

Modelo Semi-Lagrangiano de Dispersão Atmosférica - Avaliação

Semi-Lagrangian Model of Atmospheric Dispersion - Evaluation

Lisiane Ramires Meneses, Ricardo Carvalho de Almeida

Universidade Federal do Paraná, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia - PR, Brasil
lisianemeneses@pelotas.ifsul.edu.br; rcalmeida@ufpr.br

Resumo

No presente trabalho é avaliado um modelo numérico bidimensional para simular a dispersão de poluentes emitidos na Camada Limite Atmosférica (CLA) sobre terreno plano. O modelo é baseado na solução numérica da equação da difusão-advecção utilizando um esquema Semi-Lagrangiano de três níveis de tempo para a discretização do termo advectivo. É investigado o problema da dispersão de poluentes em condições atmosféricas estáveis e instáveis, a partir da implementação de duas diferentes formulações para a difusividade turbulenta vertical. Os valores de concentração observados no experimento Prairie Grass foram comparados aos previstos pelo modelo, utilizando-se índices estatísticos adequados. A análise estatística mostra que o modelo simula satisfatoriamente os dados experimentais e apresenta resultados comparáveis aos obtidos por outros autores com outros modelos de dispersão presentes na literatura.

Palavras-chave: dispersão atmosférica, método Semi-Lagrangiano, solução numérica, equação da advecção-difusão, camada limite atmosférica.

Abstract

A two-dimensional Semi-Lagrangian numerical model to simulate pollutant dispersion in the atmospheric boundary layer on flat terrain is tested. The model is based on the numerical solution of the advection-diffusion equation using a three-time-level Semi-Lagrangian scheme for the discretization of the advection term. The problem of pollutant dispersion in stable and unstable atmospheric conditions is investigated using two different parameterizations for the vertical turbulent diffusion coefficient. The performance of the model is discussed from the confrontation of the concentration values observed in the dispersion experiment of Prairie Grass with the ones simulated by the model. The statistical analysis shows that the model simulates the experimental data in a satisfactory way and presents results similar to the ones obtained by other authors using the models available in the literature.

Keywords: atmospheric dispersion, Semi-Lagrangian method, numerical solution, advection-diffusion equation, atmospheric boundary layer.

1 Introdução

A modelagem numérica é uma importante atividade para investigar o processo de dispersão de poluentes na atmosfera, pois permite prever em diferentes cenários os possíveis impactos ambientais em eventos de poluição.

Do ponto de vista do referencial de observação, os modelos de simulação computacional da dispersão podem ser classificados como Eulerianos e Lagrangeanos. A diferença básica entre eles é que o referencial Lagrangeano segue o movimento das porções de fluido, enquanto que o referencial Euleriano encontra-se fixo em relação à Terra.

Embora possuam características distintas e complementares, os modelos Eulerianos e Lagrangeanos podem ser combinados para evitar as desvantagens de cada método. O método que combina as duas abordagens é denominado Semi-Lagrangeano ou Euleriano-Lagrangeano. Este método divide o problema do transporte em dois passos. No primeiro passo, utiliza-se uma aproximação Lagrangeana para a solução da parte advectiva da equação de transporte. No segundo passo, os demais termos da equação são resolvidos pelo método Euleriano (1). Neste caso, consideram-se diferentes conjuntos de partículas em cada passo de tempo e determina-se a concentração da substância na posição de partida da partícula que chega, exatamente, em um ponto de grade no instante de tempo posterior.

É importante salientar que o passo de tempo que pode ser utilizado no método Semi-Lagrangeano não é limitado pelo critério do número de Courant, o que permite manter a estabilidade na integração, para passos de tempo maiores do que os permitidos em modelos Eulerianos. Assim, o método Semi-Lagrangeano, possibilita elevada estabilidade numérica, característica dos modelos Lagrangeanos e, regularidade espacial da grade, característica dos modelos Eulerianos.

Neste contexto, no presente trabalho, é realizada a avaliação de um modelo numérico Semi-Lagrangeano bidimensional para investigar a dispersão de poluentes em todas as condições de estabilidade na Camada Limite Atmosférica (CLA). A referida avaliação foi realizada através da comparação de valores de concentração previstos e observados no experimento de Prairie Grass.

2 O Modelo Semi-Lagrangeano

2.1 Equacionamento

O modelo bidimensional transiente de dispersão de poluentes na Camada Limite Atmosférica (CLA), utilizando a teoria de transporte por gradiente (ou teoria K), desconsiderando a difusão longitudinal, alinhando o eixo x com a direção do vento médio e o eixo z com a direção

vertical, é dado pela equação:

$$\frac{DC}{Dt}(x,z,t) = K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}(x,z,t) + \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z}(x,z,t), \quad (1)$$

sujeita às seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\begin{aligned} C(x,z,0) &= 0, \\ C(0,z,t) &= \frac{Q\delta(z - H_s)}{U}, \\ K_z \frac{\partial C}{\partial z}(x,z,t) &= 0, \text{ em } z = z_0 \text{ e } z = z_i, \end{aligned}$$

onde $\frac{D}{Dt}$ denota a derivada material, C representa a concentração média integrada lateralmente, em gm^{-2} , U representa a componente longitudinal da velocidade média do vento, em ms^{-1} , K_z representa o coeficiente de difusão turbulenta vertical, Q a intensidade da fonte de emissão, em gs^{-1} , H_s representa a altura da fonte de emissão, em m , z_i representa a altura da CLA, em m , e δ representa a função Delta de Dirac.

Neste estudo foram utilizadas as formulações para o coeficiente de difusão, que descrevem a estrutura turbulenta da CLA, propostas por Degrazia *et al.* (2) e Ulke (3). As formulações para o coeficiente de difusão propostas por Degrazia *et al.* (2) e desenvolvidas a partir da teoria estatística de Taylor e de suas propriedades espectrais, para condições atmosféricas instáveis ($L < 0$) e neutra ou estável ($L \geq 0$), são dadas, respectivamente, por

$$K_z(z) = 0,22w_*z_i \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - \exp\left(-\frac{4z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{z_i}\right)\right]^{\frac{4}{3}}, \quad (2)$$

$$K_z(z) = \frac{0,4 \left(1 + 3,7\frac{z}{\Lambda}\right)^{\frac{1}{3}} u_*z}{\left[1 + 15\frac{fcz}{(u_*)_0} + 3,7\frac{z}{\Lambda}\right]^{\frac{4}{3}}}, \quad (3)$$

sendo a velocidade convectiva vertical w_* , em ms^{-1} , e o comprimento de Monin-Obukhov local Λ , em m , dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} w_* &= (u_*)_0 \left(-\frac{z_i}{kL}\right)^{\frac{1}{3}}, \\ \Lambda &= L \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{1,5\alpha_1 - \alpha_2}, \end{aligned}$$

onde u_* representa a velocidade de atrito, em ms^{-1} , $(u_*)_0$ representa a velocidade de atrito superficial, em

ms^{-1} , $f_c = 10^{-4}\text{s}$ representa a força de Coriolis, $k = 0,4$ representa a constante de von Kármán e L o comprimento de Monin Obukhov. Para a CLA estável, assume-se, respectivamente, os valores 1,5 e 1 para os parâmetros α_1 e α_2 .

As formulações para o coeficiente de difusão turbulenta vertical propostas por Ulke (3) para condições atmosféricas instáveis, neutras e estáveis são dadas, respectivamente, por

$$K_z(z) = k(u_*)_0 z_i \left(1 - \frac{z}{z_i}\right) \left(1 - 22 \frac{z_i}{L} \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad (4)$$

$$K_z(z) = k(u_*)_0 z_i \left(1 - \frac{z}{z_i}\right), \quad (5)$$

$$K_z(z) = k(u_*)_0 z_i \left(1 - \frac{z}{z_i}\right) \left(1 - 6,9 \frac{z_i}{L} \frac{z}{z_i}\right)^{-1}. \quad (6)$$

O perfil para a velocidade média do vento foi parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov, e é dado por (Arya (4)):

$$U = \begin{cases} \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right], & \text{se } z \leq z_b, \\ U(z_b), & \text{se } z > z_b, \end{cases} \quad (7)$$

onde $z_b = \min[|L|, 0,1z_i]$, z_0 o comprimento de rugosidade e Ψ_m representa uma função de estabilidade dada por:

$$\Psi_m = 2 \ln \left(\frac{1+A}{2} \right) + \ln \left(\frac{1+A^2}{2} \right) - 2 \arctan(A) + \frac{\pi}{2},$$

para $\frac{z}{L} < 0$, e

$$\Psi_m = -\frac{5z}{L},$$

para $\frac{z}{L} \geq 0$, sendo A definido por:

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

2.2 Solução Numérica

Para resolver a parte advectiva da equação (1), foi empregado o esquema Semi-Lagrangeano de três níveis de tempo proposto por Robert (5), o qual consiste em aproximar a derivada total utilizando uma aproximação de diferença finita central do tipo:

$$\frac{DC}{Dt}(x,z,t) \approx \frac{C(x,z,t + \Delta t) - C(x - 2a,z - 2b,t - \Delta t)}{2\Delta t},$$

onde a e b representam os deslocamentos da partícula nas direções x e z , respectivamente, $(x - 2a, z - 2b)$ representa o ponto de partida da trajetória originada no

instante $t - \Delta t$ da partícula que chega no ponto de grade (x,z) no instante $t + \Delta t$.

A posição de partida é calculada com base em uma trajetória linear da partícula para trás, partindo do ponto de grade (x,z) em $t + \Delta t$ até o ponto $(x - 2a, z - 2b)$ em $t - \Delta t$, utilizando uma velocidade média constante, calculada para o instante de tempo t . Como a posição de partida normalmente não coincide com um ponto de grade, utiliza-se uma fórmula de interpolação para determinar os valores de $C(x - 2a, z - 2b, t - \Delta t)$. Neste trabalho foi utilizada a fórmula de interpolação cúbica de Lagrange nas duas direções x e z .

A determinação dos deslocamentos a e b pode ser realizada a partir do processo iterativo gerado pelas equações:

$$a^{n+1} = \Delta t \cdot U(x - a^n, z - b^n, t), \quad (8)$$

$$b^{n+1} = \Delta t \cdot W(x - a^n, z - b^n, t), \quad (9)$$

onde o expoente n representa a n -ésima iteração e W representa a componente vertical da velocidade média do vento, em ms^{-1} .

Pudykiewics *et al.* (6) mostraram que a condição suficiente para a convergência do processo iterativo resultante da aplicação das equações (8) e (9) é dada por:

$$\Delta t < \left[\max \left(\left| \frac{\partial U}{\partial x} \right|, \left| \frac{\partial U}{\partial z} \right|, \left| \frac{\partial W}{\partial x} \right|, \left| \frac{\partial W}{\partial z} \right| \right) \right]^{-1}. \quad (10)$$

A estrutura do modelo, na direção horizontal, é distribuída em pontos de grade uniforme. Dessa forma, faz-se necessário informar o comprimento do domínio x_L e o espaçamento de grade horizontal Δx . Enquanto que, na direção vertical é definida por uma grade com espaçamento variável. Neste caso, é arbitrado um valor para a altura do primeiro nível a partir da superfície (v), e o espaçamento de grade no último nível do modelo (l). Entre os demais níveis, os espaçamentos de grade são definidos como uma função logarítmica da altura e são dados pelas equações:

$$a = v - b \log(v),$$

$$b = \frac{v - l}{\log(v/z_i)},$$

$$\Delta z(k) = a + b \log(z(k)),$$

Este procedimento gera uma grade mais refinada nos níveis inferiores da CLA, ou seja, nas proximidades da superfície, onde ocorrem os maiores gradientes verticais das variáveis.

Para manter a estabilidade numérica no processo de integração, em relação ao termo de difusão turbulenta, o primeiro termo do lado direito da equação (1) é discretizado utilizando-se o esquema trapezoidal implícito. Assim, a aproximação Semi-Lagrangeano, para a equação (1) é dada por

$$\frac{C^+ - C^-}{2\Delta t} = \frac{1}{2} \left[\left(K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)^+ + \left(K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)^- \right] + \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} \right)^0, \quad (11)$$

onde os sobrescritos “+”, “0” e “-” denotam, respectivamente, a avaliação da variável ou de suas derivadas, no ponto de chegada ($x, z, t + \Delta t$), no ponto médio da trajetória ($x - a, z - b, t$) e no ponto de partida ($x - 2a, z - 2b, t - \Delta t$).

A equação (11) é resolvida por colunas (direção z), começando na coluna imediatamente após a da fonte. Para resolver os sistemas lineares foi aplicado o método TDMA, ou *algoritmo de Thomas* (7).

O código do modelo Semi-Lagrangiano proposto, foi desenvolvido em linguagem de programação FORTRAN, e as simulações numéricas foram conduzidas utilizando-se um computador com processador Intel Core i5, com 2,67GHz, memória RAM de 4GB e sistema operacional de 64 bits.

3 Resultados e Discussões

Nesta seção apresentam-se as simulações numéricas realizadas com o modelo Semi-Lagrangiano e comparações com dados de concentração observados durante o experimento de Prairie Grass. O experimento Prairie Grass, descrito por Barad (8), foi realizado em O’Neill, Nebraska, no ano de 1956, sob condições atmosféricas estáveis e instáveis. Trata-se de um experimento de fonte baixa. O traçador SO_2 (dióxido de enxofre) foi lançado a partir de uma altura de 0,46 m e coletado ao nível de 1,5 m do solo. As concentrações foram medidas por unidades de amostragem localizadas em arcos concêntricos posicionados a distâncias de 50 m, 100 m, 200 m, 400 m e 800 m. O terreno de Prairie Grass é plano com comprimento de rugosidade de 0,006 m.

Para as simulações do experimento Prairie Grass com o modelo Semi-Lagrangiano, W foi considerado zero. O domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores (800 m) e o domínio vertical foi fixado igual a altura da CLA, z_i . O passo no tempo foi mantido constante e obtido de modo que a condição estabelecida pela equação (10) fosse satisfeita. A estrutura horizontal da grade foi definida por $\Delta x = 10$ m e a estrutura vertical por $v = 0,5$ m e $l = 20$ m.

Os experimentos 4, 5, 13 e 14 foram excluídos da avaliação, por apresentarem condições de estabilidade extrema com valores da velocidade de atrito u_* muito pequenos.

Foram conduzidas simulações utilizando-se as formulações para a difusividade turbulenta vertical propostas por Degrazia *et al.* (2) e Ulke (3), para as condições

atmosféricas de instabilidade e estabilidade, descritas na Seção 2.

Os resultados das simulações com o modelo Semi-Lagrangiano são apresentados na Tabela 1 e na Figura 1. A Tabela 1 apresenta os resultados da análise estatística realizada confrontando a concentração integrada normalizada pela taxa de emissão observada e prevista pelo modelo, para cada formulação de K_z . Os índices estatísticos utilizados são os seguintes (Hanna (9)):

$$\begin{aligned} Nmse &= \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}, \\ F_b &= \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}, \\ F_s &= \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)}, \\ FA2 &= 0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2, \\ Cor &= \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p}, \end{aligned}$$

onde C é a quantidade analisada (concentração média integrada normalizada pela taxa de emissão) e o subscritos “o” e “p” representam os valores observados e previstos, respectivamente. O índice estatístico Nmse (Erro Quadrático Médio Normalizado) fornece a informação dos desvios entre concentrações previstas e observadas. O índice estatístico F_b (Desvio Fracional) indica a tendência do modelo de subestimar ou superestimar as concentrações observadas. O índice estatístico F_s (Desvio Padrão Fracional) indica o quanto o modelo consegue simular a dispersão dos dados observados. O índice estatístico FA2 (Fator de 2) fornece a fração dos dados para os quais $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$. O índice estatístico Cor (Coeficiente de Correlação) representa o grau de concordância entre as variáveis comparadas. Quanto mais próximos de zero estiverem os valores de NMSE, FB e FS e quanto mais próximos de 1 estiverem os valores de Cor e FA2, melhores são os resultados.

A Figura 1 ilustra os diagramas de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass (C_o) pelos resultados das concentrações simuladas (C_p), comparando as diferenças entre as previsões para as diferentes formulações de K_z . A reta bissetriz (linha contínua) indica os valores de C_o e C_p iguais. Portanto, quanto mais próximos os pontos estiverem dessa reta, melhores os resultados. As linhas tracejadas indicam o Fator de 2. Valores dentro dessa faixa são considerados aceitáveis.

Analisando a Tabela 1 e a Figura 1, verifica-se que o modelo Semi-Lagrangiano apresentou resultados muito bons. Observa-se que as simulações utilizando-se a implementação da formulação de K_z proposta por Degrazia

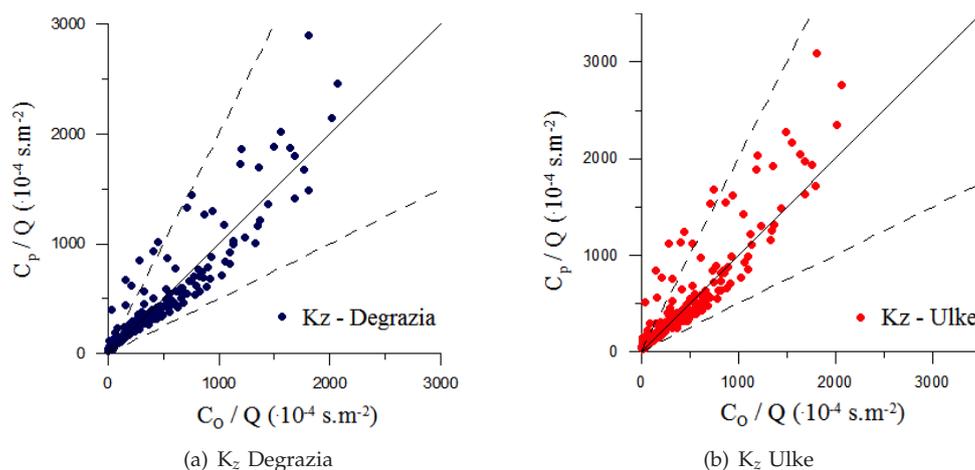


Figura 1: Diagrama de dispersão das concentrações observadas no experimento de Prairie Grass (C_o) e previstas pelo modelo Semi-Lagrangiano (C_p) ao nível da superfície, utilizando as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia *et al.* (a) e Ulke (b).

Tabela 1: Índices estatísticos calculados para todos os dados dos experimentos de Prairie Grass simulados pelo modelo Semi-Lagrangiano utilizando as formulações dos coeficientes de difusão turbulentos propostas por Degrazia *et al.* e Ulke.

Modelo	F_b	Nmse	F_s	Cor	FA2
S-L (K_z Degrazia)	-0,03	0,18	-0,07	0,93	0,86
S-L (K_z Ulke)	-0,12	0,31	-0,20	0,91	0,84

et al. apresentaram resultados melhores do que para a formulação proposta por Ulke. A medida do erro quadrático médio normalizado (Nmse) indica que para a formulação de K_z proposta por Ulke o modelo erra mais as concentrações simuladas do que para a formulação de Degrazia *et al.* Observa-se nos resultados obtidos, que o modelo tende a superestimar o campo de concentrações observado ($F_b < 0$), apresentado o coeficiente de correlação elevado (91%). Todos os índices estatísticos estão dentro dos limites estabelecidos por Chang e Hanna (10).

Como descrito anteriormente, o experimento de Prairie Grass foi realizado em condições atmosféricas instáveis e estáveis. Assim, a seguir é apresentada uma análise dos resultados das simulações para cada condição de estabilidade, separadamente.

A Tabela 2 apresenta a comparação dos índices estatísticos calculados para valores de concentração observados nos experimentos instáveis de Prairie Grass e previstos pelo modelo Semi-Lagrangiano, para cada parametrização de K_z e pelos modelos ILS (11), Euleriano Analítico (12), Modelar (13) e GILTT (14).

Analisando a Tabela 2, nota-se que os resultados ob-

Tabela 2: Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos instáveis de Prairie Grass previstos pelo modelo Semi-Lagrangiano e obtidos por outros modelos presentes na literatura.

Modelo	F_b	Nmse	F_s	Cor	FA2
S-L (K_z Degrazia)	0,03	0,14	0,31	0,96	0,77
S-L (K_z Ulke)	0,02	0,16	0,28	0,94	0,77
ILS (Lagrangiano)	0,05	0,10	-0,06	0,96	0,72
Euleriano	-0,21	0,09	0,14	0,98	0,61
Modelar	0,10	0,15	-	-	0,92
GILTT	-0,10	0,11	0,23	0,97	0,71

tidos para as duas formulações de K_z , em condições de instabilidade atmosférica, são bastante semelhantes. Para estes experimentos o modelo Semi-Lagrangiano tende a subestimar levemente as medidas de concentração, apresenta um coeficiente de correlação alto (94%) e todos os índices estatísticos estão dentro dos limites aceitáveis.

A Tabela 3 apresenta a comparação dos índices estatísticos calculados para valores de concentração observados nos experimentos estáveis de Prairie Grass e previstos pelo modelo Semi-Lagrangiano, para cada parametrização de K_z , e pelos modelos ILS (11), Euleriano (15) e Modelar (13).

Analisando a Tabela 3, observa-se que os resultados obtidos para as duas formulações de K_z , em condições de estabilidade atmosférica, são satisfatórios. Todos os índices estatísticos estão dentro dos limites estabelecidos por Chang e Hanna (10). Além disso, observa-se que para os experimentos de Prairie Grass estáveis o

Tabela 3: Comparação dos índices estatísticos calculados para os dados dos experimentos estáveis de Prairie Grass previstos pelo modelo Semi-Lagrangeano e obtidos por outros modelos presentes na literatura.

Modelo	F_b	Nmse	F_s	Cor	FA2
S-L (K_z Degrazia)	-0,05	0,14	-0,11	0,91	0,95
S-L (K_z Ulke)	-0,17	0,26	-0,23	0,90	0,92
ILS (Lagrangeano)	-0,05	0,39	-0,18	0,81	0,95
Euleriano	-0,22	0,49	-0,29	0,77	0,82
Modelar	0,03	0,30	-	-	0,80

modelo Semi-Lagrangeano tende a superestimar as medidas de concentração, mantendo um alto coeficiente de correlação (90%).

Nota-se ainda, pelas Tabelas 2 e 3, que o comportamento do modelo Semi-Lagrangeano é bastante parecido com o comportamento dos modelos utilizados para comparação, para as duas condições de estabilidade atmosférica do experimento Prairie Grass. Alguns dos índices estatísticos calculados para a amostra de dados obtidas pelo Semi-Lagrangeano são melhores do que os obtidos para os outros modelos.

As Figuras 2 e 3 apresentam a distribuição das concentrações integradas e normalizadas obtidas utilizando-se a formulação para K_z proposta por Degrazia *et al.* (2), para o experimento 1 (atmosfera instável) e 17 (atmosfera estável) de Prairie Grass, respectivamente. A evolução temporal do perfil de concentração superficial, para os mesmos experimentos, são apresentadas nas Figuras 4 e 5.

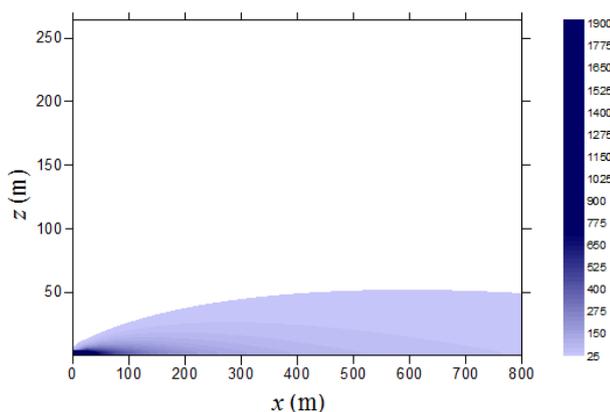


Figura 2: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $s.m^{-2} (.10^{-4})$, para o experimento 1 de Prairie Grass.

Observa-se um pico de concentração acentuado na superfície, na área próxima à fonte, para ambos os experimentos, o que já era esperado visto que o experi-

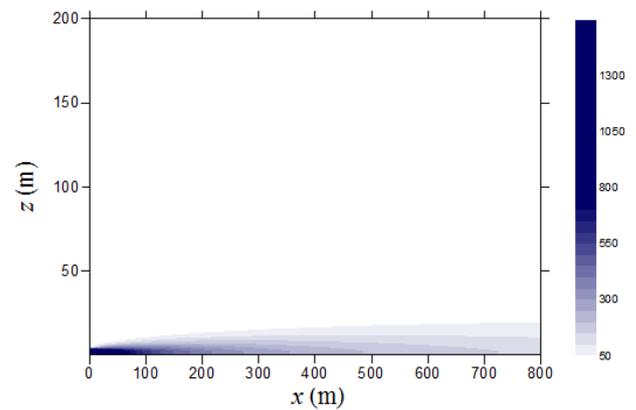


Figura 3: Seção reta vertical da distribuição das concentrações integradas e normalizadas pela taxa de emissão, em $s.m^{-2} (.10^{-4})$, para o experimento 17 de Prairie Grass.

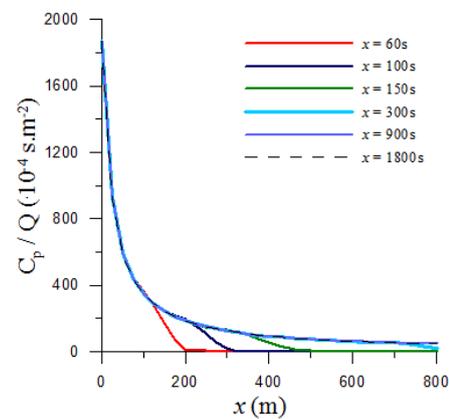


Figura 4: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 1 de Prairie Grass.

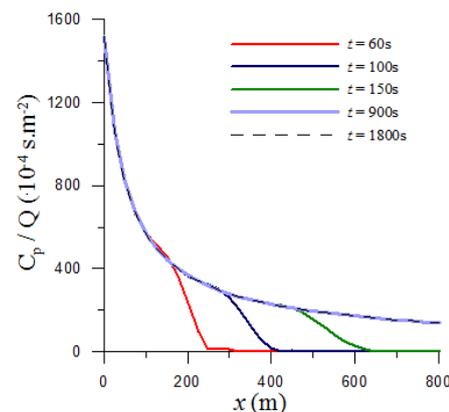


Figura 5: Evolução temporal da concentração ao nível da superfície em função da distância da fonte, para o experimento 17 de Prairie Grass.

mento de Prairie Grass é um experimento de fonte baixa. Nota-se um comportamento típico de uma pluma de

poluentes nas condições atmosféricas descritas, concordando com os experimentos de laboratório de Willis e Deardorff (16; 17).

Além disso, analisando as Figuras 4 e 5 verifica-se a clara evolução para o regime estacionário, o que era esperado, pois devido à natureza parabólica da equação da advecção-difusão, com as condições de contorno no domínio constantes no decorrer do tempo, a solução da equação deve evoluir para o regime estacionário.

As Figuras 6 e 7 apresentam os diagramas residuais que relacionam a taxa de concentração simulada pela concentração observada e os valores do comprimento de Monin-Obukhov para cada experimento, em condições de instabilidade e estabilidade atmosférica, respectivamente.

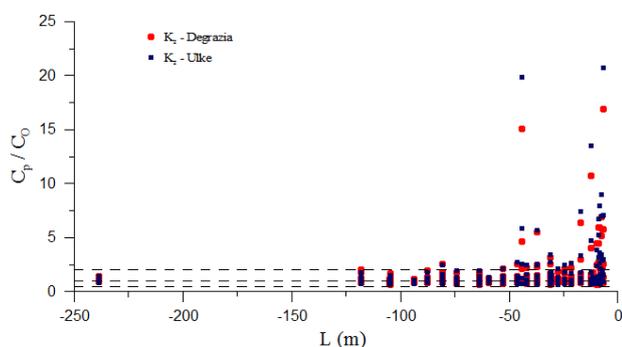


Figura 6: Diagrama residual para atmosfera instável e comprimento de Monin-Obukhov.

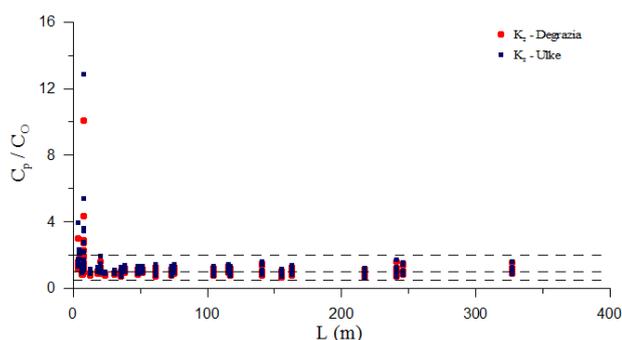


Figura 7: Diagrama residual para atmosfera estável e comprimento de Monin-Obukhov.

Analisando as figuras anteriores, nota-se que o modelo Semi-Lagrangiano tende a superestimar os valores de concentração para pequenos comprimentos de Monin-Obukhov, ou seja, para condições atmosféricas muito instáveis e para muito estáveis.

Isto, provavelmente, se deve ao fato de que as formulações de K_z baseiam-se na Teoria de Monin-Obukhov, à qual não se aplica aos casos extremos de estabilidade ou instabilidade atmosférica.

4 Conclusões

Neste trabalho foi avaliado um modelo numérico bidimensional transiente para simular a dispersão de poluentes emitidos por uma fonte contínua na CLA, sobre terreno plano.

Simulações foram conduzidas utilizando-se as duas parametrizações para a difusividade turbulenta vertical. Os valores de concentração preditos pelo modelo foram comparados com os dados coletados durante o experimento de Prairie Grass. Os resultados mostraram que não houve diferenças significativas entre as soluções obtidas com as diferentes parametrizações, embora as formulações propostas por Degrazia *et al.* (2) tenham apresentado resultados melhores para a maioria dos experimentos e condições de estabilidade.

Vale ressaltar que a maioria dos modelos de solução analítica produz resultados apenas para a concentração ao nível superficial, que são usualmente utilizados em aplicações regulatórias de qualidade do ar. Por outro lado, o modelo aqui apresentado permite a representação completa da distribuição da substância contaminante no domínio computacional, possibilitando uma análise mais completa do comportamento da pluma, que pode ser útil tanto para avaliações operacionais quanto para o aumento do conhecimento sobre problemas de dispersão atmosférica.

Com a finalidade de verificar se o modelo fornece resultados satisfatórios, foi feita uma comparação dos valores preditos pelo modelo Semi-Lagrangiano, para as simulações do experimento de Prairie Grass, com as soluções obtidas por outros autores para o mesmo experimento. A análise estatística mostrou que os dados do modelo Semi-Lagrangiano concordam muito bem com os dados observados e com os resultados dos outros modelos. Todos os valores dos índices estatísticos estão dentro de intervalos característicos e estabelecidos por Chang e Hanna (10) como aceitáveis.

Levando em conta as simulações numéricas e as comparações apresentadas, acreditamos que o método Semi-Lagrangiano é um método promissor para a solução da equação de advecção-difusão para a dispersão de poluentes na CLA.

Referências

- [1] Casulli, V., Cheng, R. T. Stability analysis of Eulerian-Lagrangian methods for the one-dimensional shallow-water equations. *Applied Mathematical Modelling*, v. 14, pp. 122 – 131, 1990.
- [2] Degrazia, G. A., Rizza, U., Mangia, C., Tirabassi, T. Validation of a new turbulent parameterization for dispersion models in convective condi-

- tions. *Boundary-Layer Meteorology*, vol. 85, pp. 243 – 254, 1997.
- [3] Ulke, A. G., New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer. *Atmospheric Environment*, vol. 34, pp. 1029 – 1042, 2000.
- [4] Arya, S. P. *Air Pollution Meteorology and Dispersion*. Oxford University Press, Inc., 310 p., 1999.
- [5] Robert, A. A stable numerical integration scheme for the primitive meteorological equations. *Atmosphere-Ocean*, vol. 19, pp. 35 – 46, 1981.
- [6] Pudykiewics, J., Benoit, R., Staniforth, A. Preliminary results from a partial LRTAP model based on an existing meteorological forecast model. *Atmos. Ocean*, vol. 23, pp. 267 – 303, 1985.
- [7] Fortuna, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. 2ed. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2012.
- [8] Barad, M. L. E. Projeto Prairie-Grass: A field program in Diffusion. *Geophysical Research Paper*. Air Force Cambridge Research Centre, USA, n^o 59, vol I e II, 1958.
- [9] Hanna, S. R. Paine, R. J. Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) Development and Evaluation. *Journal Applied Meteorology and Climatology*, vol. 28, pp. 206 – 224, 1989.
- [10] Chang, J. C., Hanna, S. R. Air quality model performance evaluation. *Meteorological and Atmospheric Physics*. v. 87, pp. 167 – 196, 2004.
- [11] Carvalho, J. C., Vilhena, M. T., Thompson, M. An iterative langevin solution for turbulent dispersion in the atmosphere. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 206, pp. 534 – 548, 2007.
- [12] Moreira, D. M., Degrazia, G. A., Vilhena, M. T. M. B. Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model. II *Nuovo Cimento*, vol. 22C, pp. 685 – 691, 1999.
- [13] Armani, F. A. S., Almeida, R. C. de, Dias, N. L. da C. Statistical evaluation of a new air dispersion model against AERMOD using the Praire Grass data set. *Journal of the Air e Waste Management Association*, vol. 64, pp. 219 – 226, 2014.
- [14] Gonçalves, G. A., Quadros, R. S., Buske, D. An Analytical Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer. *Journal of Environmental Protection*, vol. 4, pp. 57 – 64, 2013.
- [15] Moreira, D. M., Carvalho, J. C., Goulart, A. A comparison of two turbulent dispersion parameterisation in the stable boundary layer by using Lagrangian and Eulerian model. *Revista Brasileira de Geofísica*, vol. 20, pp. 103 – 112, 2002.
- [16] Willis, G. E., Deardorff, J. W. A Laboratory study of dispersion from an elevated source within a modeled convective planetary boundary layer. *Atmospheric Environment*, vol. 12, pp. 1305 – 1311, 1978.
- [17] Willis, G. E., Deardorff, J. W. A Laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer. *Atmospheric Environment*, vol. 15, pp. 109 – 117, 1981.