

## Simulação unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera, considerando o fechamento não local da turbulência

One-dimensional simulation of the pollutants dispersion in the atmosphere taking into account the turbulence nonlocal closure

Viliam Cardoso da Silveira<sup>1</sup>, Lucas Tadeo<sup>1</sup>, Lucas da Costa Bernal<sup>1</sup>,  
Daniela Buske<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, RS, Brasil

### RESUMO

O objetivo desse trabalho é avaliar a dispersão de poluentes na atmosfera, considerando a equação da difusão, o termo de fechamento não local da turbulência e a componente vertical do vento médio. Para resolver a equação da difusão será utilizada a técnica da transformada integral generalizada com solução analítica do problema transformado por transformada de Laplace. Os resultados estão de acordo com a literatura e a concentração apresenta um pico no tempo inicial e depois diminui e fica homogênea. A inclusão do termo  $w$  provoca um comportamento ascendente ou descendente da pluma de poluentes, dependendo se for positivo ou negativo. O presente modelo apresenta o comportamento esperado da pluma de poluentes e pode ser usado para aplicações regulatórias da qualidade do ar.

**Palavras-chave:** Equação da difusão; técnica GILTT; Fechamento não local; Dispersão de poluentes

### ABSTRACT

The aim of this work is to evaluate the pollutants dispersion in the atmosphere, considering the diffusion equation, turbulence nonlocal closure term and the vertical component of the mean wind. To solve the diffusion equation will be utilized the generalized integral transform technique with analytical solution of the transformed problem by Laplace transform. The results are in agreement with the literature and the concentration presents one peak at the initial time and then decreases and becomes homogeneous. The inclusion of the  $w$  term causes an ascending or descending behavior of the pollutants plume, depending if the term is positive or negative. The present model presents the behavior expected of the pollutant plume and can be used for air quality regulatory applications.

**Keywords:** Diffusion equation; GILTT technique; Nonlocal closure; Pollutants dispersion

## 1 INTRODUÇÃO

Considerando o fechamento da turbulência não-Fickiano pode ser levada em conta a assimetria no processo da dispersão de poluentes na atmosfera. Com isso, pode ser utilizada uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio fazendo com que apareça um termo adicional na equação que é associado ao termo de contragradiente (Myngaard e Meil, 1991; Dop e Verver, 2001).

Nesse trabalho será avaliada a dispersão de poluentes na atmosfera, considerando a equação da difusão transiente unidimensional, o termo de fechamento não local da turbulência e a componente  $w$  da velocidade vertical. Essa equação será resolvida pela técnica da transformada integral generalizada com solução analítica do problema transformado por transformada de Laplace (conhecida na literatura como técnica GILTT). Para validar a metodologia serão consideradas condições atmosféricas instáveis para avaliar o termo de variação não local da turbulência.

Os poluentes emitidos em um determinado local podem causar diversos problemas ao meio ambiente e atingir regiões distantes de onde foram emitidos, por isso a importância de estudar o comportamento dos poluentes nas mais diversas situações que podem ocorrer na atmosfera.

Diversos estudos já foram desenvolvidos para estudar a dispersão de poluentes na atmosfera considerando a equação da advecção-difusão em diversas condições de estabilidade atmosférica e utilizando a técnica GILTT. A inovação desse trabalho é considerar a equação da difusão na sua forma mais simples, uma vez que o problema unidimensional com fechamento não local da turbulência ainda não foi resolvido pela técnica proposta. Além disso a componente  $w$  da velocidade do vento médio é considerada.

Na sequência será apresentada a metodologia para resolver a equação da difusão. Na seção 3 será apresentado os resultados do trabalho e na seção 4 serão feitas as conclusões.

## 2 METODOLOGIA

A difusão atmosférica pode ser modelada aplicando a seguinte equação transiente unidimensional de conservação de massa:

$$\frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial z} = - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \quad (1)$$

sendo  $\bar{c}(z, t)$  a concentração média de poluentes ( $g/m^3$ ),  $\bar{w}$  é a componente vertical do vento médio ( $m/s$ ) e  $\overline{w'c'}$  o fluxo turbulento de contaminantes na vertical  $g/sm^2$ . A Equação (1) apresenta duas variáveis desconhecidas, a concentração média e o fluxo turbulento, por isso essa equação não pode ser resolvida diretamente, levando ao chamado problema de fechamento da turbulência.

A equação do fluxo turbulento, dependente do tempo (Dop e Verver, 2001) é escrita como:

$$\left(1 + \left(\frac{S_k \sigma_w T_{l_w}}{2}\right) \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial t}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial z} \quad (2)$$

sendo  $S_k$  a assimetria,  $\sigma_w$  o desvio padrão da velocidade turbulenta vertical ( $m/s$ ),  $T_{l_w}$  a escala de tempo Lagrangeana ( $s$ ),  $\tau$  o tempo de relaxação ( $s$ ) e  $K_z$  o coeficiente de difusão ( $m^2/s$ ). Pode-se definir o termo de contragradiente ( $\beta$ ) como  $\beta = S_k \sigma_w T_{l_w} / 2$ . Assim, a Equação 2 pode ser escrita como:

$$\left(1 + \beta \frac{\partial}{\partial z} + \tau \frac{\partial}{\partial t}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial z} \quad (3)$$

Substituindo a Equação (3) na Equação (1), pode-se escrever a seguinte equação para o fluxo turbulento:

$$\overline{w'c'} = \beta \frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial t} + \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial z} - K_z \frac{\partial \bar{c}(z, t)}{\partial z} - \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} \quad (4)$$

Agora, substituindo a Equação (4) na Equação (1), pode-se escrever a seguinte equação para a variação da concentração de poluentes no tempo:

$$\frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z} = - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \tau \frac{\partial \bar{w}'c'}{\partial t} \right). \quad (5)$$

A Equação (5) está sujeita as condições de contorno de fluxo nulo  $\left( K_z \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z} \right)$  no solo ( $z = 0$ ) e no topo da camada limite convectiva ( $z = h$ ) e condição de fonte dada por:  $\bar{c}(z, 0) = Q\delta(z - H_s)$ , sendo  $Q$  a intensidade da fonte ( $g/s$ ),  $\delta$  a função delta de Dirac e  $H_s$  a altura da fonte ( $m$ ).

Pelo teorema de Cauchy-Euler e pela Equação (1) pode-se escrever a seguinte equação:

$$\tau \frac{\partial^2 \bar{c}(z,t)}{\partial t^2} + \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t} + \tau \bar{w} \frac{\partial^2 \bar{c}(z,t)}{\partial t \partial z} = - \bar{w} \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z} - \beta \bar{w} \frac{\partial^2 \bar{c}(z,t)}{\partial z^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{c}(z,t)}{\partial z^2} + K'_z \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial z} - \beta \frac{\partial^2 \bar{c}(z,t)}{\partial z \partial t} - \beta' \frac{\partial \bar{c}(z,t)}{\partial t}. \quad (6)$$

Aplicando a técnica da transformada integral na variável  $z$ , expande-se a concentração de poluentes como

$$\bar{c}(z,t) = \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(t) \Psi_i(z) \quad (7)$$

Substituindo a Equação (7) na Equação (6), utilizando um problema auxiliar de Sturm-Liouville  $[\Psi_i''(z) + \lambda_i^2 \Psi_i(z) = 0]$  em  $0 < z < h$ , com  $\Psi_i(z) = \cos(\lambda_i z)$  sendo  $\lambda_i = i\pi/h (i = 0, 1, 2, \dots)$  o conjunto de autovalores e, multiplicando pelo operador integral  $\int_0^h (\cdot) \Psi_j(z) dz$ , pode-se escrever:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i''(t) \int_0^h \tau \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i'(t) \int_0^h \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz \\
& + \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i'(t) \int_0^h \tau \bar{w} \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz = - \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(t) \int_0^h \bar{w} \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz \\
& + \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(t) \lambda_i^2 \int_0^h \beta \bar{w} \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(t) \lambda_i^2 \int_0^h K_z \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz \\
& + \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i(t) \int_0^h K_z' \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz - \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i'(t) \int_0^h \beta \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz \\
& - \sum_{i=0}^{\infty} \bar{c}_i'(t) \int_0^h \beta' \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz.
\end{aligned} \tag{8}$$

Reescrevendo a Equação (8) em notação matricial tem-se

$$Y''(t) + FY'(t) + GY(t) = 0 \tag{9}$$

onde  $Y(t)$  é o vetor coluna cujas componentes são  $\bar{c}_i(t)$ . A matriz  $F$  é dada por  $F = C^{-1}.B$  e a matriz  $G$  é dada por  $G = C^{-1}.A$ .

As matrizes  $C$ ,  $B$  e  $A$  são dadas respectivamente por

$$\begin{aligned}
C_{i,j} &= \int_0^h \tau \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz, \\
B_{i,j} &= \int_0^h \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \int_0^h \tau \bar{w} \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz + \int_0^h \beta \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz + \int_0^h \beta' \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz, \\
A_{i,j} &= \int_0^h \bar{w} \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz - \lambda_i^2 \int_0^h \beta \bar{w} \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz + \lambda_i^2 \int_0^h K_z \Psi_i(z) \Psi_j(z) dz - \int_0^h K_z' \Psi_i'(z) \Psi_j(z) dz.
\end{aligned}$$

Aplicando uma redução de ordem na Equação (9) e considerando  $Z_1(t) = Y(t)$  e  $Z_2(t) = Y'(t)$ , pode-se escrever a seguinte EDO na forma matricial

$$Z'(t) + H.Z(t) = 0, \tag{10}$$

no qual o vetor  $Z(t)$  é dado por  $Z(t) = \begin{bmatrix} Z_1(t) \\ Z_2(t) \end{bmatrix}$  e a matriz  $H$  tem a forma de bloco representada por  $H = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ G & F \end{bmatrix}$ . A Equação (10) é resolvida pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização (BUSKE *et al.*, 2007a; MOREIRA *et al.*, 2009; BUSKE *et al.*, 2012).

Para a parametrização do termo de contragradiente é usada a variação da velocidade turbulenta Euleriana (DEGRAZIA *et al.*, 1997, 2001) e representada por:

$$\sigma_w^2 = 1,06c_w \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_w^{2/3}} \left(\frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2,$$

sendo  $h$  a altura da camada limite convectiva,  $\psi = 1,5 - 1,2(z/h)^{1/3}$  a taxa de dissipação,  $c_w = 0,36$  uma constante e  $w_*$  a escala de velocidade convectiva.

A escala de tempo Lagrangiana é parametrizada pela seguinte expressão

$$T_{Lw} = \frac{0,55}{4} \frac{1}{\sigma_w} \frac{z}{(f_m^*)_w},$$

onde  $(f_m^*)_w = z/(\lambda_m)_w$  é a frequência normalizada do pico espectral vertical. O pico espectral do comprimento de onda vertical  $(\lambda_m)_w$  é calculado pela expressão

$$(\lambda_m)_w = 1,8h \left[ 1 - e^{-\frac{4z}{h}} - 0,0003e^{\frac{8z}{h}} \right].$$

O coeficiente de difusão é parametrizado pela seguinte expressão (MANGIA *et al.*, 2002)

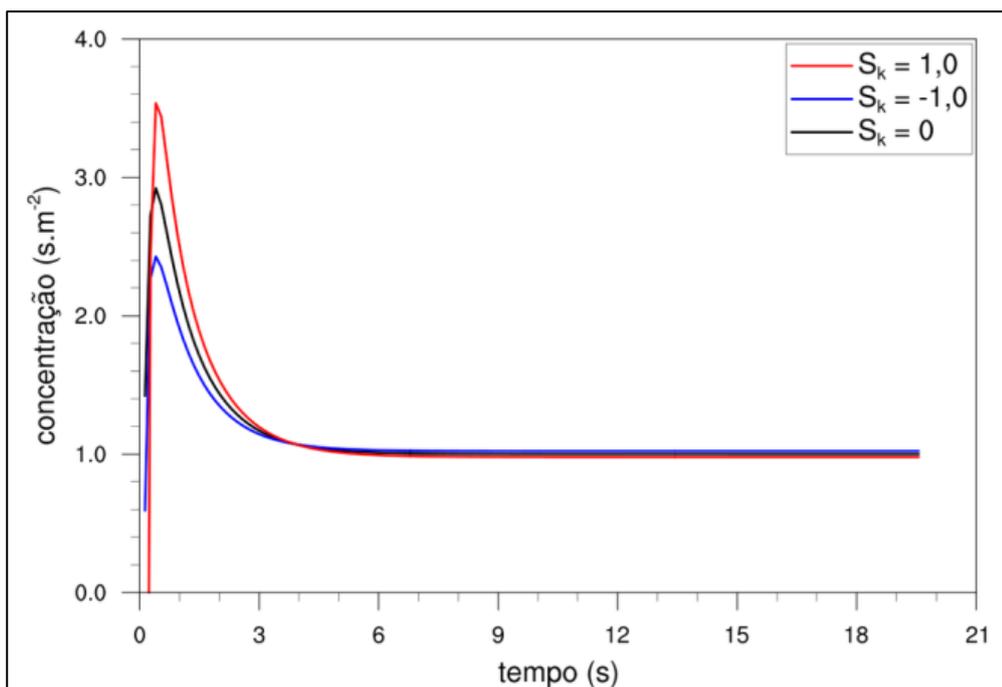
$$K_z = 0,22w_*h \left(\frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{\frac{1}{3}} \left[ 1 - e^{-\frac{4z}{h}} - 0,0003e^{\frac{8z}{h}} \right].$$

Para simular a dispersão de poluentes foram considerados os seguintes parâmetros típicos de uma camada limite convectiva:  $h = 810 \text{ m}$  (altura da camada limite convectiva),  $H_s = 100 \text{ m}$  (altura da fonte),  $z = 1 \text{ m}$  (altura que estou medindo o poluente),  $Q = 10 \text{ g/s}$  (taxa de emissão do poluente),  $\omega_* = 2,2 \text{ m/s}$  (escala de velocidade convectiva) e  $\tau = 0,5 \text{ s}$  (tempo de relaxação).

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Conforme mostrado na Figura 1 para uma fonte alta, quando o termo de assimetria é negativo ( $S_K = -1,0$ ), o pico de concentração é um pouco menor do que o pico quando o termo de assimetria não é considerado ( $S_K = 0$ ) nas simulações. Quando o termo de assimetria é positivo ( $S_K = 1,0$ ), o pico de concentração é um pouco maior do que o pico quando o termo de assimetria não é considerado ( $S_K = 0$ ) nas simulações. A concentração de poluentes para cada caso apresenta um pico no tempo inicial e depois diminui e fica homogênea com o passar do tempo. Esse comportamento é o esperado e está de acordo com a literatura (BUSKE *et al.*, 2007b).

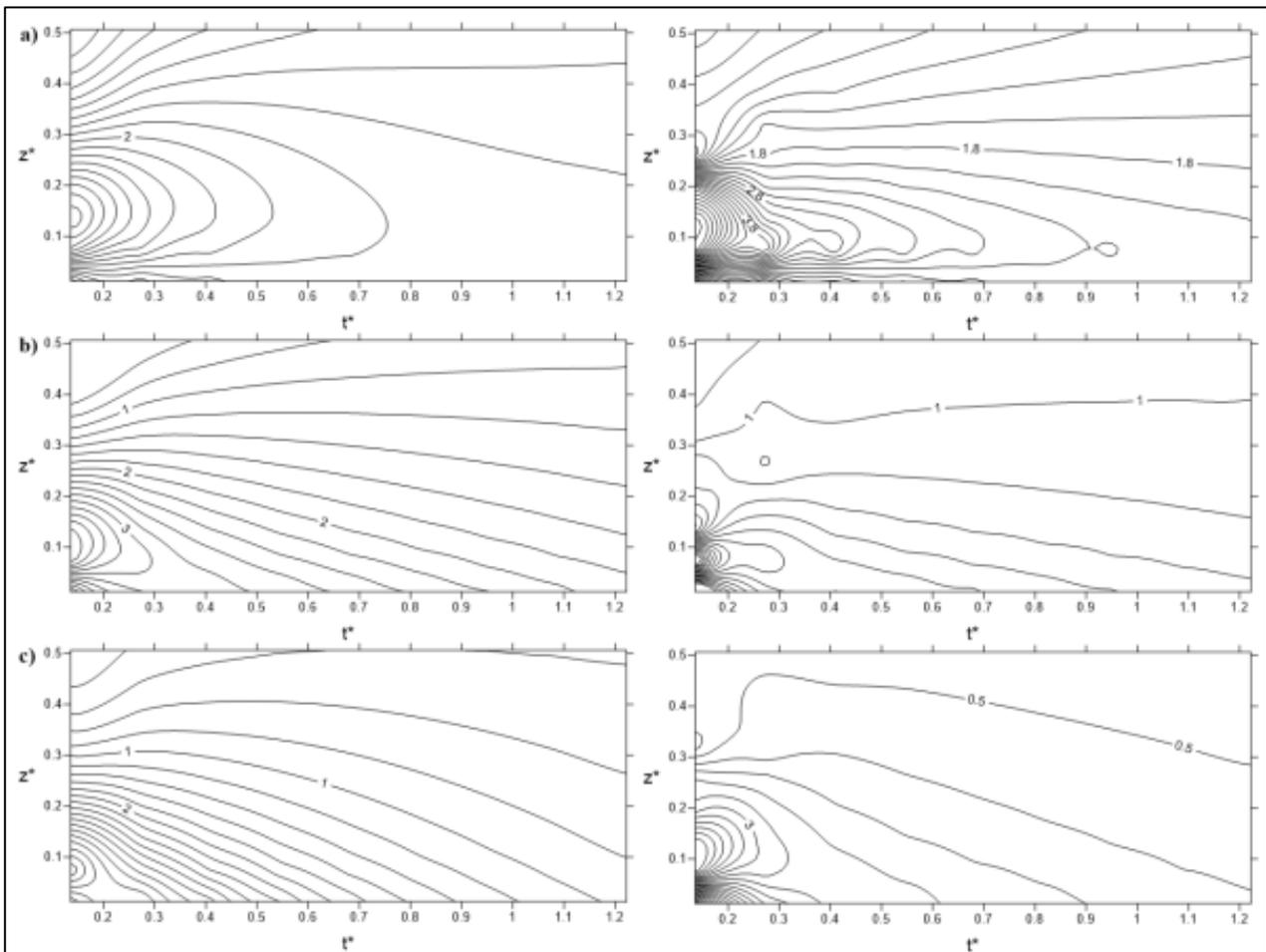
Figura 1 - Concentrações previstas pelo presente modelo considerando o termo de assimetria igual a 0; -1,0 e 1,0 e a componente do vento  $\omega = 0$



Fonte: Autores (2021)

A Figura 2 mostra a concentração no tempo adimensional versus a altura adimensional, quando o termo de assimetria não é considerado (figuras da esquerda) e a velocidade vertical é positiva, nula ou negativa. Na Figura 2a, tem-se  $\omega = 0,5$  e observa-se que a pluma tem um comportamento ascendente. Na Figura 2b, tem-se  $\omega = 0$  e observa-se a simetria da pluma de poluentes próximo da fonte e na Figura 2c, tem-se  $\omega = -0,5$  e a pluma tem um comportamento descendente. Quando o termo de assimetria é considerado (figuras da direita), o pico de concentração é deslocado da fonte e até mesmo tem-se núcleos de concentração desprendidos da pluma de poluentes, conforme Figura 2b.

Figura 2 - Concentrações previstas pelo presente modelo não considerando o termo de assimetria (figuras da esquerda) e considerando o termo de assimetria igual a 1,0 (figuras da direita), a)  $\omega = 0,5m/s$ , b)  $\omega = 0m/s$  e c)  $\omega = -0,5m/s$



Fonte: Autores (2021)

## 4 CONCLUSÕES

A concentração de poluentes é simulada de forma satisfatória considerando e não considerando o termo de fechamento não local da turbulência. A concentração de poluentes apresenta um pico no tempo inicial e depois diminui e fica homogênea. O modelo simula o pico da concentração de poluentes conforme descrito na literatura. Observou-se um comportamento ascendente na pluma de poluentes quando a componente  $\omega$  do vento é positiva e um comportamento descendente quando a componente  $\omega$  do vento é negativa. O efeito do termo de fechamento não local é deslocar o pico de concentração da fonte e até mesmo descolar núcleos de concentração da pluma de poluentes. Assim, o modelo pode ser aplicado para aplicações regulatórias da qualidade do ar.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro para realização deste trabalho.

## REFERÊNCIAS

BUSKE, D., VILHENA, M. T., MOREIRA, D. M., TIRABASSI, T. (2007a). Simulation of pollutant dispersion for low wind conditions in stable and convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, 41, 5496–5501.

BUSKE, D., VILHENA, M. T., MOREIRA, D. M., TIRABASSI, T. (2007b). An analytical solution of the advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Environmental Fluid Mechanics** (Dordrecht), 7, 43–54.

BUSKE, D., VILHENA, M. T., TIRABASSI, T., BODMANN, B. (2012). Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. **Journal of Environmental Protection** (Print), 3, 1124–1134.

DEGRAZIA, G. A., VELHO, H. F. C., CARVALHO, J. C. (1997). Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties. **Contributions to Atmospheric Physics**, pp. 57–64.

DEGRAZIA, G. A., MOREIRA, D. M., VILHENA, M. T. (2001). Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, pp. 1233–1240.

DOP, H. V., VERVER, G. (2001). Countergradient transport revisited. **Journal of Atmospheric Sciences**, 58, 2240–2247.

MANGIA, C., MOREIRA, D. M., SCHIPA, I., DEGRAZIA, G. A., TIRABASSI, T., RIZZA, U. (2002). Evaluation of a new eddy diffusivity parametrisation from turbulent eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, 36, 67–76.

MOREIRA, D. M., VILHENA, M. T., BUSKE, D., TIRABASSI, T. (2009). The state-of-art of the giltt method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, 92, 1–17.

WYNGAARD, J. C., WEIL, J. C. (1991). Transport asymmetry in skewed turbulence. **Physics Fluids A**, 3, 155–162.

## CONTRIBUIÇÃO DE AUTORIA

### 1 – Viliam Cardoso da Silveira

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática / Universidade Federal de Pelotas  
<https://orcid.org/0000-0001-7438-5802> – [viliamcardoso2@gmail.com](mailto:viliamcardoso2@gmail.com)

Contribuição: Desenvolvimento teórico da metodologia, implementação na linguagem de programação Fortran, simulações e análise dos resultados.

### 2 – Lucas Tadeo

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática / Universidade Federal de Pelotas  
<https://orcid.org/0000-0001-9009-4677> – [lucas1tadeo@gmail.com](mailto:lucas1tadeo@gmail.com)

Contribuição: Desenvolvimento teórico da metodologia, implementação na linguagem de programação Fortran, simulações e análise dos resultados.

### 3 – Lucas da Costa Berna

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática / Universidade Federal de Pelotas  
<https://orcid.org/0000-0002-3418-8764> – [lucas.berna@hotmail.com](mailto:lucas.berna@hotmail.com)

Contribuição: Desenvolvimento teórico da metodologia, implementação na linguagem de programação Fortran, simulações e análise dos resultados.

### 4 – Daniela Buske

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática / Universidade Federal de Pelotas  
<https://orcid.org/0000-0002-4573-9787> – [danielabuske@gmail.com](mailto:danielabuske@gmail.com)

Contribuição: Desenvolvimento teórico da metodologia, implementação na linguagem de programação Fortran, simulações e análise dos resultados.

## Como citar este artigo

SILVEIRA, V.C.; TADEO, L.; BERNA, L.C.; BUSKE, D. Simulação unidimensional da dispersão de poluentes na atmosfera, considerando o fechamento não local da turbulência. **Ciência e Natura**, Santa Maria, v. 43, Ed. Esp. X ERMAC RS, e10, p. 1-11, 2021. DOI 10.5902/2179460X66657. Disponível em: <https://doi.org/10.5902/2179460X66657>. Acesso em: 05 Nov. 2021.