

MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES NA BAIXA ATMOSFERA UTILIZANDO UM MODELO DE PLUMA GAUSSIANO

CÁTIA MARIA DE FIGUEIREDO¹, EDSON CHIARAMONTE²,
JONAS DA COSTA CARVALHO³

RESUMO

Neste artigo duas diferentes parametrizações da turbulência são utilizadas em um modelo Gaussiano para simular a dispersão de um poluente passivo emitido durante o experimento Copenhagen. Comparações são realizadas entre valores de concentração previstos pelo modelo e observados durante o experimento. Os resultados são avaliados através de uma análise estatística.

Palavras-chave: *poluição atmosférica, modelo gaussiano, parametrização da turbulência*

ABSTRACT

In this paper two different turbulent parameterizations are used in a Gaussian model to simulate the dispersion of a passive pollutant emitted during Copenhagen experiment. Measured concentration data are used to compare observed and predicted concentrations. The results are evaluated through a statistical analysis.

Key words: *atmospheric pollution, gaussian model, turbulence parameterization*

¹Acadêmico do Curso de Engenharia Química -Bolsista PROICT/ULBRA

³Professor - orientador do Curso de Engenharia Ambiental/ULBRA

²Professor do Curso de Engenharia Química/ULBRA

INTRODUÇÃO

Um tipo de modelo amplamente utilizado para aplicações em modelagem da dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária (CLP) é o modelo de pluma Gaussiano. Este modelo considera que a concentração de poluentes apresenta uma distribuição Gaussiana ao longo das direções y e z . Dentre as vantagens que o modelo Gaussiano apresenta estão a facilidade de entrada de dados para a inicialização do modelo e o baixo tempo computacional durante as simulações. Estas vantagens classificam os modelos Gaussianos como os mais indicados para o controle e qualidade do ar em diversas condições atmosféricas.

O objetivo deste trabalho é utilizar duas diferentes parametrizações da turbulência em um modelo de pluma Gaussiano para simular a dispersão de um poluente passivo emitido durante o experimento de dispersão Copenhague (emissão a partir de uma fonte alta). Estas parametrizações são função das escalas de turbulência na atmosfera e são capazes de gerar valores contínuos em todas as estabilidades e em todas as alturas na CLP.

Concentrações ao nível da superfície, medidas durante o experimento Copenhague, são utilizadas para avaliar as simulações. Resultados de uma análise estatística mostram que o modelo Gaussiano reproduz razoavelmente bem as concentrações observadas. O maior progresso mostrado neste trabalho diz respeito à necessidade de descrever corretamente a dispersão de poluentes através de parametrizações que levem em conta a não-homogeneidade do campo de turbulência na CLP.

MATERIAL E MÉTODOS

Descrição do Modelo Gaussiano

Devido a sua simplicidade, o modelo de pluma Gaussiana é o modelo de dispersão mais utilizado. A relação entre a taxa de emissão e a concentração em um determinado ponto no espaço é obtida analiticamente e não requer a utilização de grandes recursos computacionais. Em um sistema de referência generalizado, a equação do modelo Gaussiano é expressa por:

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_zU} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right), \quad (1)$$

onde t é o tempo, Q é a taxa de emissão do poluente, σ_y e σ_z são os parâmetros de dispersão lateral e vertical, respectivamente, e U é a velocidade média do vento.

Os parâmetros chave no modelo Gaussiano são os parâmetros de dispersão. Estes parâmetros podem ser determinados de acordo com as expressões sugeridas por Hanna et al. (1977). O parâmetro σ_y é obtido da seguinte forma:

$$\sigma_y = \sigma_v t F_y \quad (2)$$

onde

$$F_y = \frac{1}{[1 + 0.9(t/1000)^{0.5}]}. \quad (3)$$

para condições instáveis ou estáveis e

$$F_y = \left[1 + \frac{Ut}{20000} \right]^{-1/2} \quad (4)$$

para condições de transição do neutro para estável. O parâmetro σ_z é obtido por uma expressão semelhante:

$$\sigma_z = \sigma_w t F_z \quad (5)$$

onde

$$F_z = \left[\frac{1}{1 + 0.9(t/500)^{0.5}} \right] \quad (6)$$

para condições instáveis,

$$F_z = \left[\frac{1}{1 + 0.945(t/100)^{0.806}} \right] \quad (7)$$

para condições estáveis e

$$F_z = \left[1 + \sigma_w t \left(\frac{1}{0.72z} + \frac{N}{0.54\sigma_w} \right) \right]^{-1/2} \quad (8)$$

para condições de transição do neutro para estável, onde N é a frequência de Brunt-Vaisala.

Os parâmetros de dispersão σ_y e σ_z só podem ser determinados, se valores para as variâncias das velocidades turbulentas lateral σ_v e vertical σ_w forem calculados. Na próxima

seção, duas diferentes parametrizações para σ_v e σ_w são apresentadas.

Parametrizações para σ_v e σ_w

Parametrização de Hanna (1982)

Baseado em análises de experimentos de campo, considerações teóricas e em modelos de fechamento de segunda-ordem, Hanna (1982) propôs parametrizações para σ_v e σ_w . As parametrizações de Hanna geram valores para todas as elevações ($z_0 \leq z \leq h$) e para todas as condições de estabilidade na CLP (neutro, instável e estável), onde z_0 é a rugosidade aerodinâmica e h é a altura da CLP. Hanna sugere as seguintes expressões:

para condições instáveis

$$\sigma_v = u_* \left[12 + \frac{1}{2} \frac{h}{|L|} \right]^{1/3} \quad (9)$$

$$\sigma_w = 0.96w_* \left(3 \frac{z}{h} - \frac{L}{h} \right)^{1/3} \quad (10)$$

$$\sigma_w = w_* \min \left\{ 0.96 \left(3 \frac{z}{h} - \frac{L}{h} \right)^{1/3}, 0.763 \left(\frac{z}{h} \right)^{0.175} \right\} \quad (11)$$

$$\sigma_w = 0.722w_* \left(1 - \frac{z}{h}\right)^{0.207} \quad (12)$$

$$\sigma_w = 0.37w_* \quad (13)$$

para condições neutras

$$\sigma_v = 1.3u_* \exp\left(-\frac{2fz}{u_*}\right) \quad (14)$$

$$\sigma_w = 1.3u_* \exp\left(-\frac{2fz}{u_*}\right) \quad (15)$$

para condições estáveis

$$\sigma_v = 1.3u_* \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (16)$$

$$\sigma_w = 1.3u_* \left(1 - \frac{z}{h}\right) \quad (17)$$

onde u_* é a velocidade de fricção, w_* é escala de velocidade convectiva, z é a altura sobre a superfície, h é a altura da CLP, L é o comprimento de Monin-Obukhov, z_0 é a rugosidade aerodinâmica e $f_c = 10^{-4} s^{-1}$ é o parâmetro de Coriolis.

Parametrização de Degrazia et al. (2000)

Levando em conta o conhecimento das características e da estrutura da CLP, os Degrazia et al. (2000) derivaram parametrizações para σ_v

e σ_w . A teoria de difusão estatística, as propriedades espectrais observadas [onde uma combinação linear entre os efeitos de turbulência térmica e turbulência mecânica é assumida (Frisch, 1995)] e as características observadas dos turbilhões mais energéticos foram utilizadas para estimar estes parâmetros. Estas parametrizações geram valores contínuos em todas as elevações e em todas as condições de estabilidade na CLP. As expressões para σ_v e

σ_w são as seguintes:

$$\sigma_v = \left[\frac{0.286 \left(\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2}{[(f_m^*)_i^c]^{2/3}} + \frac{0.626 (\phi_\varepsilon^{n+s})^{2/3} u_*^2}{[(f_m^*)_i^{n+s}]^{2/3}} \right]^{1/2} \quad (18)$$

e

$$\sigma_w = \left[\frac{0.38 \left(\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h}\right)^{2/3} w_*^2}{[(f_m^*)_i^c]^{2/3}} + \frac{0.835 (\phi_\varepsilon^{n+s})^{2/3} u_*^2}{[(f_m^*)_i^{n+s}]^{2/3}} \right]^{1/2} \quad (19)$$

onde ψ_ε^c e ϕ_ε^{n+s} são as funções das taxas adimensionais de dissipação molecular associadas flutuação e produções mecânicas, respectivamente, $(f_m^*)_i^c$ é a frequência reduzida do pico espectral convectivo e $(f_m^*)_i^{n+s}$ é a frequência reduzida do pico espectral estável ou neutro.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A performance do modelo foi testada utilizando os valores de concentração medidos durante o experimento Copenhagen (Gryning e Lyck, 1984). O experimento Copenhagen foi realizado na região norte de Copenhagen. O poluente (SF_6) foi emitido a partir de uma fonte com altura de 115 m e coletado ao nível da superfície por amostradores de concentração em até três distâncias na direção preferencial do vento (entre 2 e 6 km a partir da fonte). A região do experimento era principalmente residencial com um comprimento de rugosidade de 0.6 m. A totalidade dos dados meteorológicos disponíveis (ver Tabela 1) foi utilizada para criar os arquivos de entrada para as simulações. Os resultados de nove experimentos em condição neutro-instável são apresentados. Os parâmetros de dispersão para o modelo Gaussiano são calculados de acordo com as parametrizações de Hanna (1982) (equações 9 - 17) e Degrazia et al. 2000 (equações 18 - 19). As velocidades do vento observadas foram utilizadas para calcular os perfis exponenciais do vento

Os resultados das simulações, considerando as duas parametrizações, são apresentados na Tabela 1, na Tabela 2 e na Figura 1. A Tabela 1 mostra a comparação entre valores observados e previstos de concentração integrada perpendicular a direção do vento ao nível da superfície (C_y). A Figura 1 mostra o diagrama de espalhamento para o confronto entre C_y observado e previsto. A Tabela 2 mostra os resultados da análise estatística realizada com os dados da Tabela 1. Os índices estatísticos utilizados para a análise estatística são os seguintes (Hanna e Paine, 1989):

$$NMSE = \overline{(C_o - C_p)^2} / \overline{C_o C_p}$$

(Erro Quadrático Médio Normalizado)

$$FB = (\overline{C_o} - \overline{C_p}) / (0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p}))$$

(Desvio Fracional)

$$FS = 2(\sigma_o - \sigma_p) / (\sigma_o + \sigma_p)$$

(Desvio Padrão Fracional)

$$R = \overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})} / \sigma_o \sigma_p$$

(Coeficiente de Correlação)

$$FA2 = 0.5 \leq C_o / C_p \leq 2$$

(Fator de 2)

onde C é a quantidade analisada (concentração C_y) e o subscritos "o" e "p" representam os valores observados 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*, melhor são os resultados.

Os resultados da Tabela 1 e da Figura 1 mostram uma boa concordância entre os valores observados e os valores previstos pelo modelo, para qualquer uma das parametrizações utilizadas. Analisando os índices estatísticos na Tabela 2 é possível notar que o modelo Gaussiano simula satisfatoriamente as concentrações observadas, com valores de *NMSE*, *FB* e *FS* próximos de zero e de *R* e *FA2* próximos de 1. Os índices estatísticos permitem dizer que, para ambas parametrizações, o modelo superestima as concentrações observadas ($FB < 0$), apresenta uma razoável correlação entre os dados observados e previstos e mostra que a dispersão dos valores de concentração previstos é maior do que a dispersão dos valores de concentração observados ($FS > 0$). Porém, os resultados obtidos com a utilização da parametrização de Degrazia et al. são um pouco melhores. Isto pode ser observado principalmente para os valores de *FB* e *FS*.

CONCLUSÕES

Neste trabalho, duas diferentes parametrizações da turbulência na CLP foram utilizadas em um modelo de pluma Gaussiano para simular a dispersão de um poluente emitido durante o experimento Copenhagen. Alguns índices estatísticos foram calculados para comparar os valores de concentração observados e previstos. A análise dos resultados mostrou que o modelo Gaussiano, para ambas parametrizações, produziu bons resultados, ou seja, valores de *NMSE*, *FB* e *FS* próximos de zero e valores de *R* e *FA2* próximos de 1. Estes bons resultados foram obtidos devido a utilização de parametrizações que levam em conta a não-homogeneidade do campo de turbulência na CLP e que, desta forma, permitiram uma correta descrição do processo de dispersão.

Tabela 1 – Parâmetros meteorológicos e concentrações observadas e previstas (C_y) para o experimento Copenhagen, considerando os resultados para as parametrizações Hanna (1982) e Degrazia et al. (2000).

Exp.	-L (m)	h (m)	U_* (ms^{-1})	U 10m (ms^{-1})	U 115m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	Distância (m)	Observado (μgm^{-3})	Hanna (1982) (μgm^{-3})	Degrazia et al 2000. (μgm^{-3})
1	37	1980	0.36	2.1	3.4	3.2	1900	2074.0	3045.8	3009.8
	37	1980	0.36	2.1	3.4	3.2	3700	739.0	1982.6	1956.3
2	292	1920	0.73	4.9	10.6	3.2	2100	1722.0	1691.5	1547.9
	292	1920	0.73	4.9	10.6	3.2	4200	944.0	1244.6	1051.3
3	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2	1900	2624.0	3161.2	2885.2
	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2	3700	1990.0	2192.0	1939.1
	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2	5400	1376.0	1730.8	1519.4
4	133	390	0.38	2.5	4.6	2.3	4000	2682.0	2156.6	1865.8
	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2	2100	2150.0	2531.7	2652.7
5	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2	4200	1869.0	2596.1	1957.2
	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2	6100	1590.0	2247.0	1572.3
	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1	2000	1228.0	1270.3	1100.1
	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1	4200	688.0	941.9	701.7
6	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1	5900	567.0	765.4	555.1
	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4	2000	1608.0	1376.5	1234.4
	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4	4100	780.0	885.5	772.1
7	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4	5300	535.0	745.9	647.6
	8	810	0.69	4.2	9.4	3.0	1900	1248.0	1495.6	1316.2
	8	810	0.69	4.2	9.4	3.0	3600	606.0	1009.6	861.6
8	8	810	0.69	4.2	9.4	3.0	5300	456.0	779.3	670.6
	9	2090	0.75	5.1	10.5	3.3	2100	1511.0	1714.6	1562.8
	9	2090	0.75	5.1	10.5	3.3	4200	1026.0	1242.1	1052.6
9	298	2090	0.75	5.1	10.5	3.3	6000	855.0	996.5	831.6

Tabela 2 – Índices estatísticos da performance do modelo Gaussiano para o experimento Copenhagen, considerando os resultados para as parametrizações Hanna (1982) e Degrazia et al. (2000).

PARAMETRIZAÇÃO	NMSE	FB	FS	R	FA2
Hanna (1982)	0.10	-0.202	-0.091	0.866	0.957
Degrazia et al. (2000)	0.08	-0.075	-0.065	0.838	0.957

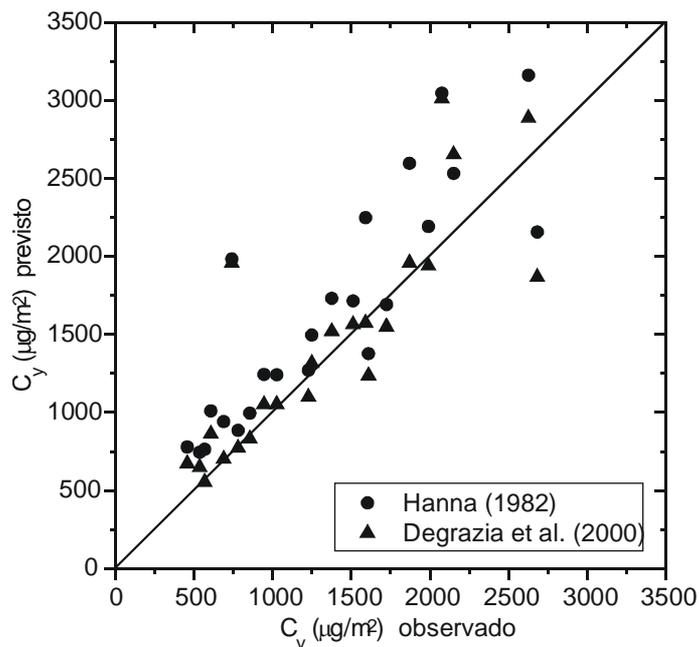


Figura 1 – Diagrama de espalhamento entre concentrações previstas e observadas para o experimento Copenhagen.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

DEGRAZIA, G. A.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J. C.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; CAMPOS VELHO, H. F. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions, **Atmospheric Environment**, v.34, p.3575-3583, 2000.

FRISCH, U. **Turbulence**. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 296 p.

GRYNING, S. E.; LYCK, E. Atmospheric Dispersion from Elevated Source in un Urban Area: Comparison between tracer experiments and model calculations, **Journal of Climate Applied Meteorology**, v.23, p.651-654, 1984.

HANNA, S. R. Applications in air pollution modeling. In: NIEUWSTADT, F.T. M.; DOP, H. van (Eds.). **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling**. Dordrecht Reidel Publishing, 1982. p.275-310.

HANNA, S. R.; PAINE, R. J. Hibrid plume dispersion model (HPDM) development and evaluation. **Journal of Applied Meteorology**,

v.28, p.206-224, 1989.

HANNA, S. R.; BRIGGS, G. A.; DEARDORFF, J.; EGAN, B. A.; GIFFORD, F. A.; PASQUILL, A. M. S. Workshop on Stability Classification Schemes and Sigma Curves – Summary of Recommendations. **Bulletin of the American Meteorological Society**, v.58, p.1305-1309, 1977.