# Comparação entre coeficientes de difusão derivados do espectro de energia turbulenta e coeficientes de difusão que dependem da razão entre os fluxos de entranhamento e os de superfície

*Gervásio A. Degrazia, Davidson M. Moreira,André.B. Nunes, Cláudia R. J. de Campos, Alnei R. Prochnow, Fabiane A. Fonseca*

**RESUMO**

Uma grande parte das pesquisas em dispersão turbulenta de contaminantes na Camada Limite Planetária (CLP) é relacionada com a especificação dos fluxos turbulentos de concentração. A aproximação para estes termos desconhecidos permite resolver a equação de difusão-advecção. O processo de especificação da parametrização dos fluxos turbulentos de concentração é conhecido como o problema de fechamento do transporte turbulento. O esquema matemático mais comum que conduz à uma solução da equação de difusão-advecção emprega coeficientes de difusão que relacionam os fluxos turbulentos de concentração ao gradiente da concentração média. Neste estudo, empregando-se um modelo Euleriano de dispersão e dados de concentração, coeficientes de difusão derivados do espectro de energia turbulenta e aqueles que dependem da razão entre o fluxo de entranhamento e o de superfície, serão usados na simulação do campo de concentração superficial.

**ABSTRACT**

A most of contaminants turbulent dispersion in Planetary Boundary Layer (CLP) research is related with the concentration turbulent fluxes specification. An approach for these unknown terms allow to solve the diffusion-advection equation. The specification process of concentration turbulent fluxes parameterization is called as closure problem of turbulent transport. The simplest mathematics scheme which lead to a diffusion-advection equation solution employ eddy diffusivities that relates the concentration turbulent fluxes to mean concentration gradient. In this work, employing a Eulerian dispersion model and concentration data, eddy diffusivities, derived of turbulent energy spectrum and that which depends of ratio between entrainment and surface fluxes, will be used in superficial concentration field simulation.

## 1. INTRODUÇÃO

Seguindo o método proposto por Reynolds em 1895, os fluxos turbulentos de momentum, calor, vapor d'água e contaminantes surgem nas equações que descrevem os movimentos, o transporte de calor e concentrações na atmosfera quando as quantidades são separadas em uma parte média e uma turbulenta. A maior parte das pesquisas em turbulência, desde Reynolds, estão voltadas à especificação destes fluxos turbulentos de modo a permitir a solução das equações para os valores médios. O principal esquema para realizar o fechamento das equações relaciona os fluxos turbulentos aos gradientes destas quantidades médias. Isto é feito pelo emprego de coeficientes de difusão turbulentos (k). Na Camada Limite Convectiva (CLC), o transporte não-local de contaminantes é também representado por $k_c$ e por termos contrários ao gradiente expressos na seguinte forma:

$$\overline{w'c'} = -k_c\left(\frac{\partial \overline{c}}{\partial z} - \gamma_c\right) \qquad (1)$$

Onde $\overline{w'c'}$ é o fluxo turbulento de concentração, $\overline{c}$ é a concentração média e $\gamma_c$ representa o termo de correção não local contrário ao gradiente. Recentemente, Holtslag e Moeng

(1991) (H-M) usando a formulação (1) e empregando a técnica de simulação direta dos grandes turbilhões, derivaram uma expressão geral para o parâmetro $k_c$ , que leva em conta a razão entre os fluxos de entranhamento e os de superfície. Diferentemente, Degrazia et al. (1996,1997) usando a teoria de difusão estatística de Taylor e a teoria da similaridade aplicada à CLC, derivaram expressões para o coeficiente de difusão turbulento em termos das características físicas dos turbilhões mais energéticos.

Neste trabalho, empregando-se um modelo Euleriano de dispersão e dados de concentração, os coeficientes de difusão derivados por (H-M) e Degrazia et al. (1996, 1997) serão usados na simulação do campo de concentração superficial. A novidade deste estudo consiste na comparação entre estas duas diferentes formulações para o cálculo de k.

## 2. AS FORMULAÇÕES PARA k

### 2.1 A formulação de H-M

O coeficiente de difusão vertical $k_c$ para qualquer escalar derivado por H-M é dado pela seguinte equação:

$$k_c = \frac{\left[1 - \frac{z}{z_i} + R_c \frac{z}{z_i}\right] k_b k_t}{\left(1 - \frac{z}{z_i}\right) k_t + R_c \left(\frac{z}{z_i}\right) k_b} \qquad (2)$$

Onde os perfis parametrizados de $k_b$ e $k_t$ podem ser expressos como

$$\frac{k_b}{w_* z_i} = \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{4}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^2 \qquad (3)$$

$$\frac{k_t}{w_* z_i} = 7 \left(\frac{z}{z_i}\right)^2 \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^3 \qquad (4)$$

$$R_c = \overline{w'c'_1} \,/\, \overline{w'c'_0}$$

e $R_c$ é a razão entre os fluxos de entranhamento e de superfície para uma espécie escalar, onde $R_c=0$ significa que existe apenas o fluxo de superfície; $R_c$ = 0,5 , 1,0 , e 1,5 são valores típicos para situações envolvendo a presença de fluxos de entranhamento. Além disso, $R_c = \infty$ significa a existência exclusiva de fluxo de entranhamento.

## 2.2 A formulação de Degrazia *et al* (1996,1997)

Os coeficientes de difusão vertical para a CLC propostos por Degrazia et al. (1996,1997) são construídos a partir da Teoria da Difusão Estatística de Taylor e pelo emprego do Espectro de Energia Cinética Turbulenta. Estas fórmulas para $k_z$ são apresentadas abaixo

$$\frac{k_z}{w_* z_i} = 0{,}15\Psi^{\frac{1}{3}}\left[1-\exp\left(-4\frac{z}{z_i}\right)-0{,}0003\exp\left(8\frac{z}{z_i}\right)\right]^{\frac{4}{3}} \quad (5)$$

$$\frac{k_z}{w_* z_i} = 0{,}22\left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}}\left(1-\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}}\left[1-\exp\left(-4\frac{z}{z_i}\right)-0{,}0003\exp\left(8\frac{z}{z_i}\right)\right] \quad (6)$$

onde $w_*$ é a escala de velocidade convectiva, $Z_i$ é a altura da CLC, Z é a altura acima do solo e $\psi$ é a função taxa de dissipação molecular adimensional da energia cinética turbulenta. A função $\psi$ na eq. (5) é calculada de duas maneiras diferentes: (1) seguindo a aproximação sugerida por Hozstrup (1982)

$$\Psi^{\frac{1}{3}} = \left[\left(1-\frac{z}{z_i}\right)^2\left(-\frac{z_i}{L}\frac{z}{z_i}\right)^{-\frac{2}{3}}+0{,}75\right]^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov; (2) considerando-se o valor constante de $\psi^{1/3} = 0{,}97$.

## 3. O MODELO EULERIANO DE DISPERSÃO

O estudo do transporte e dispersão de poluentes na atmosfera é muitas vezes descrito pela equação da difusão-advecção, que é obtida pela parametrização dos fluxos turbulentos na equação da continuidade pelo emprego do modelo de transporte por gradiente ou teoria *K*. Segundo Vilhena et al. (1998), para um sistema de coordenadas cartesiano em que a direção *x* coincide com a direção do vento médio, a equação da difusão-advecção no estado estacionário é escrita como (Arya, 1995):

$$U\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\right) \qquad (8)$$

onde $\bar{c}$ representa a concentração média, $\overline{u_x} = U$ o vento médio na direção *x* e *Kx* , *Ky* e *Kz* são os coeficientes de difusão turbulenta. Integrando-se lateralmente a equação (2) e desprezando-se a difusão longitudinal resulta:

$$U\frac{\partial \overline{c^y}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial z}\right) \qquad (9)$$

sujeita as condições limites de fluxo zero no solo e no topo da CLP, e uma fonte com taxa de emissão *Q* na altura $H_s$ :

$$K_z \frac{\partial \overline{c^y}}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0,\, z_i \qquad (10)$$

$$U\overline{c^y}(0,z) = Q\delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \qquad (11)$$

onde agora $\overline{c^y}$ representa a concentração média integrada lateralmente.

Levando em consideração a dependência do coeficiente $K_z$ e do perfil da velocidade do vento *U* com a altura *z*, a altura da camada é discretizada em *N* subintervalos, de modo que no interior de cada intervalo *Kz(z)* e *U(z)* assumem o valor médio:

$$K_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(z) dz \qquad (12)$$

$$U_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} U(z) dz \qquad (13)$$

Portanto a solução do problema (9) é reduzido a solução de *N* problemas do tipo:

$$U_n \frac{\partial \overline{c_n^y}}{\partial x} = K_{i,n} \frac{\partial^2 \overline{c_n^y}}{\partial z^2} \qquad z_n \le z \le z_{n+1},\ x_i \le x \le x_{i+1} \qquad (14)$$

para *n* = 1: *N*, onde $\overline{c_n^y}$ representa a concentração no enésimo sub-intervalo. Para determinar as *2N* constantes de integração, as condições adicionais (*2N-2*), chamada de continuidade da concentração e fluxo na interface são consideradas:

$$\overline{c_n^y} = \overline{c_{n+1}^y} \qquad n = 1, 2, \ldots (N-1) \qquad (15)$$

$$K_n \frac{\partial \overline{c_n^y}}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial \overline{c_{n+1}^y}}{\partial z} \qquad n = 1, 2, \ldots (N-1) \qquad (16)$$

Aplicando a transformada de Laplace na equação (14) resulta:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \overline{c_n^y}(s,z) - \frac{U_n s}{K_n} \overline{c_n^y}(s,z) = -\frac{U_n}{K_n} \overline{c_n^y}(0,z) \qquad (17)$$

onde $\overline{c_n^y}(s,z) = L_p\left\{\overline{c_n^y}(x,z); x \rightarrow s\right\}$, que tem a conhecida solução:

$$\overline{c_n^y}(s,z) = A_n e^{-R_n z} + B_n e^{R_n z} + \frac{Q}{2R_a}\left(e^{-R_n(z-H_s)} - e^{R_n(z-H_s)}\right) \qquad (18)$$

onde

$$R_n = \pm\sqrt{\frac{U_n s}{K_n}} \quad \text{e} \quad R_a = \pm\sqrt{U_n K_n s}$$

Finalmente, aplicando as condições de contorno e interface chega-se a um sistema linear para as constantes de integração. Desta forma, a concentração é obtida invertendo-se numericamente a concentração transformada $\overline{c^y}$ pelo esquema de quadratura Gaussiana (Heydarian and Mullineaux, 1989):

$$\overline{c_n^y}(x,z) = \sum_{j=1}^{8} A_j \frac{P_j}{x}\left( A_n e^{-\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right)z} + B_n e^{\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right)z} \right) \qquad (19)$$

$$\overline{c_n^y}(x,z) = \sum_{j=1}^{8} A_j \frac{P_j}{x}\left[ A_n e^{-\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right)z} + B_n e^{\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right)z} + \right.$$

$$\left. \frac{1}{2}\frac{Q}{\sqrt{\frac{P_j K_n U_n}{x}}}\left( e^{-(z-H_s)\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right)} - e^{(z-H_s)\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right)} \right) \right] \qquad (20)$$

A solução (19) é válida para camadas que não contém a fonte de contaminantes. Por outro lado, a solução (20) pode ser usada para estimar o campo de concentração na camada que contém a fonte de contaminantes. Estas soluções são válidas somente para $x > 0$, uma vez que o esquema de quadratura da inversão de Laplace não funciona para $x = 0$. $A_j$ e $P_j$ são os pesos e as raízes do esquema de quadratura Gaussiana.

Para simular o campo de concentração superficial fornecido pelas eq. 19 e 20 necessita-se de informações sobre a taxa de emissão, altura da fonte, perfis verticais do vento médio e do coeficiente de difusão.

## 3.1. PARAMETRIZAÇÃO DO CAMPO DE VENTO MÉDIO

O perfil de vento usado nas Eqs. (19) e (20) é parametrizado seguindo a Teoria de Similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML (Berkowicz et al., 1986):

$$U = \frac{u_*}{\kappa}\left[\ln(z/z_0) - \Psi_m(z/L) + \Psi_m(z_0/L)\right] \quad \text{se } z \le z_b \qquad (21)$$

$$U = U(z_b) \quad \text{se } z > z_b \qquad (22)$$

onde $z_b = min\left[|L|, 0.1z_i\right]$, e $\Psi_m$ é a função de estabilidade dada por (Paulsen, 1975):

$$\Psi_m = 2\ln\left[\frac{1+A}{2}\right] + \ln\left[\frac{1+A^2}{2}\right] - 2\tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2} \qquad (23)$$

com

$$A = (1 - 16z/L)^{1/4} \qquad (24)$$

$\kappa$ = 0,4 é a constante de Von Karman, $u_*$ velocidade de fricção, $z_o$ é o comprimento de rugosidade aerodinâmico e $L$ é o comprimento de Monin-Obukhov na camada superficial.

## 4. COMPARAÇÃO ENTRE AS DIFERENTES FORMULAÇÕES PARA O CÁLCULO DE k

A performance das duas diferentes formulações para k foi testada utilizando-se o modelo Euleriano de dispersão descrito acima e dados de concentração superficial observados no experimento de Copenhagen.

Foram realizadas oito simulações (Tabela 1). Cinco simulações empregaram a formulação para $k_c$ proposta por H-M (eq.2), com os seguintes valores de Rc=0 (modelo1); 0,5 (modelo 2); 1,0 (modelo 3); 1,5 (modelo 4) e ∞ (modelo 5). As simulações 6 e 7 empregaram a equação 5, com $\psi^{1/3}$ = 0,97 (modelo 6) e $\psi$ dado pela equação 7 (modelo 7) e o modelo 8 usa diretamente a equação 6.

O confronto entre as simulações (modelos 1 à 8) e observações foi realizado utilizando-se um conjunto de índices estatísticos (Hanna, 1989), apresentado na Tabela 1. A análise estatística mostra que ambas formulações para k (H-M e Degrazia et al. (1996,1997)) são capazes de reproduzir satisfatoriamente as concentrações observadas. É importante salientar que na formulação de H-M o aumento do efeito de entranhamento conduz a uma subestimação da concentração observada. O valor de $k_c$

calculado com Rc=0 (caso de ausência de fluxo de entranhamento) fornece os melhores resultados.

Por outro lado, a presente análise mostra que das formulações propostas por Degrazia et al. (1996,1997), tanto o modelo 6 como o modelo 8 conduzem aos melhores resultados.

Dos resultados da Tabela 1, pode-se concluir que os modelos 8 e 6, podem ser empregados como um coeficiente de difusão turbulento em modelos operacionais que calculam a concentração de contaminantes na baixa atmosfera. Isto é garantido pelo fato que estes modelos não diferem significativamente do modelo 1 e ao mesmo tempo não exigem cálculos numéricos complicados.

**Tabela 1**

| Modelo | NMSE | FA2 | R | FB | FS |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0,05 | 1,00 | 0,91 | 0,00 | 0,02 |
| 2 | 0,05 | 1,00 | 0,91 | 0,03 | 0,05 |
| 3 | 0,05 | 1,00 | 0,91 | 0,05 | 0,07 |
| 4 | 0,05 | 1,00 | 0,91 | 0,07 | 0,08 |
| 5 | 0,13 | 0,91 | 0,87 | 0,21 | 0,24 |
| 6 | 0,05 | 1,00 | 0,90 | -0,04 | 0,03 |
| 7 | 0,07 | 1,00 | 0,90 | 0,11 | 0,09 |
| 8 | 0,05 | 1,00 | 0,90 | -0,04 | 0,04 |

## 5 – BIBLIOGRAFIA


ARYA, S. P. : **Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds**. J. Appl. Meteor., v. 34, p.1112-1122, 1995

BERCOWICZ, R. R., OLESEN, H. R. AND TORP U. : **The Danish Gaussian air pollution model (OML): description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications.** Air Pollution modeling and its application. Pp. 453-480. Edited by C. De Wispeleare, F. A. Schiermeirier and N. V. Gillani. Plenum Publishing Corporation.1986

DEGRAZIA, G. A. , CAMPOS VELHO H. F. AND CARVALHO, J. C.: **Nonlocal Exchange Coefficients for the Convective Boundary Layer Derived From Spectral Properties**, Beitr. Phys. Atmosph., 70, 57-64. 1997.

HEYDARIAN, M. AND MULLINEAUX, N. : **Solution of parabolic partial differential equations**, Appl. Math. Modelling, 5, 448-449. 1989

HOJSTRUP J.: **Velocity spectra in the unstable boundary layer**. J. Atmos. Sci., 39, pp.2239-2248, 1982

HOLSTLAG, A. A. M. AND MOENG, C. H.: **Eddy diffusivity and countergradient transport in the convective boundary layer**, J. Atmos. Sci., 48, 1690-1698. 1991.

PAULSEN, C. A.: **The mathematical representation of wind and temperature profiles in aunstable atmospheric surface layer**. J. appl. Met., 9, 857-861. 1975

VILHENA, M. T., RIZZA, U., DEGRAZIA, G. A., MANGIA, C., MOREIRA, D. M. AND TIRIBASSI, T. : **An Analytical Air Pollution Model: Development and Evaluation**, Contr. Atmos. Phys., 71, 315-320. 1998

GERVÁSIO A. DEGRAZIA
ALNEI R. PROCHNOW
Departamento de Física
Universidade Federal de Santa Maria
Santa Maria, RS – Brasil
DAVIDSON M. MOREIRA
Pós-Graduação em Engenharia : Engenharia, Ambiente e Materiais
Universidade Luterana do Brasil
Canoas, RS – Brasil
ANDRÉ B. NUNES
CLÁUDIA R. J. DE CAMPOS
Departamento de Meteorologia
Universidade Federal de Pelotas
Pelotas, RS – Brasil
FABIANE A. FONSECA
Departamento de Física
Universidade Federal de Pelotas
Pelotas, RS – Brasil