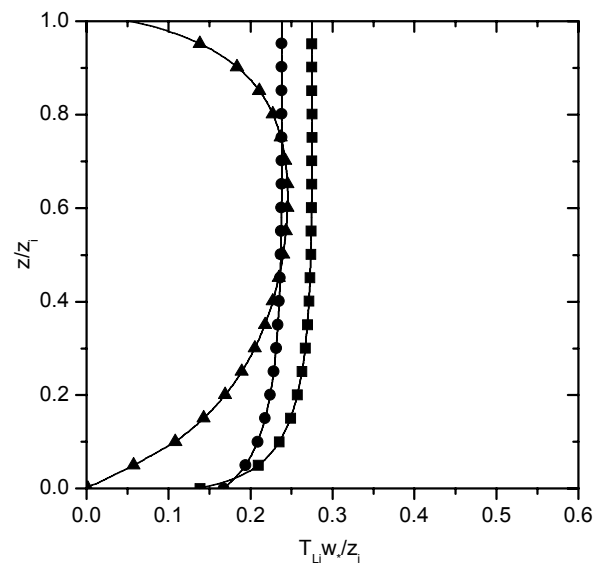


FIGURA 7 – Perfis de escala de tempo de descorrelação Lagrangeana adimensional [τ_u (■), τ_v (●), τ_w (▲)] de acordo com a equação (15) para uma condição tipicamente convectiva ($L = -10$ m, $z_i = 1000$ m e $w_* = 2.0$ m/s). Fonte: Rizza et al., 2004.

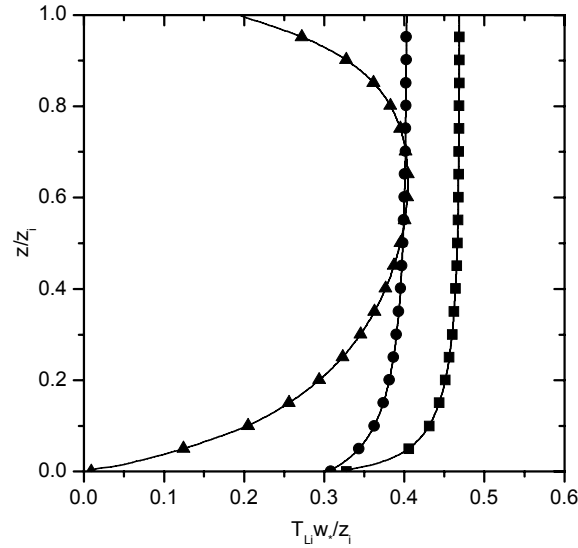


FIGURA 8 – Perfis de escala de tempo de decorrelação Lagrangeana adimensional [τ_u (■), τ_v (●), τ_w (▲)] de acordo com a equação (15) para uma condição tipicamente convectiva ($L = -10$ m, $z_i = 1000$ m e $w_* = 2.0$ m/s). Fonte: Degrazia et al., 2000.

3.3 Solução das Equações Diferenciais (Método de Adams)

Neste trabalho foi utilizado o método de Adams para a discretização das equações (26a)-(26c) para a ascensão da pluma. O método de Adams é um método numérico para a solução de equações diferenciais ordinárias, sujeitas às condições iniciais.

3.3.1 Problema de valor inicial (PVI)

O problema de valor inicial (PVI), de primeira ordem, apresenta a forma

$$\begin{cases} y' = f(x, y), \\ y(a) = \eta, \\ a \leq x \leq b \quad e \quad -\infty \leq y \leq \infty \end{cases} \quad (55)$$

A solução do PVI é uma função $y = y(x)$ contínua e diferenciável que satisfaz (55).

O método de Adams-Bashforth pode ser obtido por intermédio da integração do PVI,

$$y_{i+1} - y_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(t, y(t)) dt \quad (56)$$

A função integrando $f(t, y(t))$ pode ser aproximada por um polinômio interpolador $P(x)$ que passa pelos pontos de coordenadas $(x_j, f(x_j, y_j))$. Logo,

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} P(x) dx \quad (57)$$

3.3.2 Método de Passo Dois

Seja o polinômio de Lagrange de grau 1, que passa pelos pontos de coordenadas (x_0, f_0) e (x_1, f_1) , o qual é dado pela expressão,

$$P_1(x) = f_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \quad (58)$$

O valor de $f_0 = f(x_0, y_0)$ é obtido a partir de y_0 que é a condição inicial. Já o valor de y_1 para $f_1 = f(x_1, y_1)$ tem que ser calculado utilizando um método de passo simples. Fazendo

$$u = \frac{x - x_0}{h} \rightarrow x - x_0 = hu \text{ e } x - x_1 = x - x_0 - h = h(u - 1)$$

Substituindo as expressões acima em (58), tem-se

$$P_1(x) = f_1 \frac{hu}{h} + f_0 \frac{h(u-1)}{-h} \rightarrow P_1(x) = f_1 u + f_0 (1-u) \quad (59)$$

Deste modo, (57) torna-se

$$y_2 = y_1 + \int_{x_1}^{x_2} P_1(x) dx$$

Fazendo mudança de variável de $x \rightarrow u$ e sendo $dx = hdu$,

$$\begin{aligned} y_2 &= y_1 + \int_1^2 [f_1 u + f_0 (1-u)] h du, \\ &= y_1 + h \left[f_1 \left(\frac{u^2}{2} \right) + f_0 \left(u - \frac{u^2}{2} \right) \right]_1^2 \\ &= y_1 + h \left(\frac{3}{2} f_1 - \frac{1}{2} f_0 \right) \\ y_2 &= y_1 + \frac{h}{2} (3f_1 - f_0) \end{aligned} \quad (60)$$

A expressão acima pode ser generalizada, obtendo-se a fórmula explícita de Adams-Bashforth de passo $k = 2$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} (3f_i - f_{i-1}) \quad (61)$$

3.4 Dados Experimentais

Para realizar a avaliação do modelo LAMBDA, utilizam-se as medidas de concentração obtidas durante o experimento Kincaid realizado pelo EPRI (Electric Power Research Institute) durante 1980 e 1981. O objetivo do experimento era coletar dados meteorológicos e de concentração para serem utilizados no desenvolvimento e avaliação de modelos de dispersão para emissão a partir de fontes elevadas.

A usina de Kincaid esta localizada em Illinois, EUA (39.59° N, 89,49° W) em uma região rural de topografia plana com alguns lagos, onde o comprimento de rugosidade é aproximadamente 0,1m. O poluente (SF_6) foi emitido com empuxo a partir de uma fonte de 187m de altura e 9m de diâmetro e coletado por amostradores posicionados em arcos entre 0,5 a 50km. A concentração média foi medida e registrada a cada hora. No total, o experimento Kincaid contém 1284 registros durante 171 h. Estes dados estão classificados através de um índice de qualidade de 1 (baixa qualidade) a 3 (alta qualidade).

Os dados meteorológicos foram obtidos no local da usina em uma torre de 100m. As condições meteorológicas variam de neutras a convectivas, com maior representação de dias convectivos. A velocidade do vento observada varia de $1,5 \text{ m/s}^{-1}$ a $13,7 \text{ m/s}^{-1}$. Na TABELA 1 são exibidos os dados micrometeorológicos de oito experimentos em condições convectivas.

exp.	z_i (m)	$\partial\theta/\partial z$ (K/m)	T (10m) (K)	U (10m) (m/s)	U (100m) (m/s)	u_* (m/s)	w_* (m/s)	L (m)	Q (g/s)	T_{s0} (K)	v_{s0} (m/s)
1	893	-0.0022	284.2	2.0	2.3	0.22	1.95	-3.9.	11.2	432	29.6
2	1032	-0.0022	285.2	2.1	2.3	0.22	1.95	-4.8	11.2	432	29.2
3	1175	-0.0022	286.2	3.0	3.3	0.28	2.05	-10.4	11.3	432	29.6
4	1355	-0.0022	286.6	2.1	2.4	0.25	2.19	-6.3	11.1	432	29.9
5	1911	-0.0022	298.7	2.2	2.5	0.28	2.67	-5.8	11.2	457	31.2
6	950	-0.0022	285.0	3.8	4.0	0.40	1.79	-33.3	16.2	436	16.6
7	1253	-0.0022	286.1	4.5	4.5	0.46	1.990	-27	12.0	438	16.9
8	1548	-0.0022	287.5	4.2	5.1	0.44	2.12	-3.8	11.1	434	17.9
9	600	0.0018	301.8	1.6	1.7	0.24	2.41	-3.6	13.2	394	12
10	600	0.0038	302.3	1.4	1.7	0.21	2.28	-3.1	13.5	395	12
11	600	0.0038	302.5	1.5	1.9	0.21	1.85	-5.4	14.3	395	12
12	619	0.0018	302.4	1.6	2.7	0.20	1.53	-9.2	14.9	395	11.9
13	823	-0.0042	295.9	2.4	2.7	0.30	2.37	-6.9	12.2	426	16.1
14	1124	-0.0042	296.8	2.2	2.6	0.28	2.51	-6.4	13	427	16.8
15	1250	-0.0042	297.7	2.5	3.2	0.31	2.62	-8.3	13.2	428	16.4
16	1353	-0.0062	298.5	2.7	3.4	0.32	2.55	-10.6	12.7	428	16.9

TABELA 1 – Dados meteorológicos e dados de emissão medidos durante oito experimentos convectivos em Kincaid. z_i é a altura da camada limite convectiva, $\partial\theta/\partial z$ é o gradiente de temperatura potencial, T (10m) é a temperatura ambiente na altura de 10 m, U (10m) é velocidade média do vento na altura de 10 m, U (100m) é a velocidade média do vento na altura de 100 m, u_* é a velocidade de fricção, w_* é a escala de velocidade convectiva, L é o comprimento de Monin-Obukhov e Q é a taxa de emissão.

4. RESULTADOS

Nesta seção apresentam-se os resultados das simulações numéricas realizadas com o modelo LAMBDA e comparações com dados de concentração observados durante o experimento conduzido na usina termoeletrica de Kincaid, Illinois (Hanna e Paine, 1989). Os dados meteorológicos e de emissão medidos durante os experimentos (TABELA 1) foram utilizados para criar arquivos de entrada para o modelo LAMBDA. O conjunto de dados do experimento de Kincaid está classificado através de um índice de qualidade de 1 (baixa qualidade) a 3 (alta qualidade). No presente trabalho, utilizam-se os dados de qualidade 3. Velocidades do vento medidas em 10 e 100 metros foram utilizadas para calcular o coeficiente para o perfil de velocidade exponencial, o qual é usado para obter a velocidade do vento como segue:

$$\gamma = \left[\frac{\log(U(100)/U(10))}{\log(100/10)} \right] \quad (62)$$

e

$$U(z) = U(10) \left[\frac{z}{10} \right]^\gamma, \quad (63)$$

onde $U(10)$ é a velocidade do vento em 10 m e $U(100)$ é a velocidade do vento em 100 m.

Para as simulações com o modelo LAMBDA, o domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores de concentração e o domínio vertical foi fixado igual a altura CLP. O passo no tempo foi mantido constante e obtido de acordo com os valores da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana ($\Delta t = \tau_{L_i} / c$), onde τ_{L_i} deve ser o menor valor entre $\tau_{L_u}, \tau_{L_v}, \tau_{L_w}$ e c é um coeficiente empírico igual a 10. Cinquenta partículas foram emitidas durante 3000 - 3500 passos no tempo. O modelo foi utilizado considerando uma PDF Gaussiana para as componentes horizontais da velocidade turbulenta e uma PDF bi-Gaussiana para a componente vertical (para lidar com as condições turbulentas não-uniformes e/ou convectivas). A PDF bi-Gaussiana é truncada na terceira ordem e é dada pela combinação linear de duas distribuições Gaussianas (Baerentsen e Berkowicz, 1984).

Inicialmente, é realizada uma avaliação qualitativa da implementação do método semi-empírico para a ascensão da pluma no modelo LAMBDA. Neste sentido, as FIGURAS 9 a 12 ilustram resultados de uma simulação utilizando os dados do experimento 2 de Kincaid (ver TABELA 1). A FIGURA 9 mostra a pluma do poluente, onde nota-se uma aparência típica de ascensão da pluma devido ao empuxo em condições convectivas (Anfossi, 1982; Sandroni et al., 1981). Nota-se, neste caso, que o poluente alcança a superfície em uma distância de 2000 – 2500 m a partir da fonte. Para efeito de comparação, FIGURA 9 apresenta a evolução da pluma sem o efeito de empuxo. Observa-se que o poluente alcança a superfície em uma distância de 750 m a partir da fonte, ou seja, três vezes menor que a distância simulada com efeito de empuxo. As FIGURAS 11 e 12 apresentam os perfis longitudinais de máxima concentração ao nível da superfície ($arcmax$) e concentração integrada lateralmente ao nível da superfície (C_y), com e sem o efeito de 'plume rise'. De acordo com as figuras, os valores dos picos de concentração são bem menores (cerca de 5 vezes para $arcmax$ e 3 vezes para C_y), quando o efeito de ascensão da pluma é considerado. Este resultado é muito importante no sentido que a posição e o valor do máximo de concentração são parâmetros significantes para o controle da qualidade do ar.

Em uma segunda etapa, os resultados das simulações são apresentados em uma forma quantitativa através das TABELAS 2 e 3 e da FIGURA 13. A

TABELA 2 mostra a comparação entre valores observados e previstos de *arcmax*. A TABELA 3 apresenta os resultados da análise estatística realizada com os dados da TABELA 2. A FIGURA 13 apresenta o diagrama de espalhamento para o confronto entre *arcmax* observado e previsto. Os índices estatísticos utilizados são os seguintes (Hanna, 1989):

$$NMSE = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p} \quad (\text{Erro Quadrático Médio Normalizado})$$

$$FB = (\overline{C_o} - \overline{C_p}) / (0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})) \quad (\text{Desvio Fracional})$$

$$FS = 2(\sigma_o - \sigma_p) / (\sigma_o + \sigma_p) \quad (\text{Desvio Padrão Fracional})$$

$$R = \overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})} / \sigma_o \sigma_p \quad (\text{Coeficiente de Correlação})$$

$$FA2 = 0.5 \leq C_o / C_p \leq 2 \quad (\text{Fator de 2})$$

onde C é a quantidade analisada (concentração *arcmax*) e o subscritos "o" e "p" representam os valores observado e previsto, respectivamente. As barras nos índices estatísticos indicam médias no tempo. O índice estatístico *NMSE* fornece a informação dos desvios entre concentrações previstas e observadas. O índice estatístico *FB* indica a tendência do modelo de subestimar ou superestimar as concentrações observadas. O índice estatístico *FS* indica o quanto o modelo consegue simular a dispersão dos dados observados. O índice estatístico *FA2* fornece a fração dos dados para os quais $0.5 \leq C_o / C_p \leq 2$. Quanto mais próximos de zero estiverem os valores de *NMSE*, *FB* e *FS* e quanto mais próximos de 1 estiverem os valores de *R* e *FA2*, melhores são os resultados.

Os resultados das TABELA 2 e 3 e da FIGURA 13 mostram uma boa concordância entre os valores observados e os valores previstos pelo modelo LAMBDA. Analisando os índices estatísticos é possível notar que o modelo simula satisfatoriamente as concentrações observadas com valores de *NMSE*, *FB* e *FS* próximos de zero e *FA2* próximos de 1. Uma inspeção mais detalhada da mesma tabela revela que a correlação entre valores de concentração previstos e observados apresenta um valor de relativamente baixo. De qualquer forma, pode-se dizer que todos os valores para os índices estão dentro de intervalos que são característicos daqueles encontrados por outros modelos aplicados a outros conjuntos de dados, mostrando que o modelo