

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática



Dissertação

**Simulação Analítica da Dispersão de Poluentes Durante o Período de Transição
Dia-Noite**

Jéssica Kanopp dos Reis

Pelotas, 2017

JÉSSICA KANOPP DOS REIS

**Simulação Analítica da Dispersão de Poluentes Durante o
Período de Transição Dia-Noite**

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em Modelagem
Matemática da Universidade Federal de Pelo-
tas, como requisito parcial para a obtenção do
grau de Mestre em Modelagem Matemática

Orientador: Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho
Co-orientador: Prof^a. Dra. Daniela Buske

Pelotas, 2017

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

R375s Reis, Jéssica Kanopp dos

Simulação analítica da dispersão de poluentes durante o período de transição dia-noite / Jéssica Kanopp dos Reis ; Jonas da Costa Carvalho, orientador ; Daniela Buske, coorientadora. — Pelotas, 2017.

114 f. : il.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2017.

1. Camada limite planetária.
 2. Camada limite estável.
 3. Camada residual.
 4. Dispersão de poluentes.
 5. Solução analítica euleriana.
- I. Carvalho, Jonas da Costa, orient. II. Buske, Daniela, coorient. III. Título.

CDD : 571.956

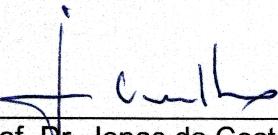
Jéssica Kanopp dos Reis

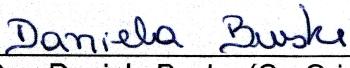
Simulação Analítica da Dispersão de Poluentes Durante o Período de Transição Dia-Noite

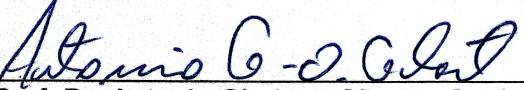
Dissertação aprovada, como requisito parcial, para obtenção do grau de Mestre em Modelagem Matemática, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas.

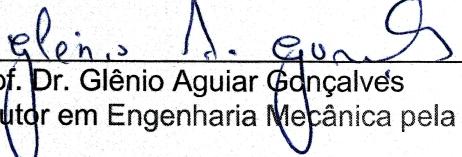
Data da Defesa: 02 de março de 2017

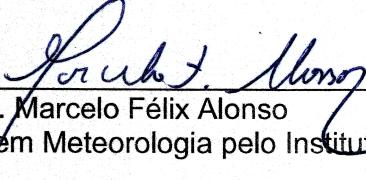
Banca examinadora:


Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho (Orientador)
Doutor em Meteorologia pela Universidade de São Paulo, Brasil


Prof. Dra. Daniela Buske (Co-Orientadora)
Doutora em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil


Prof. Dr. Antonio Gledson Oliveira Goulart
Doutor em Física pela Universidade Federal de Santa Maria, Brasil


Prof. Dr. Glênio Aguiar Gonçalves
Doutor em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil


Prof. Dr. Marcelo Félix Alonso
Doutor em Meteorologia pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Brasil

Dedico este trabalho aos meus pais e meu irmão.

AGRADECIMENTOS

Agradeço

A Deus que possibilitou que eu estivesse aqui para realizar este trabalho;

A minha família, especialmente aos meus pais, Loir e Vera, e meu irmão, Jeferson, pelo incentivo e apoio, não somente durante a realização desta dissertação, mas no decorrer de toda a minha vida;

Ao meu namorado, pelo incentivo e paciência;

Aos professores Jonas da Costa Carvalho e Daniela Buske pelo conhecimento transmitido e pela valiosa orientação prestada;

Aos demais professores da PPGMMat pela colaboração em minha formação;

Ao PPGMMat pela oportunidade;

A CAPES pelo suporte financeiro;

E a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

A tarefa não é tanto ver aquilo que ninguém viu, mas pensar o que ninguém ainda pensou sobre aquilo que todo mundo vê.
— ARTHUR SCHOPENHAUER

RESUMO

KANOPP DOS REIS, Jéssica. **Simulação Analítica da Dispersão de Poluentes Durante o Período de Transição Dia-Noite.** 2017. 114 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática. Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

Neste trabalho, um modelo analítico Euleriano é utilizado para simular a concentração de poluentes emitidos a partir de uma fonte pontual contínua durante o período de transição dia-noite. A análise aplica o modelo de dispersão parametrizado por coeficientes de difusão da camada limite estável e camada pré-residual. As simulações da concentração são realizadas considerando diferentes intervalos de tempos no processo de transição durante o pôr do sol e altura da CLE de 60m e 120m. Os resultados apresentados neste trabalho mostram semelhanças com aqueles encontrados na literatura onde a ação da mistura turbulenta gerada pelo decaimento da energia convectiva na camada pré-residual causa uma transferência efetiva dos poluentes para o interior da camada limite estável. Analisando as concentrações para uma altura de 60m, temos que durante o estágio inicial do período de transição, no qual a camada estável apresenta pouca profundidade, a combinação entre turbilhões convectivos e estáveis que agem eficientemente para transportar os poluentes em direção a superfície. Para o estágio posterior, a altura da camada estável alcança a altura da fonte pontual tal que a dispersão ocorre numa extensão vertical mais profunda que é dominada pela turbulência estável. Para a altura da CLE de 120m, ocorre o mesmo comportamento que para a altura de 60m, para as fases posteriores não há diminuição da concentração na superfície à medida que ocorre a perda da capacidade de difusão convectiva dentro da camada pré-residual e o aumento da altura da CLE. A falta de uma mistura turbulenta efetiva, agindo na extensão vertical da camada limite estável, impede que os poluentes cheguem a superfície. Este trabalho tem no seu foco principal uma descrição analítica da dispersão de poluentes ocorrendo em torno do pôr do sol, a qual permite simular o transporte turbulento de forma computacionalmente eficiente.

Palavras-chave: Camada limite planetária, Camada limite estável, Camada residual, Dispersão de poluentes, Solução analítica Euleriana.

ABSTRACT

KANOPP DOS REIS, Jéssica. **Analytical simulating of pollutant dispersion during sunset transition time.** 2017. 114 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática. Universidade Federal de Pelotas, Pelotas.

In this work, an analytical Eulerian model was employed to simulate the pollutants concentration released from continuous point source during the sunset transition period. The analysis applies the dispersion model parameterized by the stable and decaying convective eddy diffusivities, representing the turbulent mixing in the stable boundary layer and pre-residual layer. The concentration simulations were calculated considering different times in the transition process through the sunset period and CLE height of 60m and 120m. The results presented in this work show similarity with ones reported by literature, where the mixing strong action caused by the decaying convective energy-containing eddies in the pre-residual layer causes an effective entrance of pollutants to the interior of the recently established SBL. Analyzing the concentrations for a height of 60m, we have to during the initial stage of the transition period, in which the SBL presents a small depth, the combination between residual convective and stable eddies acts efficiently to transport the pollutants in direction to the ground surface. For the later stages, the height of the SBL depth reaches the point source height so that the dispersion occurs in a large vertical extension that is dominated by a stable turbulence. For CLE height of 120m, happen same behavior for height of 60m, for the after phases there is not surface decrease concentration according as occurs the loss convective diffusion capacity inside pre-residual layer and the CLE height increase. The lack of an effective turbulent mixing, acting over the vertical extension of the SBL, prevents that pollutants do reach the surface. In the present contribution was focused on an analytical description of the pollutant dispersion occurring around the evening transition, which allows simulate the turbulent transport in a computationally efficient procedure.

Keywords: Planetary boundary-layer, stable boundary layer, residual layer, pollutant dispersion, Eulerian analytical solution.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Modelo <i>on-line</i> e <i>off-line</i>	22
Figura 2	Estrutura térmica da atmosfera (média horizontal).	30
Figura 3	Estrutura da troposfera (STULL, 1988).	30
Figura 4	Estrutura espacial da CLP.	31
Figura 5	Evolução temporal da Camada Limite Planetária (STULL, 1988).	32
Figura 6	Diferença entre o comportamento de uma pluma dispersa na CLE e outra na CR (STULL, 1988).	34
Figura 7	Formato das plumas (ARYA, 1999).	35
Figura 8	Decaimento dos coeficientes de difusão turbulenta para a camada pré-residual.	54
Figura 9	Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 60m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente conforme as alturas da CLE.	58
Figura 10	Perfil de concentração na distância $x = 1000m$ para altura da fonte de 60m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.	59
Figura 11	Campo de concentração integrada (plano x-z) do modelo Lagrangeano para emissão na altura de 60m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente conforme as alturas da CLE.	60
Figura 12	Perfil de concentração do modelo Lagrangeano na distância $x = 1000m$ para altura da fonte de 60m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.	61
Figura 13	Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 120m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente conforme as alturas da CLE.	64

Figura 14	Perfil de concentração na distância $x = 1000m$ para altura da fonte de $120m$, altura da camada limite estável de $35m$, $50m$, $60m$, $70m$ e $80m$, respectivamente, e tempo de evolução de $900s$, $1800s$, $2700s$, $3600s$ e $4500s$, respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.	65
Figura 15	Campo de concentração integrada (plano x-z) do modelo Lagrangeano para emissão na altura de $120m$, altura da camada limite estável de $35m$, $50m$, $60m$, $70m$ e $80m$, respectivamente, e tempo de evolução de $900s$, $1800s$, $2700s$, $3600s$ e $4500s$, respectivamente conforme as alturas da CLE.	66
Figura 16	Perfil de concentração do modelo Lagrangeano na distância $x = 1000m$ para altura da fonte de $120m$, altura da camada limite estável de $35m$, $50m$, $60m$, $70m$ e $80m$, respectivamente, e tempo de evolução de $900s$, $1800s$, $2700s$, $3600s$ e $4500s$, respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.	67

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Evolução da altura da CLE de acordo com a expressão ($h = 70\sqrt{t}$). . . 55

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

A, B	matrizes de coeficientes do problema transformado
A_k	pesos da quadratura Gaussiana
<i>ADMM</i>	Advection Diffusion Multilayer Method
\bar{c}_n, \bar{c}_i	coeficientes da expansão por série na GILTT
<i>CLA</i>	Camada limite atmosférica
<i>CLC</i>	Camada limite convectiva
<i>CLE</i>	Camada limite estável
<i>CN</i>	Camada limite neutra
<i>CLN</i>	Camada limite noturna
<i>CLP</i>	Camada limite planetária
<i>CLS</i>	Camada limite superficial
<i>CM</i>	Camada de mistura
<i>CR</i>	Camada residual
c'	componente turbulenta da concentração de um contaminante (g/m^3)
\bar{c}	concentração média do contaminante passivo (g/m^3)
<i>ECM</i>	energia cinética média
<i>ECT</i>	energia cinética turbulenta
<i>EDO</i>	equações diferenciais ordinárias
F	Parâmetro de flutuabilidade
g	constante gravitacional
<i>GIADMT</i>	Generalized Integral Advection-Diffusion Multilayer Technique
<i>GILTT</i>	Generalized Integral Laplace Transform Technique
<i>GITT</i>	Generalized Integral Transform Technique
h	altura da CLA
H_s	altura da fonte (m)
I	matriz identidade

k	constante de Von-Kármán
K_x	coeficiente de difusão na direção x (m^2/s)
K_y	coeficiente de difusão na direção y (m^2/s)
K_z	coeficiente de difusão na direção z (m^2/s)
L	comprimento de Monin-Obukhov (m)
L_x	distância da condição de contorno para a direção x
L_y	distância da condição de contorno para a direção y
M	ordem da quadratura Gaussiana
N	número de autovalores
\bar{p}	densidade média
p'	perturbação da pressão
P_k	raízes da quadratura Gaussiana
Q	taxa de emissão
r	variável transformada ($x \rightarrow r$)
S	termo fonte
s	variável transformada ($t \rightarrow s$)
t	tempo (s)
v	componente da velocidade do vento na direção y (m/s)
v'	componente turbulenta do vento na direção y (m/s)
\bar{v}	velocidade média do vento na direção y (m/s)
V_g	velocidade de deposição (m/s)
u	componente da velocidade do vento na direção x (m/s)
u_*	velocidade de fricção (m/s)
u'	componente turbulenta do vento na direção x (m/s)
\bar{u}	velocidade média do vento na direção x (m/s)
\bar{u}_1	velocidade média do vento analisada na altura z_1 (m/s)
w	componente da velocidade do vento na direção z (m/s)
w_*	velocidade convectiva (m/s)
w'	componente turbulenta do vento na direção z (m/s)
\bar{w}	velocidade média do vento na direção z (m/s)
x	distância longitudinal da fonte (m)
X	matriz dos autovetores da matriz F de coeficientes do problema transformado
X^{-1}	matriz inversa de X

y	distância latitudinal da fonte (m)
$Y(x, s)$	vetor incógnita do problema transformado
$\bar{Y}(r, s)$	transformada de Laplace aplicada em $\bar{Y}(X, s)$
z	altura acima da superfície (m)
z_i	altura da camada limite convectiva (m)
z_0	comprimento de rugosidade aerodinâmico (m)
$3D - GILTT$	Three-dimensional Generalized Integral Laplace Transform Technique
θ	temperatura potencial
ε	termo de dissipação de energia turbulenta
ζ	parâmetro de estabilidade
γ	intensidade da turbulência
$\delta(x)$	função delta de Dirac
α	constante de Kolmogorov
ν	viscosidade cinemática
η	variável auxiliar
λ_n	autovalores do problema de Sturm-Liouville
ζ_n	autofunção do problema de Sturm-Liouville

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	18
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
2.1 Tipos de Modelos de qualidade do ar	21
2.2 Estudo da Camada Residual	26
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	29
3.1 Descrição da CLP	29
3.2 Decomposição de Reynolds	36
3.3 Energia Cinética Turbulenta	36
3.4 Velocidade de Fricção	37
3.5 Velocidade Convectiva	38
3.6 Comprimento de Monin-Obukhov	38
4 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO	39
4.1 Modelo físico-matemático	39
4.2 Solução via GILTT	42
5 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA	47
5.1 Parametrização da turbulência na CLE	47
5.2 Parametrização da turbulência na Camada pré-residual	48
5.2.1 Densidade de energia para uma equação dinâmica	48
5.2.2 Aplicação ao caso convectivo da CLP	50
5.2.3 Cálculo dos espectros de decomposição 1D	51
5.2.4 Comparação dos resultados LES com variância na velocidade	51
5.2.5 Derivação da decomposição convectiva do coeficiente de difusão vertical e comparação com os dados LES	51
5.3 Perfil do Vento	52
6 RESULTADOS	54
7 CONCLUSÕES	68
REFERÊNCIAS	71
8 APÊNDICE A - POLLUTANT DISPERSION SIMULATION DURING SUNSET TRANSITION TIME USING AN ANALYTICAL EULERIAN MODEL	80
9 APÊNDICE B - ESTUDO EULERIANO DO DECAIMENTO DA CLP	87

**10 ANEXO A - SIMULATING THE CHARACTERISTIC PATTERNS OF
THE DISPERSION DURING SUNSET PBL 102**

1 INTRODUÇÃO

Nos últimos anos percebe-se o aumento de interesse pelo estudo de modelos matemáticos, capazes de considerar topografias irregulares, bem como diversos fenômenos físicos e químicos envolvidos no processo de dispersão atmosférica. Isto se deve, em parte, ao aumento da velocidade de processamento associada a diminuição dos valores dos equipamentos computacionais. A isso também poderíamos acrescentar as grandes dificuldades de se reproduzir em laboratório, num modelo em escala muito reduzida, a maioria das condições presentes na atmosfera real. Os modelos físicos e os experimentos de campo em escala real continuam indispensáveis para o estudo desses fenômenos, visando o aperfeiçoamento dos modelos matemáticos e a sua validação. O controle da qualidade do ar requer instrumentos capazes de extrapolar no espaço e no tempo os valores medidos, enquanto a melhoria da atmosfera pode ser obtida somente com planos que reduzem as emissões e, então, com instrumentos (como o modelo matemático de dispersão na atmosfera) capazes de ligar a causa (a fonte) de poluição com o efeito (a concentração do poluente) (MOREIRA; TIRABASSI, 2004).

Os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes é de tal complexidade que não é possível descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos. Tais modelos matemáticos são capazes de: simular e interpretar os dados de experimentos; controlar em tempo real e/ou analisar a qualidade do ar; administrar as liberações acidentais e avaliar as áreas de riscos; identificar as fontes poluidoras; avaliar a contribuição de uma única fonte à carga poluidora; administrar e planejar o território (MOREIRA; TIRABASSI, 2004).

Os modelos matemáticos que determinam as propriedades da atmosfera e o seu efeito sobre o(s) poluente(s) são denominados modelos de dispersão. Eles representam uma importante ferramenta de investigação dos transportes de poluentes desde que sejam validados através de observações detalhadas da dispersão atmosférica. A aproximação Euleriana para modelagem das concentrações de poluentes é muito utilizada no campo de estudos da poluição atmosférica, pois somente os parâmetros Eulerianos são medidos. Sendo esta medição feita por um instrumento cuja posição é fixa com relação ao fluxo.

A modelagem da dispersão na atmosfera é mais valiosa para a indústria quando utilizada progressivamente como uma ferramenta de gerenciamento do que em resposta a restrições regulamentares. A modelagem da poluição do ar pode ser usada para: projetar uma fábrica de modo a minimizar os impactos da descarga, selecionando adequadamente altura e posição das chaminés; planejar programas de redução das emissões; planejar medidas de prevenção e

diminuição de danos para minimizar as consequências de descargas acidentais de grandes quantidades de materiais tóxicos (SEIGNEUR, 1992).

Desta forma, a previsão dos níveis de concentração de poluentes é um requisito indispensável para determinar possíveis danos a serem provocados por novas fontes ou mesmo por fontes existentes a serem modificadas. Neste âmbito, a modelagem matemática é uma ferramenta importante para a obtenção (cálculo) dessas previsões.

Algumas limitações são encontradas no decorrer deste projeto, podendo-se citar a não existência de trabalhos que utilizem um modelo analítico para a resolução de problemas com fonte pontual contínua durante o período de transição dia-noite. Sendo assim, a dispersão de poluentes por escoamentos turbulentos é de importância central em um número de problemas ambientais. Porém, menos atenção tem sido dada à dispersão na camada pré-residual, onde a difusão de poluentes ocorre em condições de decaimento da turbulência convectiva. O decaimento da energia dos grandes turbilhões na Camada limite convectiva (CLC) é o mecanismo físico que pode sustentar o processo de dispersão na camada pré-residual.

O objetivo deste trabalho é investigar o processo de dispersão turbulenta que ocorre durante o período do pôr do sol, avaliando os padrões característicos da dispersão turbulenta de poluentes liberados de uma fonte pontual contínua em uma camada limite planetária (CLP) caracterizada pelo decaimento convectivo. Esta análise considera uma solução analítica da equação advecção-difusão, na qual os efeitos turbulentos são representados por coeficientes de difusão para a camada limite estável (CLE) e para o decaimento da turbulência na CLC.

Para simular a dispersão turbulenta durante o período do pôr do sol é utilizado um procedimento analítico em vez de uma solução numérica. É fornecida uma solução de forma fechada, que pode ser adaptada para aplicações em métodos numéricos para reproduzir a solução dentro de uma precisão prescrita. Como consequência, a análise de erro é reduzida em comparação as aproximações numéricas (BUSKE et al., 2012b).

Existem duas abordagens para representar o fluxo e a difusão em um fluido: a Euleriana e a Lagrangiana. A principal diferença entre os dois modelos é o sistema referencial, ou seja, o sistema de referência Euleriano é fixo em relação à Terra, enquanto o Lagrangiano segue a velocidade instantânea do fluido. Os modelos Eulerianos são de caráter determinístico, isto é, predizem a concentração média de um poluente em um volume, enquanto que os modelos Lagrangianos são probabilísticos, tal que, predizem a probabilidade que uma dada partícula seja encontrada em uma dada posição. Neste trabalho é utilizado a abordagem Euleriana.

O modelo Euleriano analítico é obtido pelo uso da técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*), que será empregada para simular a concentração de contaminantes perpendicular à direção preferencial do vento (*cross-wind*), emitidos a partir de uma fonte pontual contínua de 60 m e 120 m, assim como a determinação dos perfis destas concentrações.

A partir de argumentos físicos e motivado pela escassez de estudos experimentais bem como pela falta de dados de concentração de poluentes durante o processo de evolução dia-noite, o transporte turbulento ocorrendo no momento de transição é investigado neste estudo. Portanto, o objetivo principal deste tra-

balho é simular os padrões característicos da dispersão de poluentes emitidos a partir de uma fonte pontual contínua em uma CLP difusiva, caracterizada pelo decaimento de energia convectiva na camada pré-residual. Esta análise, será baseada na metodologia apresentada por CARVALHO et al. (2010), utilizando um modelo numérico Lagrangiano de deslocamento aleatório.

Este estudo encontra-se estruturado em 7 capítulos. No Capítulo 2 encontra-se uma revisão bibliográfica sobre os principais estudos na área de dispersão de poluentes, sendo feita uma revisão geral sobre os modelos utilizados no estudo do transporte da poluição atmosférica e o estudo da CR. No capítulo 3 é descrito sobre a CLP destacando-se a estrutura difusiva da camada pré-residual e a definição de alguns conceitos básicos. No capítulo 4 é estudado o modelo matemático utilizado para a obtenção da solução do problema proposto. No capítulo 5 é descrita a parametrização da turbulência na camada limite estável (CLE) e na camada pré-residual, e o perfil do vendo utilizado. No capítulo 6 apresentam-se os resultados obtidos com o modelo. Estes resultados são comparados com a solução de um problema similar, Lagrangeano, que é utilizado para validar os resultados aqui encontrados (CARVALHO et al., 2010). Conclusões e perspectivas para a continuação deste trabalho são discutidas no capítulo 7.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na literatura é encontrada um número considerável de soluções numéricas da equação de difusão-advecção (NIEUWSTADT; VAN, 1978), (LAMB, 1978), (CARVALHO, 1996). Todavia, a busca por soluções analíticas para problemas de dispersão ainda é uma das principais direções de pesquisa nesta área. Durante a solução analítica, todos os parâmetros aparecem explícitos, o que facilita a investigação de suas influências e do seu comportamento assintótico da solução.

Nesta seção será feita uma revisão dos tipos de modelo de qualidade do ar dando ênfase aos modelos de natureza analítica e semi-analítica. Também é realizada uma breve revisão sobre os estudos voltados para a análise de difusão turbulenta na Camada Residual.

2.1 Tipos de Modelos de qualidade do ar

A complexidade do estudo do transporte dos poluentes a partir de modelos de simulação computacional fica muitas vezes comprometida pela necessidade de computadores com alto desempenho, tanto em termos de velocidade de processamento como em memória disponível. A estas dificuldades, podemos acrescentar a necessidade de métodos numéricos mais otimizados, que permitam a aceleração na convergência dos resultados. Por esses motivos foram desenvolvidos vários modelos com características distintas, tanto em formulação como aplicação para o problema.

Matematicamente, as concentrações de poluentes podem ser modeladas a partir da equação da conservação da massa, momento e energia termodinâmica, configurando-se como um dos principais problemas da área da micrometeorologia (STULL, 1988). Este conjunto de equações é reescrito de forma que represente os movimentos de microescala que governam o transporte de poluentes na camada limite atmosférica (CLA) e, ao mesmo tempo, sejam úteis para a extração das informações para o problema original (HOLTON, 2004) (ARYA, 1999).

Os modelos podem ser separados em duas grandes famílias: modelos diagnósticos, geralmente usados como pré-processadores, que interpolam medidas efetuadas no domínio do cálculo baseados na equação da continuidade, como é o caso dos modelos Minerve (GEAI, 1987) e CALMET (SCIRE, 1999); e modelos prognósticos, que integram o conjunto de equações da conservação da massa, quantidade de movimento, energia cinética turbulenta, umidade e calor, nos quais o objetivo não é apenas reconstruir perfis de vento ou de outras variáveis, mas prever a evolução do fenômeno de transporte. Como exemplos

de modelo prognóstico de nova geração pode-se citar: CCATT-BRAMS e WRF-CHEM (SKAMAROCK, 2005).

Modelos utilizados para simulações do transporte de poluentes lançados na atmosfera costumam ser classificados também em relação ao sistema de referência adotado e as hipóteses assumidas: modelo Euleriano e modelo Lagrangeano. O modelo Euleriano que em sua formulação considera um ponto fixo no espaço, podendo ser resolvido tanto numericamente, discretizando as equações (PASQUILL, 1974) (PASQUILL; SMITH, 1983) ou analiticamente e semi-analiticamente, com o uso de técnicas que envolvem transformadas integrais (MOREIRA et al., 2011) (MOREIRA, 1999). A formulação Lagrangeana, na qual o referencial segue o movimento de cada partícula ou conjunto de partículas e as equações são resolvidas numericamente, simulando os movimentos aleatórios e descontínuos do fluxo (HOWARD, 1996), ou semi-analiticamente, por exemplo, segundo o método ILS (Iterative Langevin Solution) (CARVALHO et al., 2005a) (CARVALHO; VILHENA, 2005).

Existem ainda as soluções chamadas Gaussianas que consideram coeficientes de difusão constantes e aproximam a distribuição espacial do poluente a uma curva gaussiana por meio de parâmetros de dispersão empíricos obtidos a partir das variáveis micrometeorológicas (ARYA, 1999).

Os modelos numéricos que contemplam a solução da química e do transporte de gases e os aerossóis interligados com a solução do estado atmosférico, representam o estado da arte em uma modelagem acoplada da atmosfera, como visto na Fig. 1. Tais modelos são comumente denominados como modelos interligados (*on-line*). Neste modelo, a utilização de um sistema único de coordenadas espaciais e a utilização de parametrizações físicas do modelo atmosférico faz com que o transporte das partículas de aerossol e gases sejam consistente com o modelo atmosférico em si e minimizando os erros numéricos associados às interpolações (FREITAS; LONGO; RODRIGUES, 2009).

Os modelos numéricos que resolvem à química e transporte de gases e aerossóis independentes da solução do estado atmosférico são conhecidos como desacoplados (*off-line*). Os modelos desacoplados são computacionalmente menos onerosos em relação aos modelos interligados e podem ser usados, por exemplo, para análises de sensibilidade de mecanismos químicos, em situações nas quais o impacto da meteorologia é mínimo. Porém, os modelos desacoplados apresentam erros numéricos associados à interpolação em (x, y, z, t) , o que pode levar, dentre outros problemas, à violação da conservação de massa (FREITAS; LONGO; RODRIGUES, 2009).

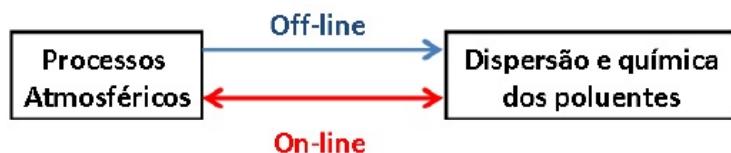


Figura 1: Modelo *on-line* e *off-line*.

Finalmente, os modelos podem ser classificados segundo sua escala espacial, como: modelo em escala global, no qual o domínio de cálculo é um hemisfério ou o planeta inteiro, reconstruindo a circulação em grande escala e utilizado para avaliar transporte a longo alcance; modelos de mesoescala, que são

aplicados a escalas de 100 a qualquer milhar de quilômetros e que modelam fenômenos em escalas de horas ou dias; e modelos regionais, utilizados em escalas de dezenas ou centenas de quilômetros. Pode-se, ainda, considerar os modelos de escala local que são aplicados em áreas de dezenas de metros a poucos quilômetros, utilizados principalmente para modelagem da dispersão próximo à fonte do poluente (MOREIRA; TIRABASSI; MORAES, 2008a).

A primeira solução da equação de difusão-advecção foi uma solução Gaussiana, devido a Adolf Eugen Fick (Fick), na metade do século XIX. Para este tipo de solução, o coeficiente de difusão na direção z (K_z) e a velocidade do vento são constantes com a altura, sendo consideradas as condições de contorno de fluxo nulo de poluentes na parte inferior e superior da CLP:

$$K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0 \text{ e } z \rightarrow \infty \quad (1)$$

onde \bar{c} representa a concentração média da concentração.

ROBERTS (1923) apresentou uma solução bidimensional para fontes superficiais, considerando a velocidade do vento e o coeficiente de difusão vertical K_z (m^2/s) seguindo leis de potência como uma função de altura, ou seja:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m ; K_z = K_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (2)$$

onde z_1 é a altura na qual u_1 e K_1 são analisados, m e n estão relacionados com a instabilidade atmosférica e a rugosidade da superfície, respectivamente, e variam entre 0 e 1 (IRWIN, 1979).

ROUNDS (1955) obteve uma solução bidimensional válida apenas para fontes elevadas, considerando perfis lineares K_z .

SMITH (1957a) resolveu a equação bidimensional de transporte e difusão, considerando u e K_z funções de potência da altura com os expoentes seguindo a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$). SMITH (1957b) apresentou uma solução considerando u constante e K_z é dado por:

$$K_z = K_0 z^\alpha (z_i - z)^\beta \quad (3)$$

onde K_0 é uma constante, α e β variam entre 0 e 1, conforme a altura da camada limite convectiva z_i .

SCRIVEN; FISHER (1975) usaram uma solução para o transporte de longa escala, sendo amplamente usada no Reino Unido, considerando u constante e K_z dado por:

$$K_z \equiv z \text{ para } 0 \leq z \leq z_t \text{ e } K_z = K_z(z_t) \text{ para } z_t \leq z \leq z_i \quad (4)$$

onde $z_t(m)$ é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada superficial).

YEH; HUANG (1975) e BERLYAND (1975) apresentaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com u e K_z determinados por perfil de potência, mas para uma atmosfera sem contorno superior ($K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0$ em $z \rightarrow \infty$), tendo soluções obtidas em termos de funções de Green. Na Itália, quatro modelos são baseados na solução de YEH; HUANG (1975) e BERLYAND (1975): KAPPAG

(TIRABASSI; TAGLIAZUCCA; PAGGI, 1989), KAPPAG-LT (TIRABASSI; TAGLIAZUCCA; PAGGI, 1989), CISP (TIRABASSI; RIZZA, 1992) e MAOC (TIRABASSI; RIZZA, 1993).

DEMUTH (1978) apresentou uma solução em termos de funções de Bessel, considerando uma camada vertical limitada ($K_z \frac{\partial C}{\partial z} = 0$ em $z = z_i$).

VAN ULDEN (1978) derivou uma solução para difusão vertical, obtendo perfis de u e K_z a partir da teoria de similaridade de *Monin-Obukhov*. Com a solução, (VAN ULDEN, 1978) obteve resultados similares aos de ROBERTS (1923) considerando uma aplicação para emissões dentro da camada limite superficial. Esta mesma solução foi utilizada no modelo SPM (TIRABASSI; RIZZA, 1995).

NIEUWSTADT (1980), obteve uma solução para um problema unidimensional dependente do tempo, no qual utilizou os polinômios de Legendre e o coeficiente de difusão dado por:

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

onde G_c é uma constante e u_* é uma velocidade de fricção. NIEUWSTADT; HAAN (1981) estenderam a mesma solução para o caso que ocorre evolução da altura da camada limite, utilizando os polinômios de Jacobi. Por sua vez, CATALANO (1982) estendeu a solução para o caso de perfis de vento vertical não-nulo.

KOCH (1989) apresentou uma solução analítica bidimensional para uma fonte em superfície, na qual o vento e as difusividades seguem os perfis de potência, e os efeitos de deposição na superfície é considerado.

CHRYSIKOPOULOS; HILDEMANN; ROBERTS (1992) desenvolveram uma solução tridimensional para o transporte de emissões sem empuxo a partir de uma fonte aérea contínua em superfície, onde u e K_z seguem os perfis dados pela Eq. (2) e o processo de decomposição seca é considerado.

SHARAN; SINGH; YADAV (1996a) e SHARAN et al. (1996b) desenvolveram modelos matemáticos para a dispersão tridimensional, utilizando coeficientes de difusão constantes e parametrizações em termos da distância da fonte. As soluções foram obtidas em termos de funções de Bessel e combinações lineares da função de Green.

A equação de difusão-advecção pode ser resolvida por vários métodos analíticos, onde não há aproximações ao longo da derivação da solução, ou por métodos híbridos, chamados semi-analíticos, que resolvem uma parte do problema analiticamente, normalmente por meio da Transformada de Laplace, e parte numericamente. Neste trabalho, são de interesse particular as soluções analíticas obtidas pela aplicação da técnica da transformada de Laplace e da técnica da transformada integral generalizada. É garantida a existência e unicidade de uma solução analítica para equação de difusão-advecção pelo teorema de Cauchy-Kowalewsky (COURANT; HILBERT, 1989). Estas soluções analíticas podem ser expressas na forma integral ou como uma formulação em séries, sendo matematicamente equivalentes (MOREIRA et al., 2008). A seguir, será dado enfoque aos modelos que utilizam essas técnicas para obter a solução analítica da equação de difusão-advecção.

O método ADMM (*Advection Diffusion Multilayer Method*), que foi introduzido

por VILHENA et al. (1998), é baseado na discretização da camada limite planetária (CLP) em N subcamadas. Este método é resolvido aplicando a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica, considerando-se valores médios para o coeficiente de difusão e perfil de vento. Assim, há a substituição de um problema com coeficientes variáveis por um conjunto de problemas com coeficientes constantes que são acoplados por condições de continuidade de concentração e fluxo de contaminantes nas interfaces. Alguns trabalhos publicados utilizando essa técnica são: (MOREIRA et al., 2005d), (MOREIRA et al., 2006b) e (BULIGON; MOREIRA; VILHENA, 2006).

O método GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) é um método híbrido analítico-numérico (COTTA, 1993), (COTTA; MIKHAYLOV, 1997) derivado da transformação integral clássica (MIKHAYLOV; ÖZİSK, 1984) para problemas lineares de difusão, que combina uma expansão em séries com uma integração. Nessa expansão, é utilizada uma base de autofunções determinadas por um problema auxiliar contendo o operador diferencial principal do problema original. A integração é feita em todo o intervalo da variável transformada, fazendo proveito da propriedade de ortogonalidade da base usada na expansão. Como resultado, obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias (*EDO*), também chamado de problema transformado que, uma vez solucionado por sub-rotinas numéricas, é invertido para a obtenção do resultado da equação original. Foram vários trabalhos publicados utilizando essa técnica: (CHEROTO et al., 1999), (LIU et al., 2000), (RIBEIRO et al., 2000), (RIBEIRO et al., 2002a), (MAGNO; MACÊDO; QUARESMA, 2002), (PEREIRA et al., 2002), (ALVES; COTTA; PONTES, 2002), (VELLOSO et al., 2003), (STORCH; PIMENTEL, 2003), (VELLOSO et al., 2004), (STORCH; PIMENTEL, 2005), (COTTA; BARROS, 2007) e (GUERRERO et al., 2012).

COSTA et al. (2006) resolveram a equação de advecção-difusão tridimensional utilizando a técnica GITT em conjunto com o método ADMM, recebendo assim, o nome GIADMT (*Generalized Integral Advection-Diffusion Multilayer Technique*). O método consiste em transformar o problema tridimensional em um problema bidimensional pela técnica da GITT na variável y , tal que, o problema bidimensional resultante é resolvido pelo método ADMM, discretizando a CLP. As aplicações do método GIADMT pode ser encontrada nos trabalhos (COSTA et al., 2006), (VILHENA et al., 2008), (COSTA; TIRABASSI; VILHENA, 2010) e (COSTA et al., 2012).

WORTMANN et al. (2005) apresentaram uma solução analítica nova para a equação de advecção-difusão bidimensional com coeficientes de difusão variáveis com a altura. Sendo uma aplicação da técnica GITT em problemas de poluição atmosférica, de forma totalmente analítica, recebendo assim, o nome de GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). A solução de problemas diferenciais parciais pelo método GILTT se dá nas seguintes etapas: Na etapa inicial a concentração de poluentes é expandida em série, em termos de um conjunto de funções ortogonais, obtidas da solução de um problema auxiliar de Sturm-Liouville. Substituindo esta expansão na equação de advecção-difusão estacionária, e integrando em todo o domínio, resulta em um sistema de EDO's, chamado de problema transformado, que uma vez solucionado, é facilmente invertido para a obtenção do resultado da equação original, no qual é resolvido analiticamente. O método GILTT é analítico no sentido de que ne-

nhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, exceto pelo erro de truncamento da solução em série para fins de cálculos numéricos. A aplicação do método GILTT pode ser encontrada nos trabalhos de: (WORTMANN et al., 2005), (MOREIRA et al., 2006), (BUSKE et al., 2007a), (BUSKE et al., 2007b), (TIRABASSI et al., 2008), (TIRABASSI et al., 2009), (MOREIRA et al., 2009b), (MOREIRA; VILHENA; BUSKE, 2009) e (SCHUCH et al., 2011).

Em 2009, surgiu o método 3D-GILTT (*Three-dimensional Generalized Integra Laplace Transform Technique*), que foi aplicado a uma classe abrangente de problemas de dispersão de poluentes na atmosfera, onde inclui os problemas que consideram o coeficiente de dispersão dependente do tempo. Maiores detalhes do método 3D-GILTT podem ser encontrados nos trabalhos: (BUSKE et al., 2009a), (BUSKE; VILHENA; MOREIRA, 2009b), (BUSKE et al., 2011b), (BUSKE et al., 2011c), (BUSKE et al., 2012a), (BUSKE et al., 2012b) e (VILHENA et al., 2012b).

2.2 Estudo da Camada Residual

A turbulência da CLP é um fenômeno físico complexo controlado pela ação de diferentes forçantes (SORBJAN, 2007). A produção de turbulência ocorre por cisalhamento do vento, que produz turbulência mecânica ou cisalhamento gerado, ou por convecção flutuante (empuxo), produz turbulência convectiva. A turbulência mecânica é dominante no caso onde os ventos fortes sopram sobre superfícies rugosas e em condições de estabilidade quase neutras. O cisalhamento do vento médio e o cisalhamento gerado pela turbulência estão fortemente próximos à superfície e geralmente decaem com aumento da altura sobre a superfície. A turbulência Convectiva é dominante no caso onde os ventos fracos sopram sobre uma superfície aquecida, isto é, nas condições convectivas.

Um exemplo importante de turbulência está associado ao processo que ocorre diariamente na CLP ao decorrer do pôr-do-sol. Aproximadamente 1 hora antes do pôr-do-sol, o fluxo de calor na superfície diminui progressivamente e, então, torna-se negativo durante a noite e, consequentemente, uma CLE desenvolve-se junto à superfície (PINO et al., 2006). Acima da CLE, na CR, os turbilhões convectivos começam a perder intensidade e capacidade de mistura e, assim, a CLC começa a decair.

O decaimento da turbulência na CLC foi investigado por GOULART et al. (2003), usando a equação para o espectro de energia turbulenta e por NIEUWSTADT; BROST (1986) e SORBJAN (1997), empregando modelo de simulação dos grande turbilhões LES (*Large-Eddy Simulation*). Além disso, CAUGHEY; KAIMAL (1977), GRANT (1997), ANFOSSI; DEGRAZIA; GOULART (2004), PINO et al. (2006), CARVALHO et al. (2010) e NADEAU et al. (2011) apresentaram alguns resultados experimentais durante o período de transição dia-noite.

CAUGHEY; KAIMAL (1977) realizaram medições dos fluxos verticais de movimento, calor, perfis de velocidade do vento e temperatura na CLP, considerando aspectos do fluxo de calor e variação nas primeiras centenas de metros acima do solo, representando condições convectivas livres de nuvens. Além disso, os dados obtidos durante a transição da noite para condições estáveis foram utilizados para ilustrar a ruptura da camada limite convectiva.

NIEUWSTADT; BROST (1986) estudaram o decaimento turbulento convectivo

na CLA quando o fluxo de calor diminui progressivamente para zero no decorrer do pôr-do-sol. Este decaimento turbulento da energia cinética e a variância da escala de temperatura de tempo $t_* = \frac{t}{t_c}$, onde $t_c = \frac{z_i}{w_*}$, w_* é a velocidade convectiva e z_i é a altura da CLC, apresentam evidências de uma dissociação entre grande escala e pequena escala durante o decaimento.

SORBJAN (1997) considerou o caso de uma diminuição gradual ao longo do tempo do fluxo de calor da superfície, concluindo que durante o decaimento os vórtices turbulentos continuam a existir mesmo quando o fluxo de calor da superfície torna-se negativo e, consequentemente, ocorre o desenvolvimento de uma inversão de temperatura junto a superfície.

GRANT (1997) trabalhou com medições obtidas no período do pôr-do-sol que foram utilizadas para avaliar o desenvolvimento inicial da camada limite estável noturna (CLN). Os dados foram coletados por um sistema de balão cativo no qual é particularmente conveniente para este tipo de estudo, pois proporciona obter perfis dados em vários níveis ao longo da CLP.

GOULART et al. (2003) desenvolveram um modelo teórico para estudar o decaimento da turbulência anisotrópico em uma CLC. Este modelo baseia-se na equação do espectro de energia dinâmica em que a flutuabilidade e os termos de transferência de inércia são retidos.

ANFOSSI; DEGRAZIA; GOULART (2004) estudaram o decaimento da turbulência baseados em observações conduzidas em túneis de vento e, mais recentemente, com experimento de simulações dos grandes turbilhões. Observações da turbulência, obtidas durante o eclipse solar de 11 de Agosto de 1999 foram considerados. Foi utilizado um anemômetro e um sensor de temperatura para o registro das observações de turbulência. Observações em termos do decaimento da energia cinética turbulenta mostraram boa concordância com modelos teóricos do decaimento da turbulência. Verificou-se que o expoente da lei de potência que descreve o processo de decaimento tem o valor -2.

PINO et al. (2006) estudaram o papel da intensidade do cisalhamento do vento e da inversão de temperatura no decaimento da turbulência convectiva durante o pôr-do-sol sobre o continente, que foi sistematicamente estudado por meio de simulações dos grande turbilhões . Em geral, as escalas de comprimento crescem durante o decaimento, pois as flutuações de pequena escala se dissipam mais rapidamente do que as flutuações de grande escala. Durante o decaimento, apenas a escala da velocidade vertical permanece quase constante.

CARVALHO et al. (2010) utilizaram um modelo de partícula estocástico Lagrangeano para estudar processo de difusão ocorrendo durante o período de pôr-do-sol. O modelo foi utilizado para calcular a concentração perpendicular da direção do vendo (*cross wind*) emitidos a partir de uma fonte pontual contínua, o modelo foi parametrizado pelas relações propostas por DEGRAZIA et al. (2000), para a CLE, e relações propostas por GOULART et al. (2007), para a CR. O estudo mostrou que os efeitos de difusão associados ao decaimento dos turbilhões convectivos influenciam na dispersão de escalares durante o período do pôr-do-sol.

NADEAU et al. (2011) estudaram o decaimento da energia cinética turbulenta (ECT) na camada superficial convectiva, onde a ECT é dependente da taxa de dissipação turbulenta e das flutuações na superfície. Neste estudo, o fluxo de calor sensível foi estimado sem a necessidade de resolver a energia superficial,

tendo como interesse o período do decaimento turbulento convectivo da camada limite. O primeiro período de transição estudado foi a tarde, quando o fluxo de calor sensível diminui, sendo associado a uma taxa de decaimento da ECT de aproximadamente t^{-2} . O outro período estudado foi no início da noite, pois um pouco antes do anoitecer, o fluxo de calor na superfície torna-se negativo.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A concentração de um poluente depende fundamentalmente das condições meteorológicas em uma dada região. Por isso, o conhecimento das condições atmosféricas, principalmente próximo à superfície, é imprescindível no estudo no transporte e difusão de poluentes. Nas sub-seções que seguem, serão apresentados detalhes a respeito das características da CLP e, também, as principais variáveis micrometeorológicas. Os textos são baseados em ARYA (1995), STULL (1988) e NUNES (2008).

3.1 Descrição da CLP

A origem etimológica da palavra troposfera (tropo-sfera) é grega - *trópos+sphaîra*, e significa, globo em mudança. Nesta camada da atmosfera desenvolvem-se os processos relacionados ao tempo e ao clima. A troposfera estende-se da superfície a uma altitude média de 11 km, mas somente os primeiros quilômetros são influenciados pela superfície da terra. A troposfera é a camada da atmosfera mais importante para a meteorologia, concentrando $\frac{3}{4}$ da massa total da atmosfera. Uma parcela de ar pode percorrer toda a extensão vertical da troposfera em poucos dias, ou mesmo em poucos minutos, quando forçada por uma corrente ascendente associada a uma tempestade. Em média, a temperatura diminui $6,5^{\circ}\text{C}$ por quilômetro de altitude, desde a superfície até ao limite superior da troposfera, na tropopausa, onde o gradiente vertical de temperatura sofre uma inversão. Analisando a figura 2, onde ocorre à distribuição vertical da temperatura, é possível identificar a estrutura vertical da atmosfera, considerando quatro camadas distintas: troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera.

Especificamente a troposfera esta dividida em duas sub-camadas: a camada limite planetária (CLP) e atmosfera livre. A CLP estende-se desde a superfície até aproximadamente 3 km e a atmosfera livre, por sua vez, estende-se do topo da CLP até a tropopausa como ilustrado na figura 3.

A CLP é a porção inferior da troposfera que interage diretamente com a superfície subjacente e responde às forçantes superficiais tais como os fluxos de calor, umidade, momentum, emissão de poluentes e modificações de fluxo induzidas pelo terreno, em uma escala de tempo de uma hora ou menos (STULL, 1988). A CLP pode ainda ser definida como a camada de ar acima da superfície da Terra, na qual os efeitos da superfície têm sentidos diretamente numa escala de tempo menor do que um dia, e na qual fluxos de momentum, calor e massa são transferidos pelos movimentos turbulentos numa escala da ordem da

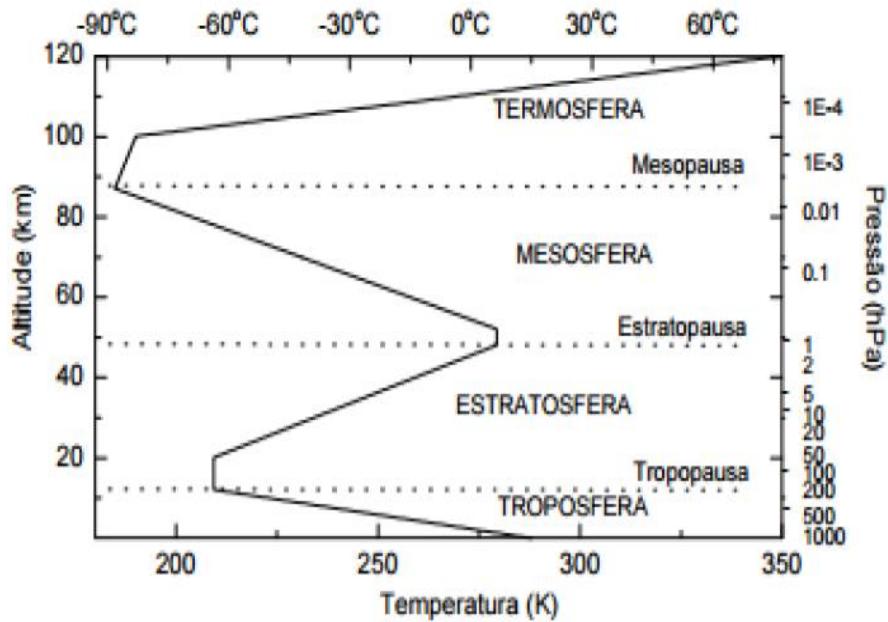


Figura 2: Estrutura térmica da atmosfera (média horizontal).

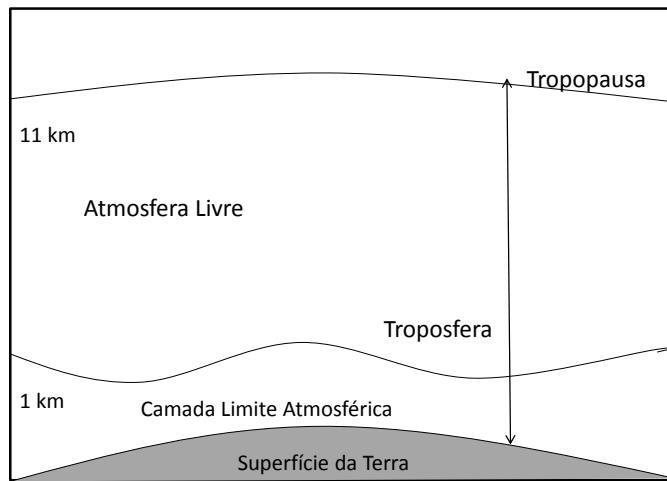


Figura 3: Estrutura da troposfera (STULL, 1988).

profundidade da CLP ou menor. Algumas propriedades da CLP, tais como, profundidade, turbulência, distribuições de vento e temperatura, entre outras, são determinadas a partir de um conjunto de propriedades físicas e térmicas da superfície em questão e da dinâmica e termodinâmica da troposfera local (ARYA, 2003). Nessa camada, o transporte é dominado na horizontal pelo vento médio e na vertical pela turbulência.

A espessura da CLP varia de 100 a 3000 m de altura a partir da superfície,

dependendo das condições de turbulência e estabilidade da atmosfera, sendo considerada uma função direta dos forçantes térmicos e mecânicos. A CLP possui um comportamento essencialmente turbulento, devido à ação de forças de atrito viscoso e de fluxos verticais de calor (NUNES, 2008). O escoamento de ar na CLP pode ser dividido em três categorias: vento médio, turbulência e ondas. Cada um pode existir separadamente ou na presença de qualquer um dos outros. Todos podem existir na CLP, onde o transporte de quantidades tais como umidade, calor, momentum e poluentes são dominados pelo vento médio na horizontal e pela turbulência na vertical.

O vento médio é responsável pelo transporte rápido na horizontal (advecção). A rugosidade da superfície da terra influencia a velocidade do vento, ocasionando valores menores junto à superfície. Os ventos médios na direção vertical são menos intensos em comparação com os ventos na direção horizontal (da ordem de *mm* a *cm* por segundo). Ondas, as quais são frequentemente observadas na CLN, transportam pouco calor, umidade e outros escalares como poluentes; são, contudo, efetivas para o transporte do momentum e energia. Podem ser geradas localmente pelo cisalhamento do vento médio e pelo escoamento médio sobre obstáculos. A turbulência ocorre normalmente próxima à superfície da Terra e esta é uma das características que torna a CLP diferente do resto da atmosfera. Fora da camada limite, a turbulência é encontrada em nuvens convectivas e nas proximidades de correntes de jato, onde ocorrem intensos cisalhamentos do vento.

A CLP possui características que variam com a altura, e portanto, pode ser classificada, a partir da superfície, como: 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), como ilustrado na Figura 4.

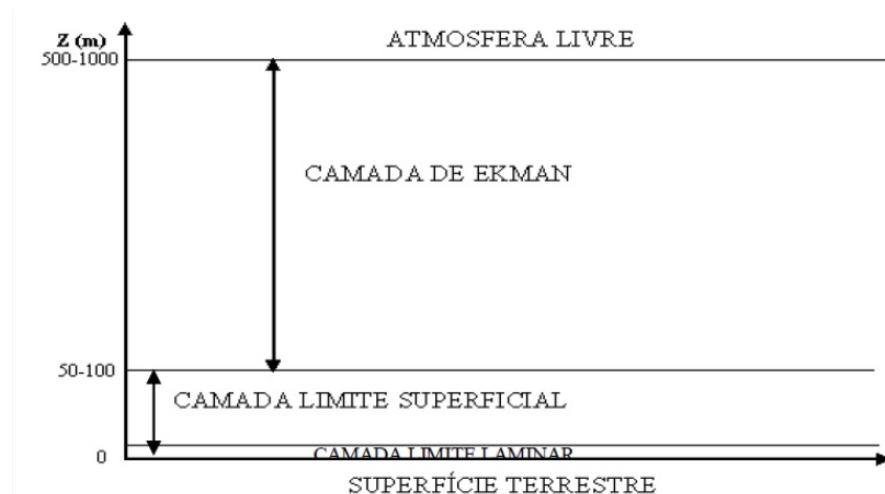


Figura 4: Estrutura espacial da CLP.

A CLP pode ser classificada em três categorias, de acordo com a condição de

estabilidade: neutra, instável ou convectiva e estável. A determinação destas categorias pode ser feita através da taxa de variação de temperatura com a altura. Na CLP neutra, a taxa de variação de temperatura potencial é nula, de forma que a atmosfera nem inibe nem intensifica a turbulência. A CN ocorre, principalmente, durante o período de transição do dia para a noite. A condição instável ou convectiva da CLP é provocada pelo aquecimento diurno da superfície e, devido à circulação convectiva, alcança uma espessura de 1000 à 3000 m. Neste caso, a taxa de variação de temperatura potencial é negativa, ou seja, a temperatura potencial diminui com a altura. Isto indica uma atmosfera instável, onde a turbulência é intensificada. A condição estável da CLP é, ao contrário, determinada pelo resfriamento noturno da superfície da terra e alcança uma altura de 100 à 300 m. Nesta condição, a taxa de variação de temperatura é positiva, ou seja, a temperatura aumenta com a altura (inversão de temperatura). Isto implica em uma atmosfera estável, onde a intensidade da turbulência é reduzida. O estudo da CLP é de particular interesse da micrometeorologia e engloba, dentre outros assuntos, o fenômeno da dispersão de poluentes atmosféricos.

STULL (1988) descreve um modelo conceitual da evolução diurna de uma camada limite sobrejacente à uma superfície terrestre e sob ação de um sistema de alta pressão. Esse modelo apresenta uma estrutura bem definida e característica da CLP, em um padrão diurno e um noturno, como ilustrado na figura 5.

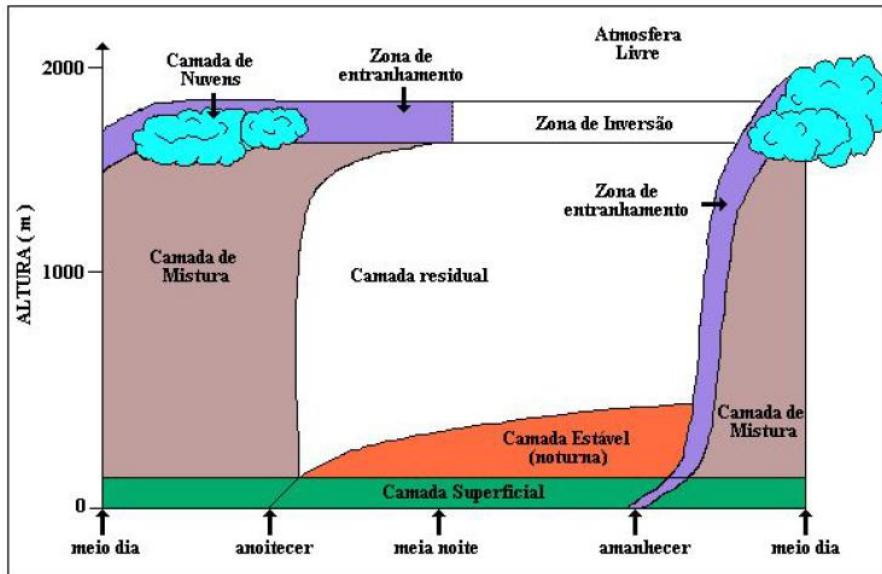


Figura 5: Evolução temporal da Camada Limite Planetária (STULL, 1988).

Existente em todo o ciclo, uma camada limite superficial (CLS) que é definida como aquela região acima da superfície da terra, na qual a variação vertical dos fluxos turbulentos de calor e momentum é negligenciada (variam menos do que 10% de sua magnitude). A profundidade da camada superficial varia, aproximadamente, de 10 m (em condições estáveis durante a noite) até 100 m (em condições instáveis durante o dia). O perfil de temperatura na camada super-

ficial é caracterizado por uma diminuição da temperatura com a altura, durante o dia, e por um aumento da temperatura com a altura durante a noite (inversão de temperatura). Os parâmetros importantes na camada superficial são a altura, a tensão de cisalhamento superficial e o fluxo de calor na superfície (NUNES, 2008).

A camada de mistura (CM) é a região central da CLC. Na CM, os perfis verticais de velocidade do vento e de temperatura são aproximadamente constantes, sendo uma consequência da forte mistura produzida pela convecção (turbulência térmica). A altura da camada de mistura ou altura da CLC e o fluxo de calor na superfície são as grandezas importantes na camada de mistura, podendo alcançar uma altura de 100 à 3000 m. A CM é marcada pela convecção e pela sua forte turbulência, devido ao aquecimento do solo, dando origem às correntes termais. A CM inicia-se instantes após o nascer do sol e desenvolve-se sob a ação de fluxos de calor. Em razão da sua forte turbulência, essa camada é muito favorável aos processos de mistura, que tendem a homogeneizar as diversas propriedades da atmosfera. Essa camada tem na parte superior a zona de entranhamento, que é uma subcamada estável no seu topo, e a camada de inversão, sendo caracterizada por uma inversão térmica, que restringe os movimentos verticais na CLA.

No período da noite forma-se a camada limite estável (CLE) ou a camada limite noturna (CLN) que inicia sua formação normalmente meia hora antes do pôr-do-sol, devido ao resfriamento da superfície terrestre. Esse resfriamento provoca um fluxo de calor negativo que extrai energia cinética dos grandes turbilhões. Sob estas condições a altura da CLE pode variar a partir de poucas dezenas de metros, em baixas velocidades do vento, até várias centenas de metros, em altas velocidades do vento. O perfil de temperatura na camada superficial é caracterizado por uma inversão de temperatura e é influenciado pelas condições meteorológicas e pelas propriedades físicas da superfície, como a capacidade e condutividade térmica. Os parâmetros importantes da camada estável é a altura, a tensão de cisalhamento e o fluxo de calor, sendo também caracterizada pela sua estabilidade estática e supressão da turbulência térmica. Entretanto, a ocorrência de jato de baixos níveis noturno, devido ao fenômeno de oscilação inercial, pode induzir turbulência mecânica ocorrendo como pulsos (STULL, 1988). Essa camada alcança uma altura de 100 a 300 m e é formada por pequenos turbilhões que agem localmente.

A camada limite convectiva (CLC) é provocada pelo aquecimento diurno da superfície, formando termas de ar quente que se elevam, modificando o topo da CLP. Aproximadamente meia hora antes do pôr-do-sol, as termas cessam, o que permite o decaimento da turbulência. Pouco antes do pôr-do-sol ocorre um decaimento dos grandes turbilhões que formam a CLC, resultando em uma Camada Residual (CR). Na ausência de advecção, traçadores passivos dispersados durante o dia dentro da camada de mistura permanecerão durante a noite na CR. Na Camada Residual, a turbulência existente é aproximadamente igual em todas as direções (isotropia). Como resultado, plumas de fumaça emitidas dentro da CR tendem a se dispersar em razões iguais nas direções lateral e vertical, apresentando uma forma cônica, como ilustrado na Figura 6.

A Camada Residual não está em contato com a superfície, mas tem sua base modificada pelo avanço da CLE, que surge durante a noite. O restante da CR não

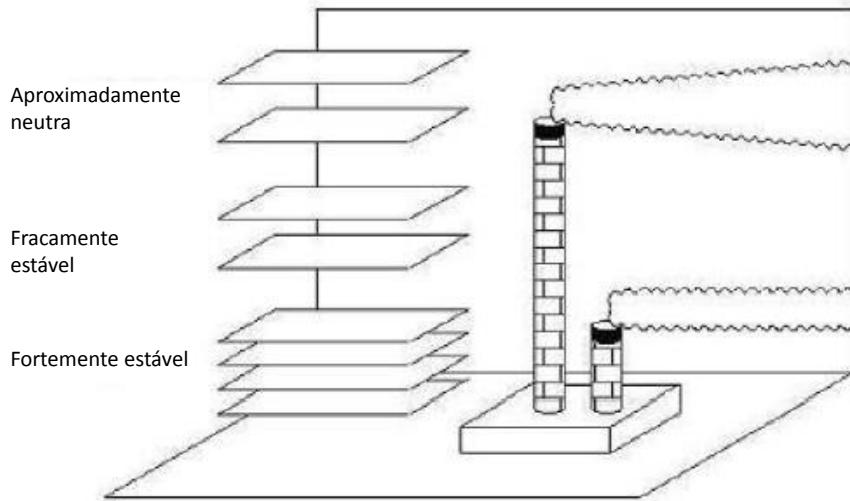


Figura 6: Diferença entre o comportamento de uma pluma dispersa na CLE e outra na CR (STULL, 1988).

é afetado pelo transporte das propriedades da superfície, o que faz com que esta camada não se adapte completamente às definições de CLP, as quais afirmam que a atmosfera é considerada uma CLP até a altura na qual há influência da superfície no escoamento do ar. Portanto, deve-se considerar a camada residual como uma exceção das regras nos estudos da CLP.

De acordo com NILSSON et al. (2016) a camada residual é definida como uma camada estaticamente neutra, caracterizada por turbulência esporádica fraca, que encontra-se acima da camada limite estável e abaixo da inversão de temperatura (capa de inversão), separando a camada limite da atmosfera livre. Por definição, ela desenvolve-se somente após a superfície começar a se estratificar de forma estável, em consequência da contínua diminuição do fluxo de calor sensível na superfície durante o período de transição dia-noite. É usual também denominar a região de turbulência fraca que existe durante condições instáveis, precedendo a camada residual, como camada pré-residual. Esta camada é limitada pela inversão da camada de mistura e não alcança a superfície, exceto pela estratificação neutra do fim da tarde ou da transição da noite. Este conceito de pré-residual é importante para explicar as condições iniciais da turbulência para a camada residual noturna.

A CLP tem forte influência sobre formato das plumas dos poluentes lançadas a partir de chaminés. A aparência vertical da pluma pode oferecer informações consideráveis sobre o transporte e a difusão dos poluentes na baixa atmosfera, podendo ser classificada em 6 categorias com ilustrado na Figura 7 e descritas nos subitens abaixo:

- A pluma no formato *looping* ocorre em condições muito instáveis e convecativas. A circulação induzida pelas termas faz com que o material da pluma serpenteie para cima e para baixo, gerando um formato de *looping*. Num

curto prazo, o ciclo descendente pode causar altas concentrações no solo em distâncias próximas da fonte;

- A pluma no formato *coning* ocorre em condições de céu nublado. A pluma apresenta um formato de cone com difusão lateral uniforme, tanto na vertical quanto na horizontal. Esta pluma é frequentemente associada com a passagem de uma tempestade ciclônica e, portanto, pode ocorrer durante o dia ou a noite;
- A pluma no formato *fanning* adquire a forma de um tubo angular, com uma grande propagação na horizontal e muito pouca propagação na vertical. Este formato de pluma é encontrado ocorre tipicamente durante a noite;
- A pluma no formato *lofting* ocorre acima da camada de inversão, no momento da transição do dia para a noite (entardecer). (Uma forte inversão da superfície desenvolve-se ao nível da pluma, evitando que o material de difusão descenda e que o material da pluma se concentre numa camada fina no topo da inversão);
- A pluma no formato *fumigation* ocorre logo após o nascer do sol quando a inversão noturna é dissipada devido o aquecimento da superfície, sendo lentamente substituído por uma camada instável que cresce até o topo da pluma. Devido a grande capacidade de mistura, a fumaça fica restrita a altura desta camada. A medida que a camada cresce, ela se espalha;
- A pluma no formato *trapping* ocorre em condições instáveis (fazendo com que as plumas fiquem presas ocupando toda a camada convectiva) e em condições neutras ou levemente estável abaixo da inversão.

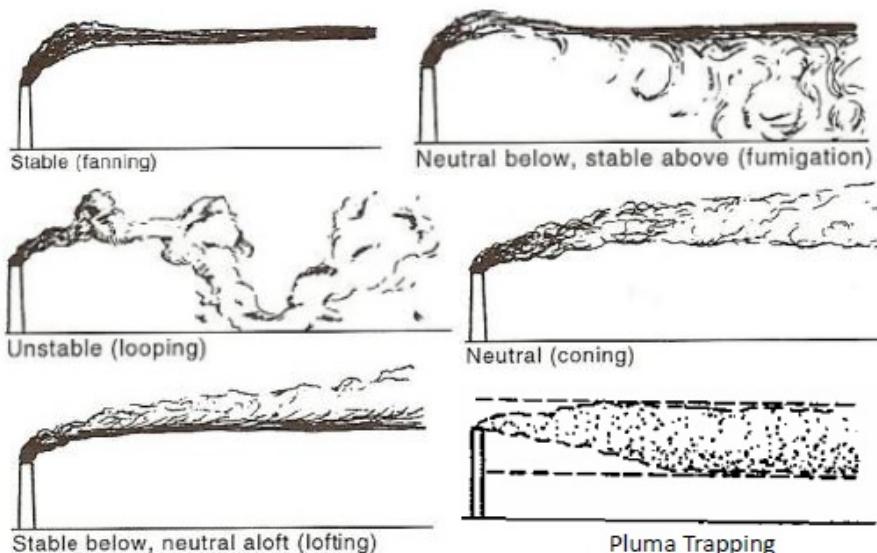


Figura 7: Formato das plumas (ARYA, 1999).

3.2 Decomposição de Reynolds

Em um fluido em regime turbulento, as grandezas possuem rápidas flutuações em torno de valores médios que evoluem lentamente. Por essa razão, estamos interessados em determinar estes valores médios, porém sem perder a informação sobre o efeito que a turbulência produz no escoamento.

Assim, as equações que descrevem a conservação do momento, massa e energia termodinâmica usadas na meteorologia de escalas maiores não podem ser usadas da mesma maneira para descrever movimentos na CLA. Ao invés disso, o conjunto de equações hidrodinâmicas é reescrito como a soma de sua média e uma flutuação quase-aleatória ou parte turbulenta:

$$\begin{aligned} A &= \bar{A} + a' \\ \bar{A} &= \overline{(\bar{A} + a')} \\ \bar{A} &= \overline{(\bar{A})} + \bar{a'} \\ \bar{A} &= \bar{A} \end{aligned} \tag{6}$$

onde \bar{A} representa a média temporal de A (variando no período de 30 minutos à uma hora (STULL, 1988)) e a' é a flutuação da variável.

Fazendo o produto de duas variáveis quaisquer, A e B , tem-se:

$$A \cdot B = (\bar{A} + a') \cdot (\bar{B} + b') = \bar{A}\bar{B} + \bar{A} \cdot b' + \bar{B} \cdot a' + a'b' \tag{7}$$

Se tomarmos a média deste produto, é possível obter:

$$\bar{A} \cdot \bar{B} = \overline{(\bar{A} + a') \cdot (\bar{B} + b')} = \overline{\bar{A}\bar{B}} + \overline{\bar{A} \cdot b'} + \overline{\bar{B} \cdot a'} + \overline{a'b'} \tag{8}$$

que resulta em

$$\bar{A} \cdot \bar{B} = \overline{\bar{A}\bar{B}} + a'b' \tag{9}$$

Isso ocorre devido ao fato que a média de uma perturbação é nula e a média do produto de perturbações não é necessariamente nulo, dando origem a variâncias e covariâncias. Em micrometeorologia, possuem um papel importante na descrição da turbulência e nos fluxos turbulentos de um escoamento médio. Tal procedimento é conhecido como decomposição de Reynolds ou média de Reynolds e implica que a média do produto de perturbações (termos não lineares) não seja necessariamente nula, uma vez que a turbulência, embora tenha a aparência de aleatoriedade, não seja um processo aleatório. Para maiores detalhes, sugere-se a leitura de STULL (1988) e KUNDU; COHEN (2002).

3.3 Energia Cinética Turbulenta

A energia cinética turbulenta é considerada uma das mais importantes variáveis descritivas de uma camada limite turbulenta. Da mesma forma como se define a energia cinética (em relação a massa e a velocidade de algum corpo

ou partícula), pode-se empregar a decomposição de Reynolds e definir a energia cinética média (ECM) e a energia cinética turbulenta (ECT) por unidade de massa. A energia cinética turbulenta média é dada de acordo com STULL (1988), da seguinte forma:

$$ECT = \bar{e} = \frac{\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2}}{2} \quad (10)$$

Na Eq. (10) há uma relação entre a turbulência e a variância dos componentes turbulentos do vento. Partindo das equações prognósticas de momentum, pode-se derivar uma expressão prognóstica para a energia cinética turbulenta. Fazendo uma simplificação por homogeneidade horizontal da ECT, alinhando o vento médio com o eixo x e negligenciando a subsidência, é possível obter a seguinte expressão (STULL, 1988):

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \overline{u'w'} \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{w'p'}}{\partial z} + \frac{g}{\theta} \overline{w'\theta'} - \frac{\partial \overline{(w'e)}}{\partial z} - \varepsilon \quad (11)$$

onde g é a constante gravitacional, θ é a temperatura potencial, ρ é a densidade média, p' é a perturbação da pressão e ε é o termo de dissipação de energia turbulenta. Da esquerda para a direita a definição de cada um dos termos da Eq. (11) é: variação local de ETC, termo de produção/perda mecânica devido ao gradiente do vento médio, termo de correlação de pressão (relacionando com oscilações, como as ondas de gravidade), termo de produção/perda térmica de transporte turbulento de ECT e por fim o termo de dissipação viscosa (conversão da energia cinética em calor).

A utilização de variáveis ou parâmetros de escala para descrever a turbulência na CLP é considerada uma prática bastante difundida e sua premissa está no fato que a estrutura da CLP é explicada em termos de alguns parâmetros característicos (HOLTSAG; NIEUWSTADT, 1986). Essas escalas características são obtidas através da Teoria de Similaridade, determinando relações empíricas que visam complementar o conhecimento físico da camada limite atmosférica (HOLTSAG; NIEUWSTADT, 1986); (STULL, 1988); (ARYA, 1999). Algumas escalas de uso mais recorrente são a velocidade de fricção (ou de atrito), a velocidade convectiva e o comprimento de Monin-Obukhov.

3.4 Velocidade de Fricção

A magnitude do Stress de Reynolds $\tau_{Reynolds}$ é uma variável importante relacionada à turbulência mecânica. O Stress de Reynolds pode ser definido como

$$\tau_{Reynolds} = [\tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2]^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

onde $\tau_{xz} = -\bar{\rho} \cdot \overline{u'w'}$ e $\tau_{yz} = -\bar{\rho} \cdot \overline{v'w'}$ são as componentes do fluxo vertical de momento horizontal na superfície.

Durante as situações onde a turbulência é gerada ou modulada por cisalhamento do vento, o Stress de Reynolds é uma variável de escala usada para definir a velocidade de fricção ou velocidade de atrito (STULL, 1988):

$$u_*^2 = \frac{|\tau_{Reynolds}|}{\bar{\rho}} \quad (13)$$

ou

$$u_* = \sqrt{\overline{u'w'}^2 + \overline{v'w'}^2} \quad (14)$$

3.5 Velocidade Convectiva

Durante o dia o aquecimento produz um fluxo de calor entre a superfície e a atmosfera. O empuxo associado a esse fluxo de calor alimenta o processo de convecção, dando origem às correntes termais. Embora o empuxo possa ser usado diretamente como uma variável de escala, é mais conveniente derivar uma escala de velocidade usando as variáveis empuxo e a altura da CLA (h). Combinando essas duas escalas, obtém-se a escala de velocidade convectiva:

$$w_* = \left[\frac{g z_i}{\theta} \overline{(w' \theta')} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (15)$$

Este parâmetro, com dimensão de velocidade, é particularmente útil na descrição da CLA convectiva por definir a ordem de magnitude de flutuações de grandes turbilhões térmicos.

3.6 Comprimento de Monin-Obukhov

Outro parâmetro essencial para a descrição da estrutura da turbulência na CLA é o comprimento de Monin-Obukhov, que está diretamente relacionado com a produção ou consumo de energia cinética turbulenta pelo empuxo. O parâmetro de estabilidade ζ é formulado pela expressão (STULL, 1988):

$$\zeta = \frac{z}{L} = - \frac{k z g(\overline{w' \theta'})}{\theta u_*^3} \quad (16)$$

onde L é o comprimento de Monin-Obukhov, k é a constante de Von Kármán relacionada ao perfil logarítmico do vento e ambos são baseados no termo de produção térmica da equação prognóstica da ECT, o valor de k está entre 0,35 e 0,42 (sendo 0,4 o valor mais utilizado).

O comprimento de Monin-Obukhov exprime a relação entre o fluxo turbulento de origem mecânica e convectiva, e é utilizado para avaliar o grau de estabilidade atmosférica. Fisicamente, L representa a altura na qual a turbulência mecânica se iguala à térmica. O parâmetro ζ é utilizado como uma escala em Teoria de Similaridade para a camada superficial, onde, sinal positivo implica em estabilidade e sinal negativo implica em instabilidade.

4 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

Neste capítulo, é apresentada a formulação matemática de um modelo de dispersão para poluentes e a sua respectiva solução. Para representar um fenômeno é necessário uma formulação matemática que o represente, só assim é possível realizar uma simulação de seu comportamento. Um modelo de dispersão de poluentes é uma formalização matemática capaz de simular o comportamento de um determinado poluente na atmosfera. O equacionamento matemático clássico é dado pela equação de advecção-difusão (ARYA, 1995).

4.1 Modelo físico-matemático

A equação que modela a advecção e difusão atmosférica pode ser obtida através da aplicação da equação de conservação de massa (equação da continuidade). Considerando uma espécie genérica c que se conserve na atmosfera (BLACKADAR, 1997), obtém-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} + S = 0 \quad (17)$$

sendo S o termo fonte e u , v e w as componentes das velocidades instantâneas do vento (m/s) nas direções x , y e z respectivamente.

Considerando os efeitos da turbulência nessa equação e utilizando a decomposição de Reynolds (STULL, 1988), que considera cada variável como a soma de sua parte média e flutuações, define-se as equações para a evolução média das variáveis:

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' \\ v &= \bar{v} + v' \\ w &= \bar{w} + w' \\ c &= \bar{c} + c' \end{aligned} \quad (18)$$

Substituindo (18) em (17), tem-se:

$$\frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial t} + (\bar{u} + u') \frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial x} + (\bar{v} + v') \frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial y} + (\bar{w} + w') \frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial z} + S = 0 \quad (19)$$

e aplicando as propriedades de derivação, a equação é escrita da forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial c'}{\partial x} + u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + u' \frac{\partial c'}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial c'}{\partial y} + \\ + v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + v' \frac{\partial c'}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w} \frac{\partial c'}{\partial z} + w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + w' \frac{\partial c'}{\partial z} + S = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

Antes de continuar com a dedução, reúnem-se algumas regras que compõem as médias temporais para um sistema Euleriano, como:

$$\bar{\bar{\phi}} = \bar{\phi}$$

$$\overline{\phi + \varphi} = \bar{\phi} + \bar{\varphi}$$

$$\overline{\bar{\phi} * \varphi} = \bar{\phi} * \bar{\varphi}$$

$$\overline{\frac{\partial \phi}{\partial t}} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t}$$

$$\overline{cte} = cte$$

$$\bar{\phi}' = 0 \text{ pois } \bar{\phi} = \overline{(\bar{\phi} + \phi')} \rightarrow \bar{\phi} = \bar{\phi} + \bar{\phi}' \text{ sendo assim } \bar{\phi}' = 0$$

Fazendo a média nos termos da Eq. (20), pode-se obter:

$$\begin{aligned} \overline{\frac{\partial \bar{c}}{\partial t}} + \overline{\frac{\partial c'}{\partial t}} + \overline{\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{\bar{u} \frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{\bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{\bar{v} \frac{\partial c'}{\partial y}} + \\ + \overline{v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{\bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{\bar{w} \frac{\partial c'}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial c'}{\partial z}} + S = 0 \end{aligned} \quad (22)$$

Simplificando a Eq. (22) e usando as afirmações (21), é possível escrever:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + u' \frac{\partial c'}{\partial x} + v' \frac{\partial c'}{\partial y} + w' \frac{\partial c'}{\partial z} + S = 0 \quad (23)$$

Antes de continuar, é necessário provar a seguinte igualdade:

$$\overline{u' \frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v' \frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{w' \frac{\partial c'}{\partial z}} = \overline{\frac{\partial u' c'}{\partial x}} + \overline{\frac{\partial v' c'}{\partial y}} + \overline{\frac{\partial w' c'}{\partial z}} \quad (24)$$

Para atingir a relação acima, o ponto de partida são as seguintes afirmações:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u' c'}{\partial x} &= u' \frac{\partial c'}{\partial x} + c' \frac{\partial u'}{\partial x} \\ \frac{\partial v' c'}{\partial y} &= v' \frac{\partial c'}{\partial y} + c' \frac{\partial v'}{\partial y} \\ \frac{\partial w' c'}{\partial z} &= w' \frac{\partial c'}{\partial z} + c' \frac{\partial w'}{\partial z} \end{aligned} \quad (25)$$

Portanto,

$$\frac{\partial(u' c')}{\partial x} + \frac{\partial(v' c')}{\partial y} + \frac{\partial(w' c')}{\partial z} = u' \frac{\partial c'}{\partial x} + v' \frac{\partial c'}{\partial y} + w' \frac{\partial c'}{\partial z} + c' \left(\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} \right) \quad (26)$$

Considerando um fluido incompressível e com densidade constante a equação da continuidade é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (27)$$

Realizando a decomposição de Reynolds, a Eq. (27):

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{u}+u')}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v}+v')}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{w}+w')}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial\bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial\bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial w'}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (28)$$

Aplicando a média nos termos da equação e considerando que a média de uma flutuação é igual a zero, por (21), escreve-se:

$$\frac{\partial\bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial\bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial\bar{w}}{\partial z} = 0 \quad (29)$$

Substituindo (29) em (28), obtém-se:

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0 \quad (30)$$

Após estas etapas, a afirmação contida em (26) pode ser reduzida na seguinte equação:

$$\frac{\partial(u'c')}{\partial x} + \frac{\partial(v'c')}{\partial y} + \frac{\partial(w'c')}{\partial z} = u'\frac{\partial c'}{\partial x} + v'\frac{\partial c'}{\partial y} + w'\frac{\partial c'}{\partial z} \quad (31)$$

Para provar a afirmação feita em (24), basta aplicar a média de Reynolds nos termos da Eq. (31):

$$\overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}} = \overline{\frac{\partial u'c'}{\partial x}} + \overline{\frac{\partial v'c'}{\partial y}} + \overline{\frac{\partial w'c'}{\partial z}} \quad (32)$$

Com isto, a Eq. (23) torna-se:

$$\frac{\partial\bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial\bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial\bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial\bar{c}}{\partial z} + \overline{\frac{\partial u'c'}{\partial x}} + \overline{\frac{\partial v'c'}{\partial y}} + \overline{\frac{\partial w'c'}{\partial z}} + S = 0 \quad (33)$$

onde os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam, respectivamente, o fluxo turbulento do contaminante (g/sm^2) na direção longitudinal, lateral e vertical. Como a turbulência domina os processos de transporte e dispersão, o termo de difusão molecular é desconsiderado.

Por ter quatro variáveis desconhecidas, a Eq. (33) cria um problema de fechamento da turbulência que, é solucionado pela hipótese de transporte por gradiente (Teoria K). Na Teoria K os fluxos de massa turbulentos de concentração é proporcional à magnitude do gradiente da concentração média (SEINFELD; PANDIS, 1997):

$$\begin{aligned} \overline{u'c'} &= -K_x \frac{\partial\bar{c}}{\partial x} \\ \overline{v'c'} &= -K_y \frac{\partial\bar{c}}{\partial y} \\ \overline{w'c'} &= -K_z \frac{\partial\bar{c}}{\partial z} \end{aligned} \quad (34)$$

Substituindo (34) em (33) e reorganizando os termos, a equação de advecção-difusão tridimensional é obtida da seguinte forma:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + S \quad (35)$$

A Eq. (35) representa a Equação de Advecção-Difusão, com fechamento Fickiano da turbulência para um sistema de coordenadas Cartesianas. O primeiro elemento é o termo transiente; os três seguintes são os termos advectivos, onde \bar{u} , \bar{v} e \bar{w} são as componentes médias do vento; após a igualdade temos os termos difusivos, onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão turbulentos; e o S é o termo fonte.

4.2 Solução via GILTT

Assumindo um fechamento Fickiano da turbulência, pode-se escrever a equação da seguinte forma (BLACKADAR, 1997):

$$\partial_t \bar{c} + U^T \nabla \bar{c} = \nabla^T (K \nabla \bar{c}) + S \quad (36)$$

onde $U = (\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ representa o vento médio (em unidades de m/s) com os componentes cartesianas nas direções x , y e z respectivamente. A difusividade turbulenta $K = \text{diag}(K_x K_y K_z)$ (em unidades de m^2/s) é representada por uma matriz diagonal com as componentes cartesianas nas direções x , y e z respectivamente. Na primeira ordem de fechamento, todas as informações sobre a complexidade turbulenta estão contidas na difusividade turbulenta. A Eq. (36) é considerada válida no domínio delimitado por $0 < x < L_x$, $0 < y < L_y$ e $0 < z < z_i$ e sujeito às seguintes condições (contorno, inicial e fonte):

$$K \nabla \bar{c}|_{(0,0,0)} = K \nabla \bar{c}|_{(L_x, L_y, z_i)} = 0 \quad (37)$$

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = 0 \quad (38)$$

$$\bar{u} \bar{c}(0, y, z, t) = Q \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - H_s) \quad (39)$$

onde Q é a taxa de emissão (em unidades de g/s), z_i a altura da CLP (em unidades de m), o H_s é a altura da fonte (em unidades de m), L_x e L_y são os limites horizontais do domínio (em unidades de m) e $\delta(x)$ representa a função delta de Dirac. O problema (36) tem solução pelo método 3D-GILTT (BUSKE et al., 2012a).

Nesta dissertação, assumimos inicialmente, sem perda de generalidade, que o transporte do poluente é realizado pela componente longitudinal da velocidade média do vento, que o fluxo turbulento é assumido não homogêneo apenas em relação à vertical, e que o tensor de difusividade turbulenta é diagonal ($K_{ij} = 0$ se $i \neq j$) (CARVALHO et al., 2010). Assim obtemos o seguinte problema bidimensional cujas condições são integradas lateralmente em y :

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (40)$$

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0, \quad z = z_i \quad (41)$$

$$\bar{c}(x, z, 0) = 0 \quad \text{em} \quad t = 0 \quad (42)$$

$$\bar{u}\bar{c}(0, z, t) = Q\delta(x - x_0)\delta(z - H_s) \quad \text{em} \quad x = 0 \quad (43)$$

O problema (40)-(43) será resolvido usando transformada de Laplace e o método GILTT. Para tanto, aplicando a transformada de Laplace na variável temporal na Eq. (40), obtém-se o seguinte problema estacionário:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - s\bar{c}(x, z, s) + \bar{c}(x, z, 0) \quad (44)$$

onde

$$\bar{c}(x, z, s) = \mathcal{L}\{\bar{c}(x, z, t); t \rightarrow s\}, \quad (45)$$

e como a condição inicial é $\bar{c}(x, z, 0) = 0$, a Eq. (44) torna-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = K_z \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - s\bar{c}(x, z, s) \quad (46)$$

Para resolver a Eq. (46) pela técnica GILTT, inicia-se com um problema auxiliar de Sturm-Liouville:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \zeta_n}{\partial z^2} + \lambda_n^2 \zeta_n(z) &= 0 \quad \text{em} \quad 0 < z < z_i \\ \frac{\partial \zeta_n(z)}{\partial z} &= 0 \quad \text{em} \quad z = 0 \\ \frac{\partial \zeta_n(z)}{\partial z} &= 0 \quad \text{em} \quad z = z_i \end{aligned} \quad (47)$$

A solução do problema (47) é analítica (para u e K constantes) e encontrada tabulada em ÖZISIK (1974), tendo a forma:

$$\zeta_n(z) = \cos(\lambda_n z) \quad \text{com} \quad \lambda_n = \frac{n\pi}{z_i} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (48)$$

Expandindo a concentração em função da base das autofunções dada em (48), tem-se:

$$c(x, z, s) = \sum_{n=0}^N \bar{C}_n(x, s) \zeta_n(z) \quad (49)$$

Para determinar $\bar{C}_n(x, s)$ basta substituir (49) em (46), obtendo:

$$\sum_{n=0}^N u \frac{\partial \bar{C}_n(x, s)}{\partial x} \zeta_n = \sum_{n=0}^N K_z \bar{C}_n(x, s) \frac{\partial^2 \zeta_n}{\partial z^2} + \sum_{n=0}^N \frac{\partial K_z}{\partial z} \bar{C}_n(x, s) \frac{\partial \zeta_n}{\partial z} - \sum_{n=0}^N s \bar{C}_n(x, s) \zeta_n \quad (50)$$

$$-\sum_{n=0}^N u \frac{\partial \bar{C}_n(x, s)}{\partial x} \zeta_n - \sum_{n=0}^N K_z \bar{C}_n(x, s) \lambda_n^2 \zeta_n + \sum_{n=0}^N \frac{\partial K_z}{\partial z} \bar{C}_n(x, s) \frac{\partial \zeta_n}{\partial z} - \sum_{n=0}^N s \bar{C}_n(x, s) \zeta_n = 0 \quad (51)$$

Em seguida, aplica-se o operador integral $\int_0^{z_i} (\cdot) \zeta_m dz$ na Eq. (51). Logo,

$$\begin{aligned} & -\sum_{n=0}^N \frac{\partial \bar{C}_n(x,s)}{\partial x} \int_0^{z_i} (u \zeta_n \zeta_m) dz - \sum_{n=0}^N \lambda_n^2 \bar{C}_n(x,s) \int_0^{z_i} (K_z \zeta_n \zeta_m) dz + \\ & + \sum_{n=0}^N \bar{C}_n(x,s) \int_0^{z_i} \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \frac{\partial \zeta_n}{\partial z} \zeta_m \right) dz - \sum_{n=0}^N s \bar{C}_n(x,s) \int_0^{z_i} (\zeta_n \zeta_m) dz = 0 \end{aligned} \quad (52)$$

Como o somatório é truncado em N termos, a Eq. (52) pode ser representada em forma matricial,

$$B \frac{\partial Y(x,s)}{\partial x} + EY(x,s) = 0 \quad (53)$$

Assumindo que a matriz B é não-singular, multiplica-se a equação (53) pela matriz inversa de B e obtém-se:

$$\frac{\partial Y(x,s)}{\partial x} + FY(x,s) = 0 \quad (54)$$

considerando

$$\begin{aligned} b_{n,m} &= -\int_0^{z_i} (u \zeta_n \zeta_m) dz \\ e_{n,m} &= -\lambda_n^2 \int_0^{z_i} (K_z \zeta_n \zeta_m) dz + \int_0^{z_i} \left(\frac{\partial K_z}{\partial z} \zeta_n \zeta_m \right) dz - s \int_0^{z_i} (\zeta_n \zeta_m) dz \\ F &= B^{-1}E \end{aligned}$$

$$B = \text{matriz } \{b_{n,m}\}$$

$$E = \text{matriz } \{e_{n,m}\}$$

$Y(x,s)$ é o vetor cujas componentes são as $\bar{C}_n(x,s)$

A EDO (54) é resolvida analiticamente pela técnica da transformada de Laplace e diagonalização. Sendo assim, inicialmente aplica-se a transformada de Laplace na variável x :

$$rY(r,s) - Y(0,s) + FY(r,s) = 0 \quad (55)$$

onde $Y(r,s) = \mathcal{L}\{Y(x,s); x \rightarrow r\}$.

Por diagonalização, é possível decompor a matriz F , tal que:

$$F = XDX^{-1} \quad (56)$$

onde D é a matriz diagonal de autovalores da matriz F ; X é a matriz dos autovetores e X^{-1} é a matriz inversa de X . Assim, a Eq. (55) pode ser reescrita na forma:

$$(rI + XDX^{-1})Y(r,s) = Y(0,s) \quad (57)$$

na qual $I = XX^{-1}$ é a matriz identidade. Após algumas manipulações algébricas, obtém-se:

$$Y(r,s) = X(rI + D)^{-1}\eta \quad (58)$$

onde $\eta = X^{-1}Y(0,s)$.

Para encontrar $Y(0,s)$ precisa-se encontrar $\bar{c}(0,z,s)$. Assim, aplicando o mesmo procedimento anterior na condição de fonte e fazendo a transformada de Laplace em relação a t , segue:

$$u(z)\bar{c}(0,z,s) = \frac{Q\delta(x-x_0)\delta(z-H_s)}{s} \quad (59)$$

onde

$$\bar{c}(0, z, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(0, s) \zeta_n(z) \quad (60)$$

ou seja,

$$u(z) \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(0, s) \zeta_n(z) = \frac{Q\delta(x - x_0)\delta(z - H_s)}{s} \quad (61)$$

Com a aplicação do operador integral $\int_0^{z_i} (\cdot) \zeta_m(z) dz$ na Eq. (61):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(0, s) \int_0^{z_i} u(z) \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz = \frac{Q\delta(x - x_0)}{s} \int_0^{z_i} \delta(z - H_s) \zeta_m(z) dz \quad (62)$$

Pela propriedade do funcional delta de Dirac, tem-se:

$$\int_0^{z_i} \delta(z - H_s) \zeta_m(z) dz = \zeta_m(H_s) \quad (63)$$

Assim

$$\bar{c}_m(0, s) \int_0^{z_i} u(z) \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz = \frac{Q\delta(x - x_0) \zeta_m(H_s)}{s} \quad (64)$$

Lembrando que $\zeta_n(z)$ é a solução do problema auxiliar de Sturm-Liouville.

Considerando

$$\int_0^{z_i} u(z) \zeta_n(z) \zeta_m(z) dz = A \quad (65)$$

obtém-se que:

$$Y(0, s) = \bar{c}_m(0, s) = \frac{Q\delta(x - x_0) \zeta_m(H_s)}{s} A^{-1} \quad (66)$$

Pela propriedade de Delta de Dirac:

$$\mathcal{L}\{\delta(t - a)\} = e^{-as} \quad (67)$$

Assim, com a aplicação da Transformada de Laplace em relação a x

$$Y(0, s) = \bar{c}_m(0, s) = \frac{Qe^{-x_0 r} \zeta_m(H_s)}{s} A^{-1} \quad (68)$$

Ainda nos resta calcular a transformada inversa de Laplace da Eq. (58), assim:

$$Y(x, s) = X \mathcal{L}^{-1}\{(rI + D)^{-1}; r \rightarrow x\} \eta \quad (69)$$

é observado que a matriz $(rI + D)$ é escrita como:

$$(rI + D) = \begin{bmatrix} r + d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r + d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & r + d_N \end{bmatrix} \quad (70)$$

onde d_N são os autovalores da matriz E , ou ainda, os elementos da matriz diagonal D . Prosseguindo, obtém-se a inversa da matriz diagonal $(rI + D)$ por propriedades da álgebra matricial, sendo escrita como:

$$(rI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r+d_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{r+d_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{r+d_N} \end{bmatrix} \quad (71)$$

Assim, realizando a inversão da transformada de Laplace de (71) e utilizando os resultados padrão da teoria da transformada de Laplace, (71) é escrita como:

$$\mathcal{L}^{-1}\{(rI + D)^{-1}\} = G(x, r) = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_N x} \end{bmatrix} \quad (72)$$

Com esse resultado, a variável $\bar{c}_n(x, z, s)$ é bem determinada.

Agora, é necessário aplicar a transformada inversa de Laplace em s para determinar $\bar{c}(x, z, t)$, ou seja

$$\bar{c}(x, z, t) = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{c}(x, z, s); t \rightarrow s\} \quad (73)$$

Esta inversão, por sua vez, é obtida numericamente através da quadratura de Gauss complexa (STROUD; SECREST, 1966), de tal forma que a solução da equação (40) é dada por:

$$\bar{c}(x, z, t) = \sum_{k=1}^M \frac{P_k}{t} A_k \sum_{n=1}^M \bar{c}_n \left(x, \frac{P_k}{t} \right) \zeta_n(z) \quad (74)$$

onde N é o número de termos do somatório da fórmula inversa da GILTT; A_k , P_k e M são, respectivamente, os pesos, as raízes e a ordem da quadratura considerada, e estão tabulados em STROUD; SECREST (1966).

5 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA

Nos modelos de difusão atmosféricos a escolha correta da parametrização turbulenta desempenha um papel chave para calcular a concentração de contaminantes na CLP. Portanto, a precisão de cada modelo para simular corretamente o campo de concentração de contaminantes é uma função direta dos parâmetros turbulentos que estão relacionados às propriedades dinâmicas e termodinâmicas da CLP. Os coeficientes de difusão são propriedades do fluxo turbulento e são descritos em termos de características físicas e magnitude da difusão em uma CLP (VENKATRAM et al., 2001). Nesta seção serão apresentadas uma formulação para a parametrização da turbulência na CLE e na camada pré-residual. Estas parametrizações serão aplicadas nos modelos de partículas Eulerianos para realizar as simulações de poluentes durante o período do pôr do sol.

5.1 Parametrização da turbulência na CLE

A dispersão da turbulência é gerada junto a superfície através de processos mecânicos que estão relacionados com o cisalhamento do vento. Em uma CLP estável existe uma relação entre a turbulência gerada pelo cisalhamento do vento e pelos efeitos de estratificação em uma camada estável. Portanto, nesta descrição da dispersão dos poluentes no período de transição dia-noite, uma camada superficial estável é considerada, na qual uma turbulência contínua e um fluxo de calor turbulento negativo coexistem (NIEUWSTADT, 1984). As seguintes relações para os coeficientes de difusão longitudinal, lateral e vertical, derivadas por DEGRAZIA et al. (2000), representam a difusão turbulenta dominadas por cisalhamento em uma CLP estável:

$$K_i = C_i \frac{(1 - z/h)^{3/4} u_*}{1 + 3,7 \left(\frac{z}{L(z-z/h)^{5/4}} \right)} \quad (75)$$

onde ($i = uvw$), em que $C_x = 4,94$, $C_y = 1,04$ e $C_z = 0,41$, L é o comprimento de Obukhov, u_* é a velocidade de fricção da camada de superfície e h é a altura da camada estável. As magnitudes de C_i indicam que o movimento vertical é fortemente limitada pela estratificação na CLP noturna.

5.2 Parametrização da turbulência na Camada pré-residual

Recentemente, um método geral para derivar os coeficientes de difusão turbulentos em uma CLC em decaimento foi proposto por GOULART et al. (2007). O método baseia-se em um modelo para a densidade de energia representado por uma equação dinâmica 3D e a teoria de difusão estatística de Taylor. Por conseguinte, é obtida uma solução analítica da equação em termos de um espectro inicial 3D, a qual se descreve o espectro da turbulência observada na CLC. Além disso, como consequência da decomposição da turbulência não isotrópica, este espectro é calculado a partir do espectro 1D, através da utilização de uma metodologia desenvolvida por KRISTENSEN et al. (1989). Na obtenção dos coeficientes de difusão longitudinal e lateral, o campo turbulento é considerado isotrópico. Já para o coeficiente de difusão vertical, a turbulência é considerada não-homogênea. Como o objetivo principal deste estudo é avaliar as características da difusão turbulenta para poluentes emitidos dentro da camada pré-residual, na sequência realiza-se uma solução mais detalhada do método proposto por GOULART et al. (2007).

5.2.1 Densidade de energia para uma equação dinâmica

A energia cinética turbulenta tridimensional (ECT 3D) é dado pela expressão:

$$\frac{\partial}{\partial t} E(k, t) = M(k, t) + W(k, t) + \frac{g}{T_o} H(k, t) - 2\nu k^2 E(k, t) \quad (76)$$

onde t é o tempo, k é o número de onda, $M(k, t)$ é o termo de efeito mecânico, $W(k, t)$ é o termo inercial, $H(k, t)$ é o termo de efeito termico e ν é a viscosidade cinemática.

Durante o decaimento da CLC, para uma primeira aproximação, os termos turbulentos de cisalhamento são desconsiderados e a turbulência é assumida como homogênea e isotrópica. Por conseguinte, a equação de ECT 3D é dada pela seguinte forma (STULL, 1988):

$$\frac{\partial}{\partial t} E(k, t) = W(k, t) - 2\nu k^2 E(k, t) \quad (77)$$

Um fluxo turbulento contém diferentes comprimentos de onda. Os pequenos turbilhões são submetidos à tensão gerada por grandes redemoinhos, o que aumenta a vorticidade dos pequenos turbilhões e energia cinética. Assim, ECT é transferida pelos grandes vórtices até que a micro-escala de Kolmogorov seja atingida, fazendo com que a energia seja dissipada em forma de calor, sendo representado pela expressão $W(k, t)$ da equação (77). Este termo foi parametrizado para um fluxo isotrópico turbulento com base na análise dimensional:

$$W(k, t) = -\frac{\partial}{\partial k} (\alpha^{-1} \varepsilon^{1/3} k^{5/3} E(k, t)) \quad (78)$$

onde α é a constante de Kolmogorov e ε é a taxa de dissipação molecular da ECT.

Substituindo (78) em (77), obtém-se:

$$\frac{\partial E(k, t)}{\partial t} + \alpha^{-1} \varepsilon^{1/3} k^{5/3} \frac{\partial E(k, t)}{\partial k} + \frac{5}{3} \alpha^{-1} \varepsilon^{2/3} k^{2/3} E(k, t) - 2\nu k^2 E(k, t) = 0 \quad (79)$$

Considerando os seguintes parâmetros adimensionais, em que w_* é a escala de velocidade convectiva e z_i é a altura da CLC, é possível escrever:

$$t_* = \frac{w_* t}{z_i}, \quad R_e = \frac{w_* z_i}{\nu}, \quad \psi_\varepsilon = \frac{\varepsilon z_i}{w_*^3} \quad (80)$$

Substituindo na Eq. (79), a equação é escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(k', t_*)}{\partial t_*} + \alpha^{-1} \psi_\varepsilon^{1/3} k'^{5/3} \frac{\partial E(k', t_*)}{\partial k'} + \frac{5}{3} \alpha^{-1} \psi_\varepsilon^{1/3} k'^{2/3} E(k', t) \\ - 2\nu (k')^{2/3} E(k', t_*) - \frac{2}{R_e} (k')^2 E(k', t_*) = 0 \end{aligned} \quad (81)$$

onde $k' = kz_i$.

Para resolver a Eq. (81) é utilizado o método das características que, considerando $t_* \rightarrow s_*$ e $K'(0) \rightarrow m$, obtém-se em $t_* = 0(m, 0, E(m))$:

$$s_*(t_*) = 1 \quad (82)$$

$$k'(s_*) = \alpha^{-1} \psi_\varepsilon^{1/3} k'^{5/3} \quad (83)$$

$$E(s_*) = - \left[\frac{5}{3} \alpha^{-1} \psi_\varepsilon^{1/3} k'^{2/3} \right] E(s_*) \quad (84)$$

$$s_*(0) = 0 \quad (85)$$

$$k'(0) = m \quad (86)$$

A partir da Eq. (82), a formulação é escrita como:

$$\frac{ds_*}{dt_*} = 1 \text{ ou } s_* = t_* \quad (87)$$

e pela Eq. (83), obtém-se:

$$\frac{dk'}{ds_*} = \alpha^{-1} \psi_\varepsilon^{1/3} k'^{5/3} \quad (88)$$

Através da solução da equação (88) e considerando as condições iniciais (85) e (86), é obtida a relação entre k' e m :

$$k' = \left(-\frac{2}{3} \alpha^{-1} \psi_\varepsilon^{1/3} s_* + m^{-2/3} \right)^{-3/2} \quad (89)$$

Ao substituir a Eq. (88) na Eq. (84) e considerando as condições iniciais (85) e (87), a seguinte equação é derivada:

$$\begin{aligned} E(m, s_*) &= E(m, 0) \left(\frac{(-2/3)\alpha^{-1}\psi_\varepsilon^{1/3}s_* + m^{-2/3}}{m^{-2/3}} \right)^{-3/2} \\ &\times \exp[((-2/3)\alpha^{-1}\psi_\varepsilon^{1/3}s_* + m^{-2/3})^{-2} - m^{4/3}] \end{aligned} \quad (90)$$

Substituindo m dada por (89) na Eq. (90) e considerando $s_* = t_*$ dada por (89), é dado o seguinte resultado:

$$E(k', t_*) = E(\xi, 0) \left(\frac{k'}{\xi} \right)^{-5/3} \exp \left(-\frac{3\alpha}{2R_e\psi_\varepsilon^{1/3}} ((k')^{4/3} - \xi^{4/3}) \right) \quad (91)$$

com $\xi = ((k')^{-2/3} + 2/3\alpha^{-1}\psi_\varepsilon^{1/3}t_*)^{-3/2}$, $\alpha = 1.5$ e $E(\xi, 0)$ é o tempo inicial ($t = 0$).

5.2.2 Aplicação ao caso convectivo da CLP

A equação dinâmica que descreve o fluxo turbulento é válida apenas no espaço 3D. Por conseguinte, o espectro de $E(k, 0)$, que representa o estado inicial da CLC na Eq. (91), é o espectro 3D turbulento.

Diferentemente de GOULART et al. (2002), é considerado aqui uma turbulência não-isotrópica e, como consequência, usa-se a formulação proposta por KRISTENSEN et al. (1989) para determinar o espectro inicial 3D. Esta formulação permite determinar o espectro 3D de um fluxo homogêneo turbulento a partir de um espectro 1D conhecido, considerando $\mu_2 = \mu_v = \mu_T = \frac{1}{2}$ no espectro obtido por KRISTENSEN et al. (1989) tem-se:

$$E_0(k, z) = k^3 \frac{d}{dk} \frac{1}{k} \frac{dF_u(k)}{dk} + 12A_i m_i B_i^{-17/6} k^4 \sum_{n=0}^3 C_n \int_{W_{1i}}^{\infty} \frac{Z_i^{3n-12}}{(Z_i^3-1)^5} dZ_i \quad (92)$$

$$- \frac{84}{9} A_i m_i B_i^{-3/2} k^{4/3} \sum_{n=0}^3 C_n \int_1^{W_{2i}} \frac{Z_i^{3n-12}}{(Z_i^3-1)^{n-5}} dZ_i$$

com

$$i = u, v, w; \quad W_{1i} = \left(1 + \frac{1}{\sqrt{B_i s}} \right)^{1/3}; \quad W_{2i} = (1 + \sqrt{B_i s})^{1/3};$$

$$A_i = a_i \left(\frac{1}{b_i} \right)^{5/6}; \quad m_u = 2; \quad m_v = m_w = -1; \quad C_0 = -\frac{55}{27}; \quad (93)$$

$$C_1 = \frac{70}{9}; \quad C_2 = -\frac{725}{72}; \quad C_3 = \frac{935}{216}; \quad A_i = a_i b_i^{-5/6}; \quad B_i = b_i^{-2}$$

De acordo com DEGRAZIA; ANFOSSI (1998), o espectro 1D inicial pode ser escrito como:

$$F_i(k, 0) = \frac{a_i}{(1 + b_i k)^{5/3}}, \quad i = u, v, w \quad (94)$$

onde

$$a_i = \frac{0.98}{2\pi} c_i \left(\frac{z}{z_i} \right)^{-5/3} z_i \psi_\varepsilon^{2/3} \omega_*^2 [(f_m)_i^c]^{-5/3} \quad \text{e} \quad b_i = \frac{1.5}{2\pi} \frac{z}{z_i} z_i \frac{1}{(f_m)_i^c} \quad (95)$$

com $c_i = \alpha_i (0.5 \pm 0.05) (2\pi k)^{-2/3}$, $\alpha_i = 1, 4/3$ para u, v e w , respectivamente $w_* = (u_*)_0 (-z_i/kL)^{1/3}$, $(f_m)_i^c = z/G_i z_i$, $G_u = 1.5$, $G_v = 1.5$ e $G_w = 1.8[1 - \exp(-4z/z_i) - 0.0003\exp(8z/z_i)]$.

5.2.3 Cálculo dos espectros de decomposição 1D

A CLC é não-isotrópica apenas na direção vertical, devido ao fluxo de calor na superfície. Assim, para calcular os componentes longitudinais e transversais considera-se a Eq. (91), que é válida em um campo isotrópico turbulento. Neste caso, o espectro inicial é dado pelas componentes u e v da Eq. (94).

Para calcular a componente w considera-se que, para um determinado instante de tempo t , existe uma relação entre os espectros 1D e 3D dada pela seguinte expressão:

$$F_w(k, t) = \alpha(k) \frac{(1/T) \int_0^t F_w(k, t') dt'}{(1/T) \int_0^t E(k, t') dt'} E(k, t) \quad (96)$$

onde a razão entre as duas integrais é uma função do peso que indica como o componente w participa na construção do espectro 3D. A constante $\alpha(k)$ é obtida a partir de dados experimentais que, fazendo uma comparação entre as expressões teóricas e dados de LES (NIEUWSTADT; BROST, 1986) o valor de $\alpha(k) = 1$ é determinado. Assim, a solução da Eq. (96) fornece o componente vertical, como uma função do espectro 3D:

$$F_w(k, t) = F_w(k, 0) \exp \left[\int_0^t Q'(k, t') dt' \right] \quad (97)$$

Neste caso, $F_w(k, 0)$ é dado na Eq. (94) onde

$$Q'(k, t') = \alpha(k) Q(k, t') + \frac{1}{Q(k, t')} \frac{\partial Q(k, t')}{\partial t'} \quad (98)$$

e $Q(k, t')$ é dado por

$$Q(k, t') = \frac{E(k, t')}{\int_0^t E(k, t') dt'} \quad (99)$$

5.2.4 Comparação dos resultados LES com variância na velocidade

A variação da velocidade do fluxo turbulento é calculada a partir da seguinte equação:

$$\sigma_i^2(t, z) = \int_0^\infty F_i(k, t, z) dk \quad (100)$$

onde o fluxo turbulento gerado por LES, proposto em NIEUWSTADT; BROST (1986), é caracterizado pelas escalas de comprimento e de velocidade, $z_i = 1350m$ e $w_* = 2.3ms^{-1}$, respectivamente, e os parâmetros do modelo são expressos em termos dessas escalas características.

5.2.5 Derivação da decomposição convectiva do coeficiente de difusão vertical e comparação com os dados LES

Os coeficientes de difusão calculados por BATCHELOR (1949) podem ser comparados com os da equação de advecção-difusão quando um fluxo turbulento homogêneo é considerado. Para grandes tempos, o coeficiente de difusão turbulento tem a seguinte forma(HANNA, 1981):

$$K_\alpha(t, z) = \frac{\pi}{3} \frac{B_i}{U} \frac{\sigma_i^2(t, z)}{(k_m)_i}, \quad \alpha = x, y, z \quad (101)$$

onde $(k_m)_i$ é o número de onda do pico espectral, U é a velocidade média do vento e B_i é definida como a relação entre as escalas de tempo Lagrangiano e Euleriano.

Considerando $\beta_i = 0.55(U/\sigma_i)$ (HANNA, 1981); (DEGRAZIA; ANFOSSI, 1998) na Eq. (101), a seguinte equação para coeficiente de difusão é determinada:

$$K_\alpha(t, z) = \frac{0.55\pi}{3} \frac{\sigma_i(t, z)}{(k_m)_i} \quad (102)$$

onde, $\sigma_i(t, z)$ é obtido a partir das Eqs. (91), (92), (94), (97) e (98).

NIEUWSTADT; BROST (1986) relataram que o espectro vertical para vários tempos adimensionais, tem valor máximo para $(k_m)_w z_i \approx 4$. Este resultado pode ser considerado para as componentes longitudinal e lateral (KAIMAL; WYNGLARD; HAGEN, 1976). Isto permite o cálculo da difusividade turbulenta média longitudinal, lateral e vertical da camada limite para diferentes tempos de t_* . As seguintes relações representam bons ajustes para os coeficientes de difusão em uma CLC em decaimento, calculados a partir das Eqs. (91), (92), (94), (97), (98) e (102):

$$\frac{K_x}{z_i w_*} = \frac{0.069}{\sqrt{1 + t_*^{1.44}}} \quad (103)$$

$$\frac{K_y}{z_i w_*} = \frac{0.079}{\sqrt{1 + t_*^{1.44}}} \quad (104)$$

$$\frac{K_z}{z_i w_*} = \frac{0.079}{\sqrt{1 + 2t_*^{1.7}}} \quad (105)$$

onde $t_* = \frac{w_* t}{z_i}$.

5.3 Perfil do Vento

O perfil do vento médio utilizado pelo modelo analítico Euleriano foi calculado segundo as relações de similaridade (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

$$\bar{u} = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z - d}{z_0} \right) - \varphi_m \left(\frac{z - d}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \geq z_b \quad (106)$$

ou

$$\bar{u} = \bar{u}(z_b) \quad \text{se } z < z_b \quad (107)$$

onde $z_b = \min[|L|, (0.1)h]$, k é a constante de Von-Kármán ($k \cong 0.4$) e z_0 é a rugosidade do terreno. O deslocamento do plano zero (d) é uma altura acima da superfície em que a velocidade do vento é nula e é consequência do escoamento sobre obstáculos tais como árvores ou construções, sendo desconsiderado neste trabalho (ou seja, $d = 0$). A função estabilidade φ_m é expressa em termos das relações de Businger:

- Para condições instáveis ($L < 0$)

$$\varphi_m \left(\frac{z}{L} \right) = \ln \left(\frac{1+(1-15z/L)^{\frac{1}{2}}}{2} \right) + \ln \left(\frac{1+(1-15z/L)^{\frac{1}{4}}}{2} \right)^2 + \\ -2 \arctan \left(1 - 15 \frac{z}{L} \right)^{\frac{1}{4}} + \frac{\pi}{2} \quad (108)$$

- Para condições estáveis ($L \geq 0$)

$$\varphi_m \left(\frac{z}{L} \right) = -4.7 \frac{z}{L} \quad (109)$$

Alternativamente, a velocidade do perfil de vento pode ser descrita por uma lei de potência (PANOFSKY; DUTTON, 1984):

$$\frac{\bar{u}}{\bar{u}_1} = \left(\frac{z}{z_1} \right)^\gamma \quad (110)$$

na qual \bar{u} e \bar{u}_1 são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas z e z_1 e o expoente γ está relacionado com a intensidade da turbulência (IRWIN, 1979).

Sendo assim, o perfil de vento utilizado nesta dissertação é representado pela Eq. (110).

6 RESULTADOS

O objetivo desta seção é discutir os resultados das simulações da dispersão de poluentes na camada pré-residual (Seção 3.1) e na camada limite estável (CLE). São apresentados resultados da concentração de contaminantes integrada perpendicular à direção preferencial do vento (C_y), emitidos a partir de uma fonte pontual contínua nas alturas de 60m e 120m.

As simulações iniciam no momento do pôr-do-sol quando o fluxo de calor na superfície diminui progressivamente e uma CLE desenvolve-se perto da superfície. Os resultados das simulações são gerados pelo modelo analítico Euleriano (Eq. (36)), empregando perfis de coeficientes de difusão turbulenta para a CLE, sugeridos por DEGRAZIA et al. (2000), Eq. (75), e perfis de coeficientes de difusão turbulenta para a camada pré-residual, derivados por GOULART et al. (2007) (dadas nas Eqs. (103),(104) e (105)).

A Fig. 8 representa o decaimento dos coeficientes de difusão turbulenta para a camada pré-residual em relação ao tempo.

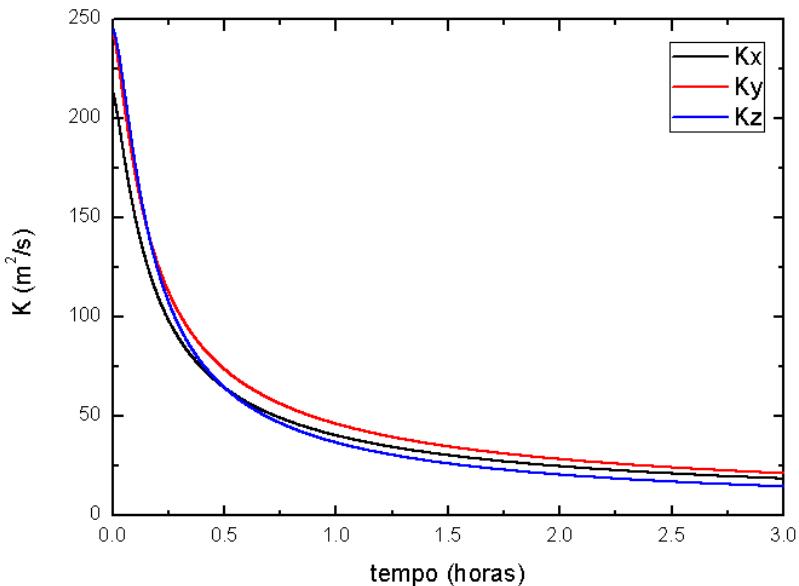


Figura 8: Decaimento dos coeficientes de difusão turbulenta para a camada pré-residual.

Para as simulações, o escoamento turbulento é assumido não homogêneo

somente na vertical ($\partial/\partial_{x_1} = 0$, $\partial/\partial_{x_2} = 0$, $\partial/\partial_{x_3} \neq 0$), o transporte é realizado pela componente longitudinal do vento médio ($U_1 \neq 0$, $U_2 = 0$, $U_3 = 0$) e o tensor de difusão turbulenta é considerado diagonal ($K_{ij} = 0$ se $i \neq j$). O domínio horizontal é configurado com $2 \times 2 \text{ km}$ e o domínio vertical igual à altura da CLE. Os parâmetros micrometeorológicos $z_i = 1350 \text{ m}$, $w_* = 2,3 \text{ m s}^{-1}$, $L = 4.8 \text{ m}$, e $u_* = 0.26 \text{ m s}^{-1}$ (NIEUWSTADT; BROST, 1986) foram considerados para gerar os perfis de difusão turbulenta durante as simulações.

A altura da CLP é calculada de acordo com a expressão $h = 70\sqrt{t}$, obtida a partir de medições experimentais realizados por ANFOSSI; BACCI; LONGHETTO (1974), onde h é dado em metros e t em horas. Durante a simulação, os novos perfis de coeficientes de difusão e os novos valores de altura de CLE são fornecidos de acordo com a sequência apresentada na Tabela 1.

Tabela 1: Evolução da altura da CLE de acordo com a expressão ($h = 70\sqrt{t}$).

$t(s)$	900	1800	2700	3600	4500
$h(m)$	35	50	60	70	80

Na sequência, são apresentados os resultados gerados pelo modelo analítico Euleriano (Figs. 9, 10, 13 e 14) e os resultados de um modelo numérico de partículas Lagrangeano (Figs. 11, 12, 15 e 16) (CARVALHO et al., 2010). A intenção não é realizar uma comparação entre os modelos e sim avaliar os resultados do modelo Euleriano, analisando o comportamento e a configuração das plumas de poluentes em relação a outro trabalho disponível na literatura. Mesmo que sejam resultados gerados por modelos conceitualmente diferentes, é possível avaliar o comportamento das plumas de poluentes para a dispersão de contaminantes na camada pré-residual. Em cada uma das figuras a seguir, as mesmas estão distribuídas por letras alfabéticas (a , b , c , d e e), representando respectivamente as figuras para alturas de CLE de 35m , 50m , 60m , 70m e 80m . Isto possibilita uma análise direta em relação aos resultados já existentes. Nesta seção é analisada a dispersão e os campos de concentração integrada (C_y) de contaminantes emitidos a partir de uma fonte pontual contínua de 60m de altura.

A Fig. 9a mostra o efeito da dispersão para o tempo inicial de $t = 900\text{s}$ e altura da camada estável de 35m . Analisando o padrão de difusão associado a esta figura, pode-se notar que os contaminantes liberados na camada pré-residual sofrem uma forte ação de mistura ocasionada pela turbulência convectiva em decaimento. A intensidade do transporte associado à turbulência é responsável pela entrada de contaminantes para o interior da CLE até alcançar a superfície. O efeito da dispersão na camada pré-residual sobre a pluma age no sentido de transportar os contaminantes para baixo em direção ao topo da CLE e, na sequência, é capturado por este novo ambiente com diferentes propriedades de difusão. Em seguida, a pluma de contaminantes se dispersa sob a ação da turbulência estável dominada por cisalhamento no interior da CLE. A turbulência de origem mecânica é gerada pelo cisalhamento do vento na superfície e, consequentemente, os turbilhões contendo energia estão localizados nas proximidades da superfície. Para uma turbulência contínua estável, a variância da

velocidade vertical turbulenta diminui com a altura e esta assimetria de variância (turbulência vertical não homogênea) induz a uma aceleração que transporta os contaminantes em direção à superfície, onde o cisalhamento do vento é dominante. Este transporte para baixo, associada à turbulência mecânica, é particularmente dominante na CLE, que apresenta pouca profundidade. Observa-se, ainda, que o padrão de dispersão da pluma gerado pelo modelo Euleriano, mostrando forte mistura turbulenta na camada pré-residual e o transporte de contaminantes para dentro da CLE, assemelha-se ao padrão de dispersão gerado pelo modelo de partículas Lagrangeano (Fig. 11a). A diferença fundamental está nos valores de concentração integrada, tal que o modelo Euleriano gera valores maiores do que o modelo Lagrangeano.

O perfil de concentração integrada (C_y) apresentado na Fig. 10a evidencia o movimento da pluma de contaminantes em direção à superfície. A partir desta figura pode ser visto que, na distância de $1000m$ a partir da fonte, existe um máximo de C_y dentro da CLE, o que significa uma considerável entrada de contaminantes para dentro desta camada. O modelo analítico Euleriano gera um perfil com configuração semelhante ao modelo Lagrangeano (Fig. 12a), mas com valores menores de C_y . Além disso, o máximo de concentração localiza-se mais próximo da superfície.

As Figs. 9b e 9c apresentam os resultados da simulação para os tempos $t = 1800s$ e $t = 2700s$, e alturas da camada estável de $50m$ e $60m$, respectivamente. Estas figuras mostram uma redução notável da concentração de contaminantes na superfície devido à evolução da altura da CLE e a perda da capacidade de difusão dos turbilhões contendo energia convectiva dentro da camada pré-residual; a perda da capacidade de difusão contribui para reduzir a entrada de contaminantes na superfície. O aprofundamento da CLE tende a engolfar a região da CR, reduzindo o processo de dispersão gerado pelos turbilhões convectivos em decaimento. Esse aumento da altura da CLE faz com que os contaminantes passem a ser emitidos em um ambiente de turbulência mecânica, gerado pelo atrito do vento na superfície. No tempo de evolução $t = 1800s$, apresentado na Fig. 9b, é possível observar uma configuração na qual o máximo de concentração esta cada vez mais no interior da CLE. Para o tempo de $t = 2700s$, mostrado na Fig. 9c, a altura da CLE cobre a fonte de emissão e, consequentemente, os contaminantes são liberados no limite entre a camada pré-residual e a CLE. Dentro da CLE, os contaminantes podem percorrer longas distâncias sem tocar a superfície e, como resultado, a concentração no solo é reduzida, como pode ser visto nas figuras. Nota-se, novamente, que o processo de dispersão gerado pelo modelo Euleriano apresenta forte semelhança com aquele gerado pelo modelo de partículas Lagrangeano (Figs. 11b e 11c). Também, neste caso, o modelo Euleriano gera valores de concentração maiores do que o modelo Lagrangeano.

Estes comportamentos do padrão de dispersão também podem ser verificados nas Figs. 10b e 10c, que apresentam os perfis de concentração C_y para as alturas de CLE de $50m$ e $60m$, respectivamente. Quando a altura da CLE é $50m$ observa-se que, para a distância de $1000m$ a partir da fonte de emissão, o máximo de concentração ocorre em aproximadamente $40m$ de altura, evidenciando que existe entrada de contaminantes no interior da CLE e o transporte de contaminantes para a superfície. Já para a altura da CLE de $60m$, o máximo de

concentração desloca-se um pouco mais para cima, ocorrendo uma diminuição significativa da concentração na superfície. Esse mesmo comportamento do padrão de dispersão pode ser observado nos resultados do modelo Lagrangeano (Figs. 12b e 12c), mas com diferenças significativas dos valores de concentração, tanto em altitude quanto em superfície.

Na fase final do período do pôr-do-sol, a altura da CLE ultrapassa a altura da fonte de emissão e, portanto, a dispersão ocorre totalmente no ambiente estável. Neste ambiente, caracterizado pela atuação de pequenos turbilhões mecânicos, a baixa amplitude dos coeficientes de difusão gera pouca difusão tanto na direção horizontal quanto na direção vertical. Estas condições produzem uma pluma de contaminantes no formato *fanning* (Seção 3.1), frequentemente observada na camada limite estável, que sofre um transporte horizontal a grandes distâncias, por ação do vento médio. Este formato de pluma ocorre normalmente durante a noite, onde condições de vento fraco e inversão de temperatura na superfície são frequentemente observadas (ANFOSSI; DEGRAZIA; GOULART, 2004). Este padrão de dispersão é reproduzido nas Figs. 9d e 9e, que mostram o campo de concentração para a evolução final com tempos de $t = 3600s$ e $t = 4500s$, respectivamente. Para estes tempos de evolução, os turbilhões convectivos em decaimento ainda tem energia suficiente para dispersar a pluma dentro da camada pré-residual quando a altura da CLE for menor do que a altura da fonte. Dentro da CLE, a pluma de contaminantes viaja a uma longa distância, com máximo de concentração no nível da fonte de emissão. Nesse ambiente, a baixa magnitude dos coeficientes de difusão gera pouca difusão na direção vertical, impossibilitando o transporte de contaminantes para a superfície. Estes resultados são semelhantes aos obtidos por CARVALHO et al. (2010), na abordagem numérica, utilizando um modelo de partículas Lagrangeano (Figs. 11d e 11e).

As Figs. 10d e 10e mostram os perfis de concentração C_y para as alturas de CLE $70m$ e $80m$, respectivamente, a uma distância de $1000m$ a partir da fonte. Os perfis confirmam o comportamento dos campos de concentração, evidenciando o formato *fanning* da pluma de contaminantes devido à baixa magnitude dos coeficientes de difusão. Este padrão é o mesmo apresentado pelo modelo Lagrangeano (Figs. 12d e 12e), porém com valores menores de C_y .

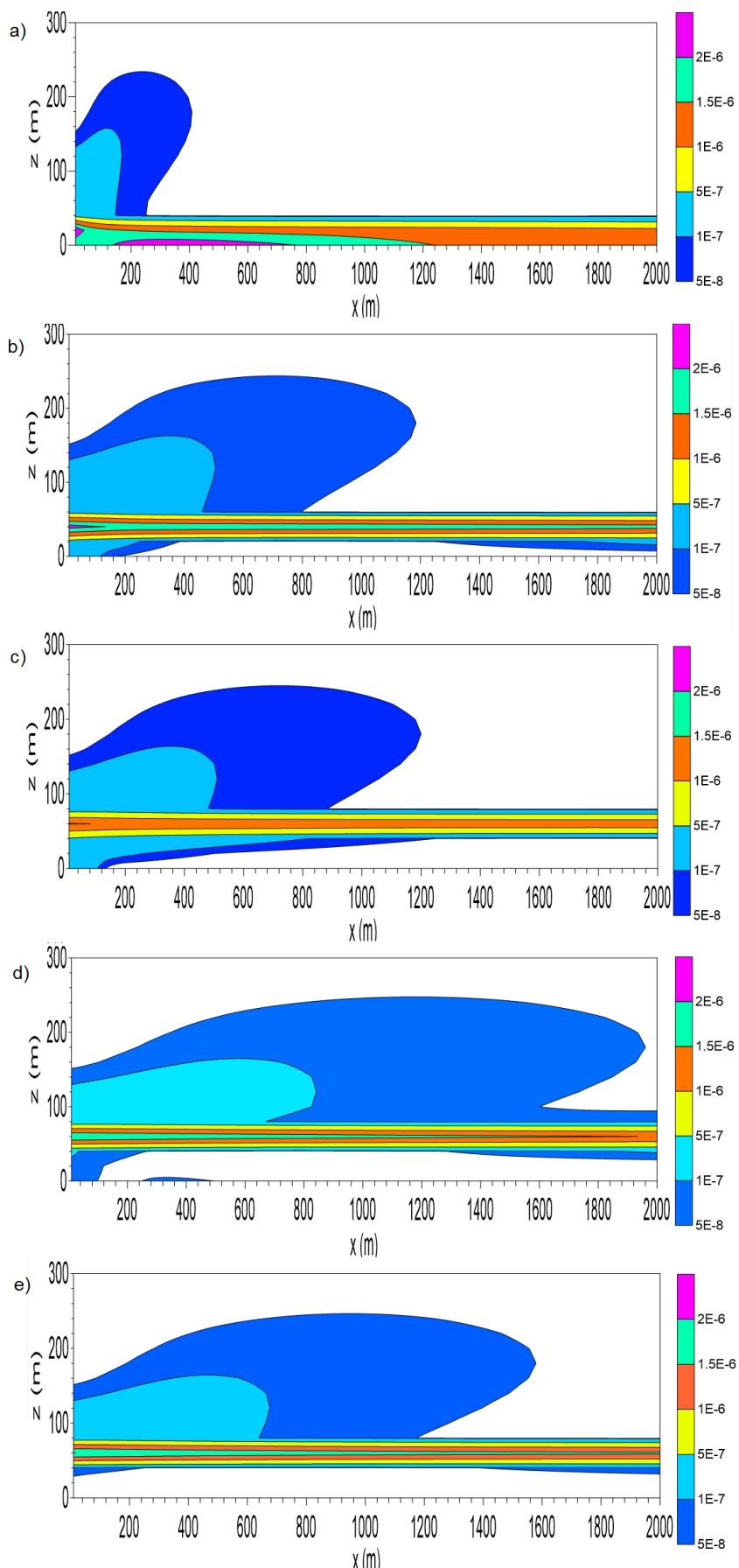


Figura 9: Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 60m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente conforme as alturas da CLE.

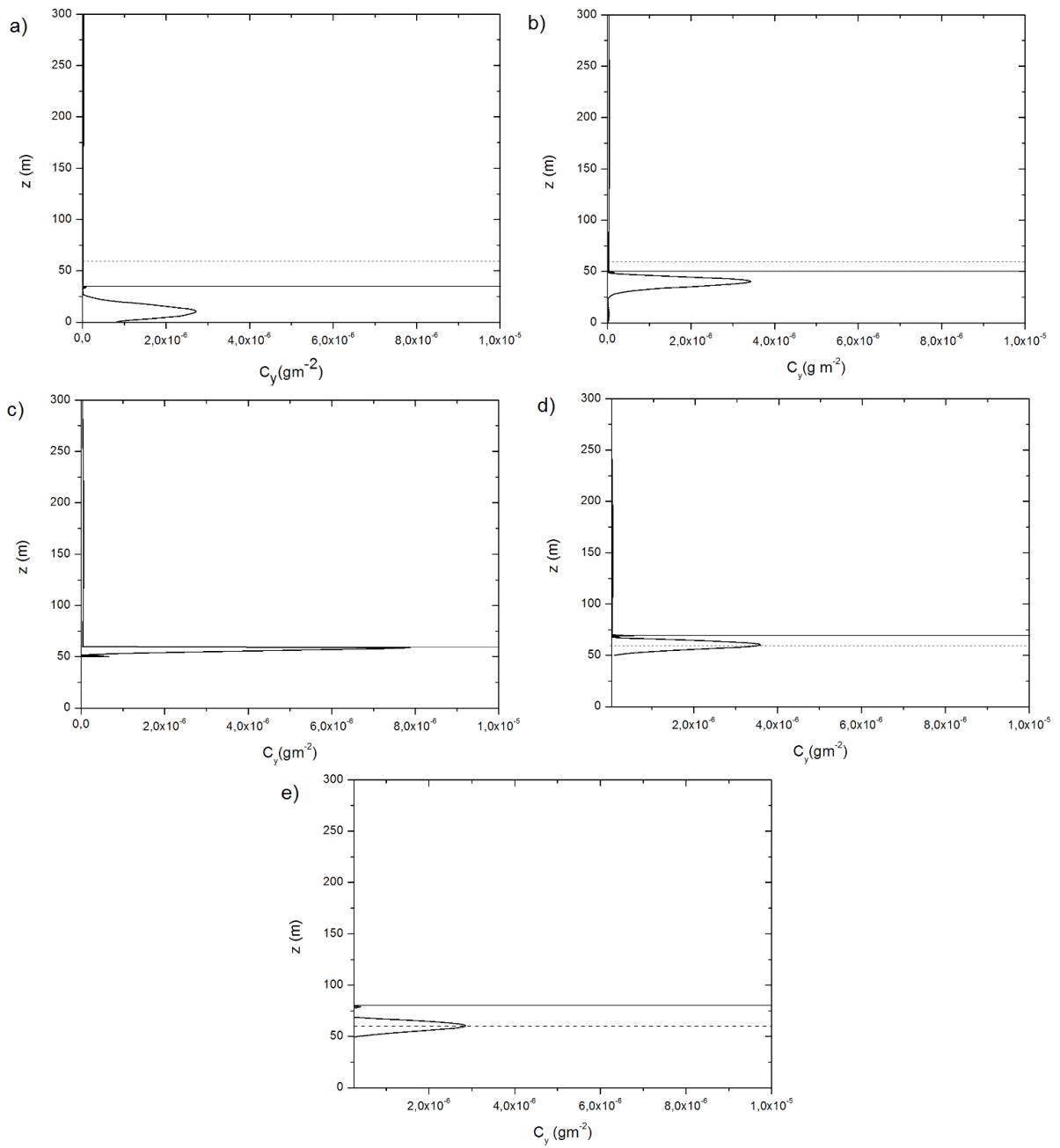


Figura 10: Perfil de concentração na distância $x = 1000\text{m}$ para altura da fonte de 60m , altura da camada limite estável de 35m , 50m , 60m , 70m e 80m , respectivamente, e tempo de evolução de 900s , 1800s , 2700s , 3600s e 4500s , respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.

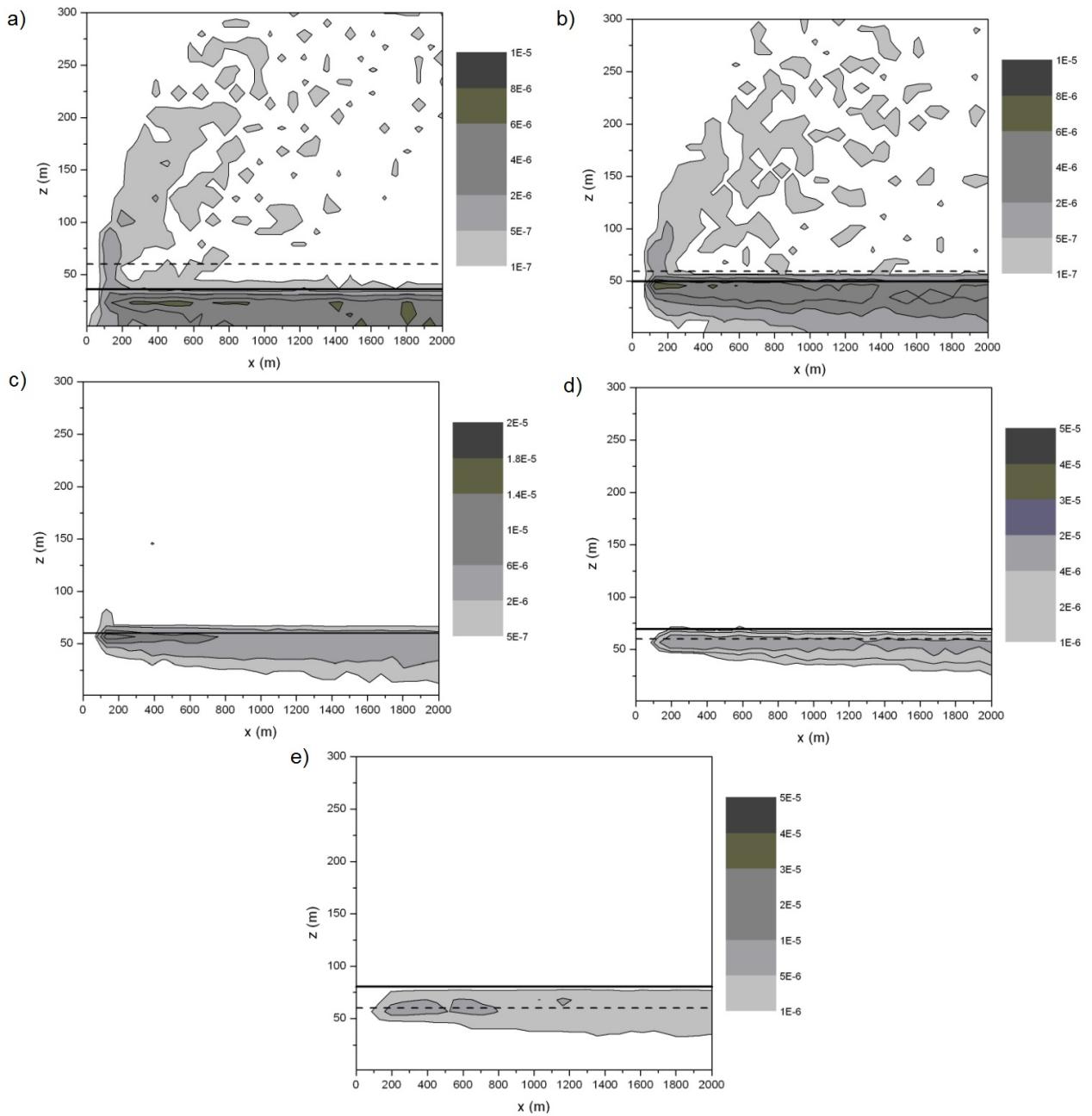


Figura 11: Campo de concentração integrada (plano x-z) do modelo Lagrangeano para emissão na altura de 60m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente conforme as alturas da CLE.

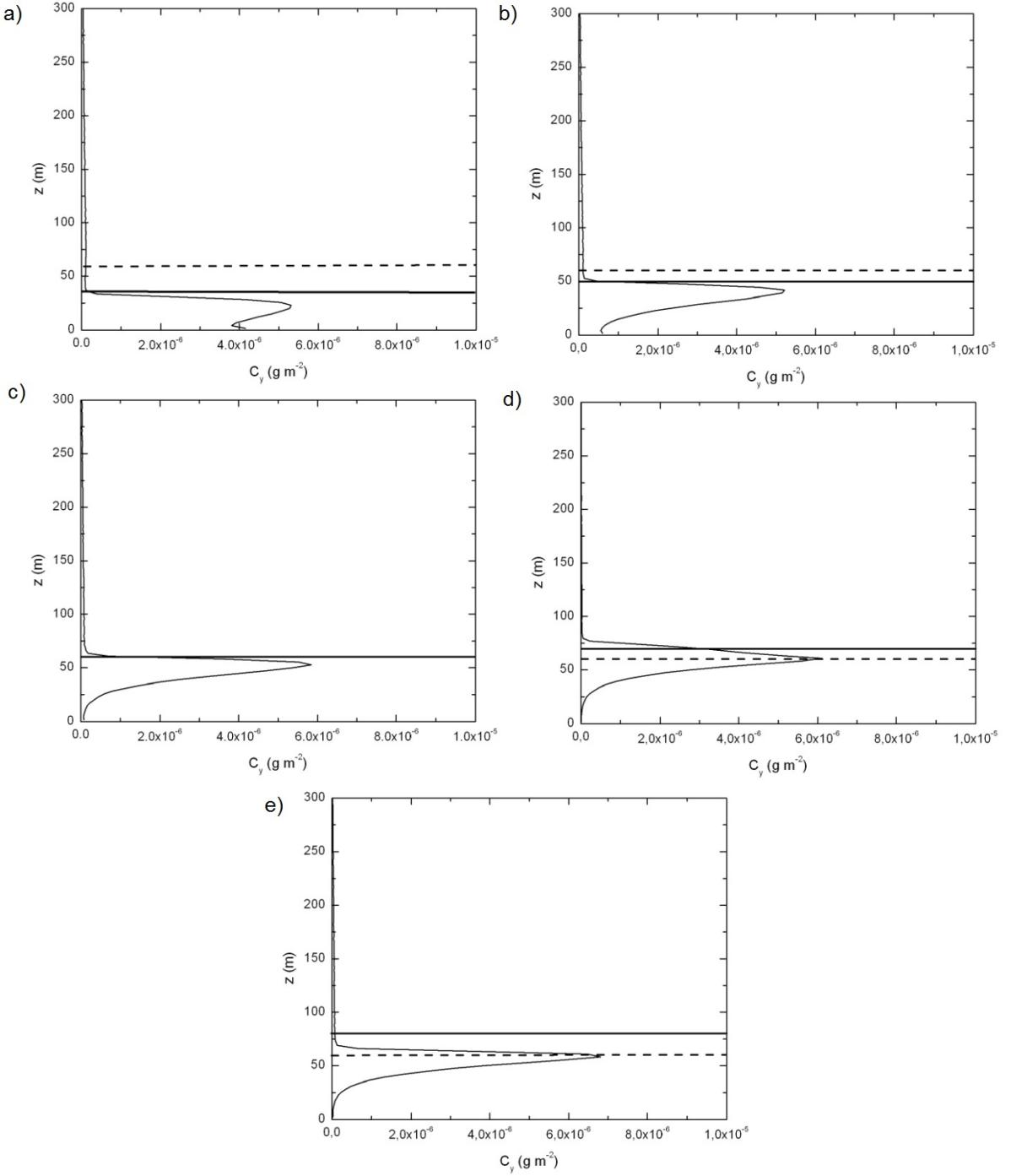


Figura 12: Perfil de concentração do modelo Lagrangeano na distância $x = 1000\text{m}$ para altura da fonte de 60m , altura da camada limite estável de 35m , 50m , 60m , 70m e 80m , respectivamente, e tempo de evolução de 900s , 1800s , 2700s , 3600s e 4500s , respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.

Da mesma forma como realizado na seção anterior, para emissão de 60m de altura, esta seção apresenta a análise da dispersão e os campos de concentração integrada (C_y) de contaminantes emitidos a partir de uma fonte pontual contínua de 120m de altura. A Fig. 13a apresenta o campo de concentração integrada para o tempo inicial de 900s e altura da camada estável

de 35m. Exatamente como acontece para o caso da emissão de 60m, os resultados simulados mostram que o mecanismo de difusão associado à turbulência convectiva em decaimento transporta uma quantidade significativa de contaminantes para o interior da CLE. Pode-se observar que tal efeito ocorre mesmo que a emissão aconteça de uma fonte mais alta, onde o ponto de emissão está mais distante do topo da CLE. Esse padrão de dispersão assemelha-se ao padrão gerado pelo modelo Langrangeano (Fig. 15a), da mesma forma como acontece para a emissão de 60m. Diferenças podem ser observadas principalmente no que diz respeito aos valores de concentração C_y , tanto em altitude como em superfície. Diferentemente do modelo Lagrangeano, o modelo Euleriano gera valores muito pequenos de concentração nas proximidades da saída da fonte.

A Fig. 14a apresenta o perfil de concentração integrada (C_y) gerado pelo modelo Euleriano para a distância de 1000m a partir da fonte, considerando a emissão em 120m e a altura da CLE 35m. Observa-se que a ação da forte mistura turbulenta dentro da camada pré-residual provoca o transporte de contaminante para dentro da CLE, gerando um máximo de concentração na altura de 20m, aproximadamente. Os resultados gerados pelos modelos Euleriano e Lagrangeano (Fig. 16a) apresentam diferenças fundamentais nos valores de concentração tanto em superfície como em altitude, como havia sido verificado nos campos de concentração da Fig 13a. Nota-se que o modelo Lagrangeano tende a homogeneizar a concentração dentro da CR, mas ainda é possível visualizar máximo de concentração dentro da camada pré-residual, próximo à altura da fonte.

As Figs. 13b, 13c e 13d apresentam os resultados da simulação para os tempos $t = 1800s$, $t = 2700s$ e $t = 3600s$, e alturas da camada estável de 50m, 60m e 70m, respectivamente. A sequência de figuras mostra que, ao contrário do que ocorre para a emissão de 60m de altura, não há diminuição da concentração em superfície à medida que ocorre a perda da capacidade de difusão convectiva dentro da camada pré-residual e o aumento da altura da CLE. Este comportamento é mais evidente nos perfis de concentração integrada na distância de 1000m, apresentados nas Figs. 14b, 14c e 14d. Pelas figuras pode-se verificar que não ocorre diminuição da concentração em superfície e o pico de concentração tende a se deslocar para baixo. Este resultado difere daquele apresentado para a emissão na altura de 60m e difere, também, do resultado gerado pelo modelo numérico Lagrangeano (Figs. 15b, 15c, 15d, 16b, 16c e 16d).

A Fig. 13e apresenta o campo de concentração integrada (C_y) para uma altura de CLE de 80m no tempo final de transição do pôr do sol de 4500s. A diminuição da magnitude dos coeficientes de difusão na camada pré-residual associada à evolução da CLE provocam uma diminuição da concentração C_y em superfície. Dentro da CLE, a pluma de contaminantes é transportada a grandes distâncias, assumindo um formato de *fanning*. A pluma sofre uma grande propagação na horizontal devido ao vento médio e muito pouca propagação na vertical devido a baixa intensidade da turbulência. O perfil de C_y , na Fig. 14e, mostra exatamente estes padrões, tal que a concentração tende à homogeneização dentro da camada pré-residual devido à difusão convectiva em decaimento e o pico de concentração encontra-se dentro da CLE devido às condições estáveis características desse período do dia. Dentro da CLE a difusão da pluma é realizada por pequenos turbilhões mecânicos que não ocasionam uma abertura considerável da pluma na vertical. Observa-se que o perfil

de concentração gerado modelo Euleriano apresenta um padrão semelhante ao gerado pelo modelo Lagrangeano (Figs. 15e e 16e), mas o pico de concentração integrada ocorre mais próximo à superfície. Além disso, o modelo Euleriano gera um campo de concentração mais homogêneo dentro da camada pré-residual.

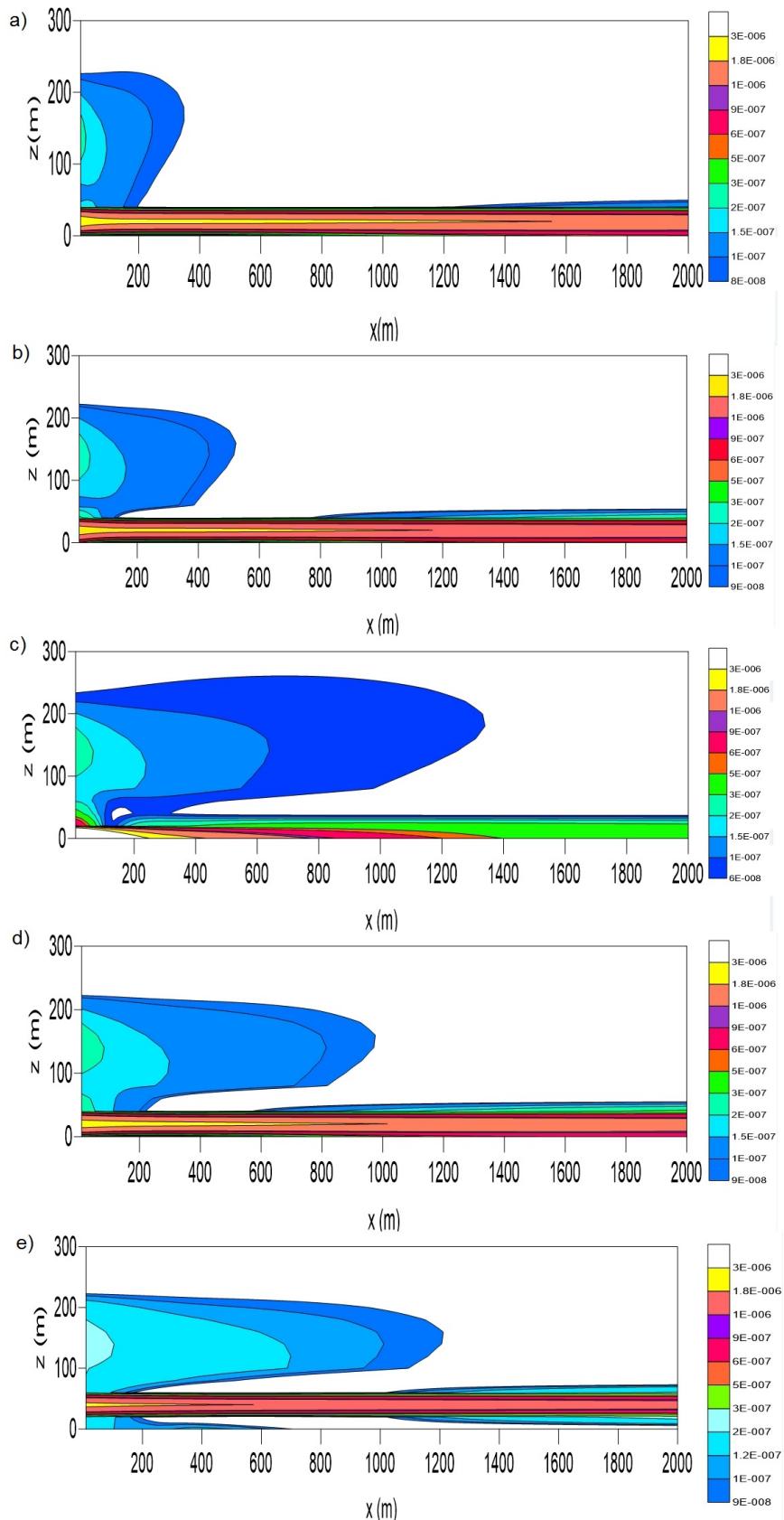


Figura 13: Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 120m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente conforme as alturas da CLE.

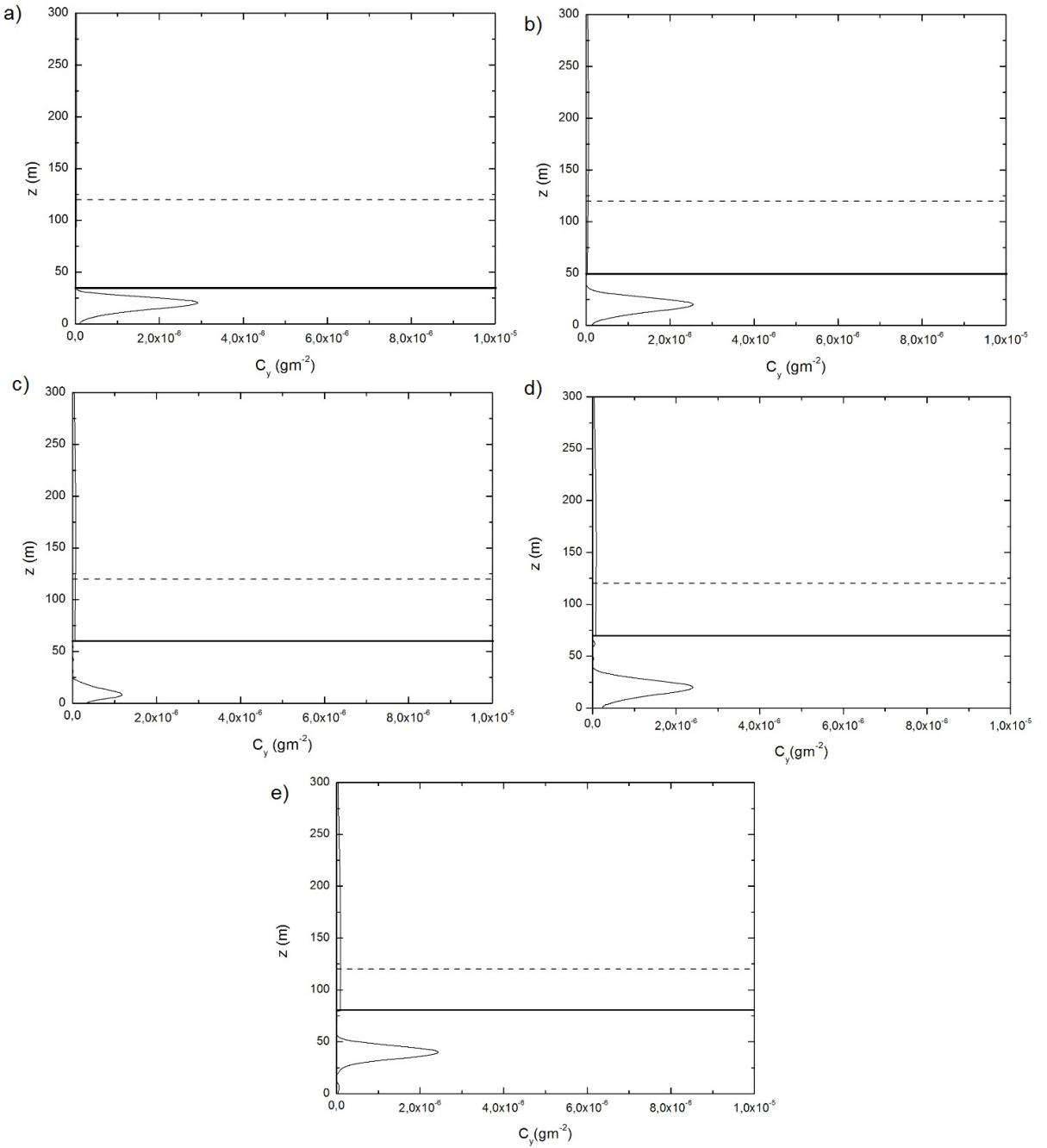


Figura 14: Perfil de concentração na distância $x = 1000\text{m}$ para altura da fonte de 120m , altura da camada limite estável de 35m , 50m , 60m , 70m e 80m , respectivamente, e tempo de evolução de 900s , 1800s , 2700s , 3600s e 4500s , respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.

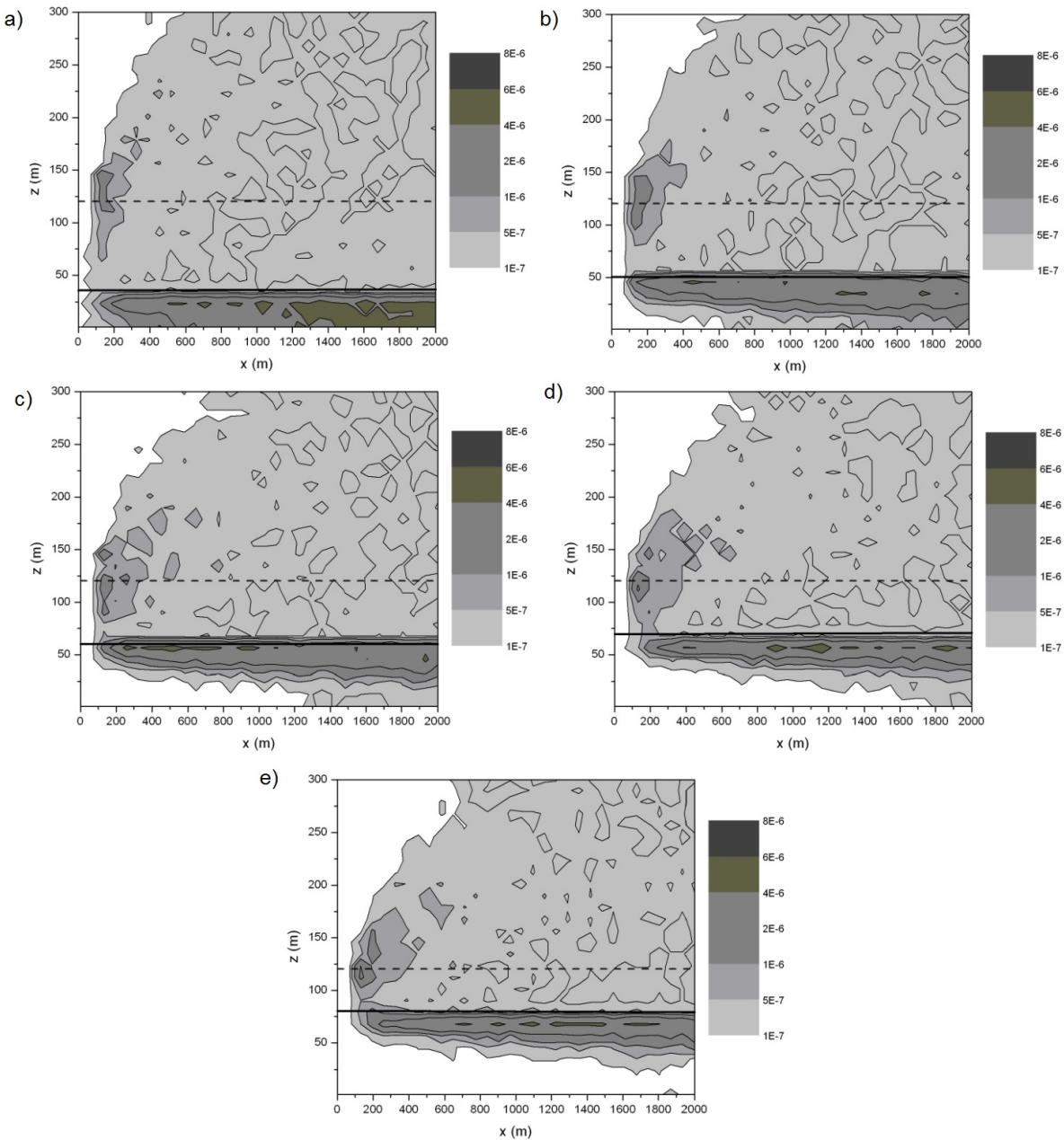


Figura 15: Campo de concentração integrada (plano x-z) do modelo Lagrangeano para emissão na altura de 120m, altura da camada limite estável de 35m, 50m, 60m, 70m e 80m, respectivamente, e tempo de evolução de 900s, 1800s, 2700s, 3600s e 4500s, respectivamente conforme as alturas da CLE.

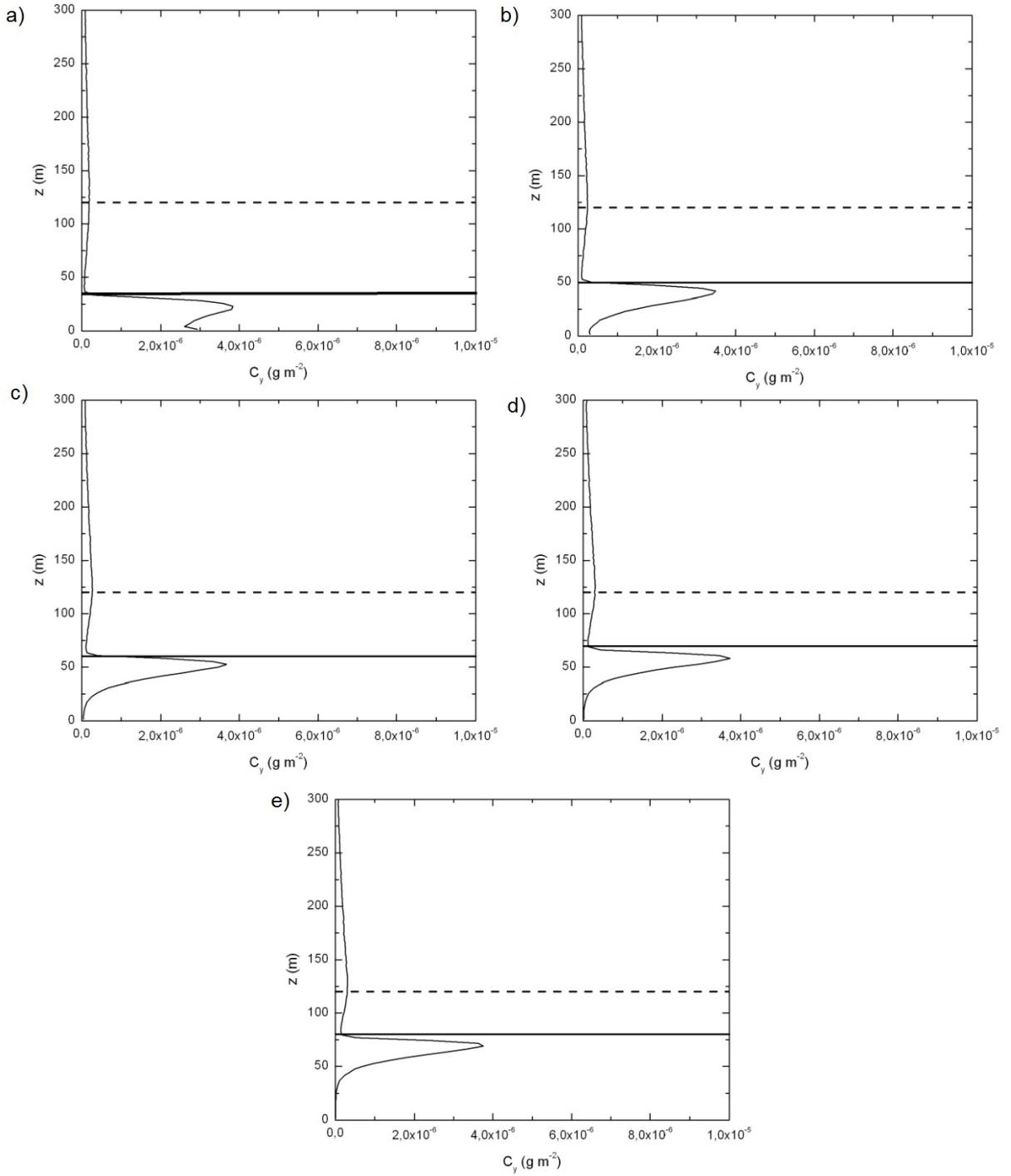


Figura 16: Perfil de concentração do modelo Lagrangeano na distância $x = 1000m$ para altura da fonte de $120m$, altura da camada limite estável de $35m$, $50m$, $60m$, $70m$ e $80m$, respectivamente, e tempo de evolução de $900s$, $1800s$, $2700s$, $3600s$ e $4500s$, respectivamente. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.

7 CONCLUSÕES

Neste estudo, foi utilizado um modelo Euleriano analítico para simular a concentração de poluentes liberados a partir de uma fonte pontual contínua durante o período de transição do pôr do sol. Este modelo Euleriano foi obtido pelo uso da técnica GILTT, sendo uma aplicação da técnica GIT em problemas de poluição atmosférica, de forma totalmente analítica. A solução de problema diferencial parcial pelo método GILTT se dá nas seguintes etapas: Na etapa inicial a concentração de poluentes é expandida em série, em termos de um conjunto de funções ortogonais, obtidas da solução de um problema auxiliar de Sturm-Liouville. Substituindo esta expansão na equação de advecção-difusão estacionária, e integrando em todo o domínio, resulta em um sistema de EDO's, chamado de problema transformado, que uma vez solucionado, é facilmente invertido para a obtenção do resultado da equação original, no qual é resolvido analiticamente. O método GILTT é analítico no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução, exceto pelo erro de truncamento da solução em série para fins de cálculos numéricos.

A análise aplica-se ao modelo de dispersão parametrizado por coeficientes de difusão convectivos estáveis e em decaimento, que representa a mistura turbulenta na CLE e na camada pré-residual. As simulações das concentrações e dos perfis das concentrações foram calculadas considerando diferentes momentos no processo de transição dia-noite. As simulações foram analisadas a partir de uma fonte pontual contínua a uma altura de 60m e 120m.

Os resultados das simulações foram gerados em uma linguagem FORTRAN 90, sendo que o *software* utilizado para gerar os gráficos da concentração foi o Surfer 9.0 e para gerar os perfis da concentração foi utilizado o *software* Origin 8.

As simulações para uma altura de fonte de 60m mostraram que, para os tempos de evolução inicial durante a transição do sol, a difusão turbulenta gerada pelo decaimento convectivo na camada pré-residual causou uma transferência eficaz de contaminantes para o interior da CLE. Durante a fase inicial, em que a CLE apresenta uma pequena profundidade, a combinação entre a turbulência convectiva em decaimento e os turbilhões estáveis atuam de forma eficiente para o transporte dos poluentes em direção à superfície, aumentando a concentração no solo.

Para a fase final do período de transição a altura da CLE chegou a uma altura de fonte pontual e a dispersão ocorreu em um ambiente estável. Esta condição gera uma pluma de forma *fanning*, que se caracteriza por uma grande disseminação na horizontal e com pouca propagação em relação à vertical. Os

resultados mostraram que em uma pluma de longa distância, o valor máximo da concentração permanece no mesmo nível da fonte de emissão. Como consequência desta falta de mistura turbulenta eficaz, os contaminantes não chegam à superfície.

As simulações para uma altura de fonte de 120m mostraram que para o tempo de evolução inicial houve uma quantidade significativa de contaminantes na superfície, fazendo com que haja perda da capacidade de difusão convectiva dentro da camada pré-residual. Para as fases posteriores não houve uma diminuição da concentração na superfície à medida que ocorre a perda da capacidade de difusão convectiva, podendo ser visto facilmente nos perfil das concentrações, onde os picos da concentrações desloca-se para baixo em relação a superfície.

Para a fase final do período de transição para a altura de 120m houve uma diminuição dos contaminantes no interior da CLE, fazendo com que a pluma viage uma longa distância sem tocar na superfície, gerando assim uma pluma no formato *fanning*. A concentração tende à se homogeneizar dentro da camada pré-residual devido à difusão convectiva em decaimento e analizando o perfil desta concentração pode ser visto que o pico da concentração encontra-se dentro da CLE devido às condições estáveis características desse período do dia.

Fazendo uma comparação entre as concentrações para as alturas das fontes pontuais contínuas de 60m e 120m temos que as concentrações para a altura de fonte de 120m são menores do que para a altura de 60m, como pode ser visto nas escalas das figuras. No tempo inicial de transição houve uma semelhança entre as alturas de fontes, onde é possível notar uma quantidade significativa da concentração na superfície. Para a fase posterior e altura de fonte de 60m houve uma redução da concentração na superfície devido à evolução da altura da CLE e a perda da capacidade de difusão dos turbilhões contendo energia convectiva dentro da camada pré-residual, ao contrário do que ocorre para a emissão de 60m de altura, para a emissão de 120m de altura não há diminuição da concentração em superfície à medida que ocorre a perda da capacidade de difusão convectiva dentro da camada pré-residual e o aumento da altura da CLE. Para a fase final do período de transição dia-noite para as alturas de fonte de 60m e 120m as plumas geraram um formato de pluma *fanning*, ocorrendo uma diminuição dos contaminantes no interior da CLE, fazendo com que a pluma viage uma longa distância sem tocar na superfície.

Os resultados apresentados neste trabalho mostram semelhança com os relatados pela literatura (CARVALHO et al., 2010), onde a ação da forte mistura gerada pelo decaimento dos turbilhões contendo energias convectivas na camada pré-residual provoca uma entrada eficaz de poluentes no interior da CLE recentemente criado. No estudo realizado por CARVALHO et al. (2010) foi utilizado os coeficientes de difusão turbulenta para a CLE, sugeridos por DEGRAZIA et al. (2000), e coeficientes de dispersão turbulenta para a camada pré-residual, proposto por GOULART et al. (2007). A linguagem utilizada para determinar o resultado das simulações foi o FORTRAN 90 e os gráficos foram gerados pelo software Origin 8.

Fazendo uma breve comparação entre os modelos Lagrangeano e Euleriano, pode ser visto que as escalas nos gráficos de concentração no modelo Euleriano e Lagrangeano estão diferentes devido ao fato que as concentrações são menores no modelo Euleriano. O tempo para determinar os resultados das simulações

é menor no modelo Euleriano, visto que o tempo de simulação no Euleriano é de aproximadamente $45s$ enquanto o modelo Lagrangeano demora aproximadamente $5min$ e $20s$. Os gráficos no modelo Euleriano foram gerados no Surfer 9.0 para os gráficos da concentração e no Origin 8 para o gráficos dos perfis das concentrações, enquanto os gráficos para o modelo Lagrangeano foram gerados no Origin 8 tanto para as concentrações quanto para o perfil das concentrações.

Por fim, espera-se que este trabalho tenha contribuído para o desenvolvimento de futuros trabalhos sobre o tema, servindo como base para pesquisas futuras, visto que foi resolvido o problema proposto utilizando um modelo Euleriano analítico para a simulação da concentração de poluentes liberados a partir de uma fonte pontual contínua durante o período de transição dia-noite.

REFERÊNCIAS

- ALVES, L. S.; COTTA, R. M.; PONTES, J. Stability analysis of natural convection in porous cavities through integral transforms. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.45, p.1185–1195, 2002.
- ANFOSSI, D.; BACCI, P.; LONGHETTO, A. An application of Lidar technique to the study of nocturnal radiation inversion. **Atmos. Environ.**, v.8, p.537–541, 1974.
- ANFOSSI, D.; DEGRAZIA, G.; GOULART, A. Atmospheric turbulence decay during the solar total eclipse of 11 August 1999. **Boundary-Layer Meteorology**, v.111, p.301–311, 2004.
- ARYA, P. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. **Journal Meteorological Applications**, v.34, p.1112–1122, 1995.
- ARYA, P. A review of the theoretical bases of short-range atmospheric dispersion and air quality models. In **Indian National Science Academic**, v.69A, p.709–724, 2003.
- ARYA, S. P. **Air pollution meteorology and dispersion**. [S.I.]: Oxford University Press, New York, 1999.
- BATCHELOR, G. K. Diffusion in a field of homogeneous turbulence. **Scientific Research**, v.2, p.437–450, 1949.
- BERLYAND, M. **Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere**. Raleigh, NC, USA: Translated version by NERC, USEPA, 1975.
- BLACKADAR, A. K. **Turbulence and diffusion in the atmosphere**: lectures in Environmental Sciences. [S.I.]: Springer-Verlag, 1997.
- BULIGON, L.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. Uma solução semi-analítica da dispersão de poluentes com a equação do telégrafo e fluxo contra-gradiente. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.21, p.77–85, 2006.
- BUSKE, D.; QUADROS, R.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. Simulação analítica da dispersão analítica de poluentes atmosféricos tridimensional. **Revista Ciência e Natura**, p.29–32, 2009a.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; BODMANN, B.; TIRABASSI, T. **Analytical Model for Air Pollution in the Atmospheric Boundary Layer.** [S.I.]: Air Pollution - Book 1, Organized by: M. Khare, 2012a. v.1, p.39–58.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. A 3D analytical solution of the advection-diffusion equation applied to pollutant dispersion in atmosphere. In **Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**, 2009b.

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

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

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; SEGATTO, C. F.; QUADROS, R. S. **A General Analytical Solution of the Advection-Diffusion Equation for Fickian Closure.** Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; P. Harris, 2011b. v.1, p.25–34.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BODMANN, B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. **Journal of Environmental Protection**, v.4, p.1–10, 2012b.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; QUADROS, R. S.; SEGATTO, C. F. Modelo analítico tridimensional de dispersão de poluentes na camada limite atmosférica. **Revista Ciência e Natura**, v.1, p.115–118, 2011c.

CARVALHO, D. **Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva.** 1996. Dissertação de mestrado — Programa de Pós Graduação em Meteorologia.

CARVALHO, J.; DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D.; GOULART, A.; CUCHIARA, G.; MORTARINI, L. Simulating characteristic patterns of the dispersion during sunset PBL. **Atmospheric Research**, v.98, 2010.

CARVALHO, J.; NICHIMURA, E.; VILHENA, M.; MOREIRA, D.; DEGRAZIA, G. An iterative langevin solution for contaminant dispersion simulation using the Gram-Charlier. **Environmental Modelling and Software**, v.20, 2005a.

CARVALHO, J.; VILHENA, M. Pollutant dispersion simulation for low wind speed condition by the ILS method. **Atmospheric Environment**, v.39, 2005.

CATALANO, G. D. An analytical solution to the turbulent diffusion equation with mean vertical wind. **Southeastern Sem. Thermal**, p.143–151, 1982.

CAUGHEY, S.; KAIMAL, J. Vertical heat flux in the convective boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.103, p.811–815, 1977.

CHEROTO, S.; MIKHAILOV, M. D.; KAKA, C. S.; COTTA, R. M. Periodic laminar forced convection: solution via symbolic computation and integral transforms. **International Journal of Thermal Sciences**, v.38, p.613–621, 1999.

CHRYSIKOPOULOS, C.; HILDEMANN, L. M.; ROBERTS, P. V. A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground level area source. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.747–757, 1992.

COSTA, C. P.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T. **A Closed-Form Formulation for Pollutant Dispersion in the Atmosphere**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Computational Methods, Organized by: C. Constanta; M. E. Pères, 2010. v.2, p.141–150.

COSTA, C. P.; TIRABASSI, T.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. A general formulation for pollutant dispersion in the atmosphere. **Journal of Engineering Mathematics**, v.74, p.159–173, 2012.

COSTA, C.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. Semi-analytical solution of the steady three-dimensional advection-diffusion equation in the planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.40, n.29, p.5659–5669, 2006.

COTTA, R. M. **Integral transforms in computational heat and fluid flow**. Boca Raton, Flórida: CRC Press, 1993.

COTTA, R. M.; BARROS, F. P. J. Integral transforms for three-dimensional steady turbulent dispersion in rivers and channels. **Applied Mathematical Modelling**, v.31, p.2719–2732, 2007.

COTTA, R.; MIKHAYLOV, M. **Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation**. Baffins Lane, Chinchester, England: John Wiley & Sons, 1997.

COURANT, R.; HILBERT, D. **Methods of Mathematical Physics**. [S.I.]: John Wiley & Sons, 1989.

DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D. Estimation of the Kolmogorov constat Co from classical statistical diffusion theory. **Atmospheric Environment**, p.3611–3614, 1998.

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

DEMUTH, C. A. Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1255–1258, 1978.

FREITAS, S. R.; LONGO, K. M.; RODRIGUES, L. F. Modelagem numérica da composição química da atmosfera e seus impactos no tempo, clima e qualidade do ar. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.24, p.188–207, 2009.

GEAI, P. **Methode D'Interpolation et de Reconstitution Tridimensionnelle d'un Champ de Vent**: Le code d'analyse objective MINERVE. Electricite De France Rep. ARD-AID: E34-E11: [s.n.], 1987. 177p.

GOULART, A.; DEGRAZIA, G.; ANFOSSI, D.; ACEVEDO, O. Modelling and eddy diffusivity for convective decaying turbulence in the CBL. **American Meteorological Society**, p.267–268, 2002.

GOULART, A.; DEGRAZIA, G.; RIZZA, U.; ANFONSI, D. A theoretical model for the study of the convective turbulence decay and comparison with LES data. **American Meteorological Society**, v.107, p.143–155, 2003.

GOULART, A.; VILHENA, M.; DEGRAZIA, G.; FLORES, D. Vertical, lateral and longitudinal eddy diffusivities for a decaying turbulence in the convective boundary layer. **Ecological Modelling**, v.204, 2007.

GRANT, A. An observational study of the evening transition boundary-layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.123, p.657–677, 1997.

GUERRERO, J. S. P.; PIMENTEL, L. C. G.; OLIVEIRA-JÚNIOR, J. F.; HEILBRON FILHO, P. F. L.; ULKE, A. G. A unified analytical solution of the steady-state atmospheric diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.55, p.201–212, 2012.

HANNA, S. R. Lagrangian and Eulerian time-scale relations in the daytime boundary layer. **Appl. Meteor.**, v.20, p.242–249, 1981.

HOLTON, J. R. **An introduction to dynamic meteorology**. Burlington, MA, USA: Elsevier Academic Press: [s.n.], 2004.

HOLTSLAG, A. A. M.; NIEUWSTADT, F. T. M. Scaling the Atmospheric Boundary Layer. **Boundary Layer Meteorology**, v.36, p.201–209, 1986.

HOWARD, C. R. **Stochastic Lagrangian models of turbulent diffusion**. Boston : Braum-Brumfield inc: [s.n.], 1996.

IRWIN, J. A theoretical variation of the wind profile power-low exponent as a function of surface roughness and stability. **Atmospheric Environment**, v.13, p.191–194, 1979.

KAIMAL, J. C.; WYNGAARD, J.; HAGEN, D. Turbulence structure in the convective boundary layer. **Atmospheric Sciences**, v.33, p.2152–2169, 1976.

KOCH, W. A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1729–1732, 1989.

KRISTENSEN, L.; LENSCHOW, D.; KIRKEGAARD, P.; COURTNEY, M. The spectral velocity tensor for homogeneous boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.47, p.149–193, 1989.

KUNDU, P.; COHEN, I. **Fluid Mechanics**. [S.I.]: Academic Press Inc., 2002. v.2.

LAMB, R. A numerical study of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1297–1304, 1978.

LIU, C.; SZECSDÓY, J.; ZACHARA, J.; BALL, W. Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. **Advances in Water Resources**, v.23, p.483–492, 2000.

MAGNO, R. N.; MACÊDO, E. N.; QUARESMA, J. N. Solutions for the internal boundary layer equations in simultaneously developing flow os power-law fluids within parallel plates channels. **Chemical Engineering Journal**, v.87, p.339–350, 2002.

MIKHAYLOV, M.; ÖZİSIK. **Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**. New York: John Wiley & Sons, 1984.

MOREIRA, D. **Modelo Euleriano semi-analítico de dispersão turbulenta de contaminantes**. 1999. Tese de Doutorado — Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS.

MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T.; MORAES, M. Meteorologia e poluição atmosférica. **Atmospheric Sciences**, v.11, 2008a.

MOREIRA, D. M.; TRINDADE, L. B.; FISCH, G.; MORAES, M. R.; DORADO, R. M.; GUEDES, R. L. A multilayer model to simulate rocket exhaust clouds. **Journal of Aerospace Technology and Management**, v.3, 2011.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D. **On the GILTT Formulation for Pollutant Dispersion Simulation in the Atmospheric Boundary Layer**. Boca Raton, Flórida: Air Pollution and Turbulence: Modeling and Applications, Organized by: D. Moreira; M. T. Vilhena, CRC Press, 2009. v.1, p.179–202.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL. **Atmospheric Environment**, v.40, p.3186–3194, 2006.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, p.1–17, 2009b.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; COSTA, C. P. Comparison between analytical models to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **International Journal of Environment and Waste Management**, v.01, 2008.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, C. A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant. **Ecological Modelling**, v.189, n.3-4, p.413–424, 2005d.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; COSTA, C.; BODMANN, B. Simulation of pollutant dispersion in atmosphere by the Laplace transform: the ADMM approach. **Water, Air and Soil Pollution**, v.177, p.411–439, 2006b.

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. **Ambiente & Sociedade**, v.VII, 2004.

NADEAU, D. F.; PARDYJAK, E. R.; HIGGINS, C. W.; FERNANDO, H. J. S.; PAR-LANGE, M. B. A simple model for the afternoon and early evening decay of convective turbulence over different land surfaces. **Boundary-Layer Meteorol**, v.141, p.301–324, 2011.

NIEUWSTADT, F. T. M. An analytical solution of the time-dependent, one-dimensional diffusion equation in the atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.14, p.1361–1364, 1980.

NIEUWSTADT, F. T. M. The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer. **Atmospheric Sciences**, v.41, p.2202–2216, 1984.

NIEUWSTADT, F. T. M.; BROST, R. A. The decay of convective turbulence. **Atmospheric Sciences**, v.43, p.532–546, 1986.

NIEUWSTADT, F. T. M.; HAAN, B. J. An analytical solution of the onedimensional diffusion equation in a non-stationary boundary layer with an application to inversion rise fumigation. **Atmospheric Environment**, v.15, p.845–851, 1981.

NIEUWSTADT, F. T. M.; VAN, A. A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2119–2124, 1978.

NILSSON, E.; LOTHON, M.; LOHOU, F.; PARDYJAK, E.; HARTOGENSIS, O.; DARBIEU, C. Turbulence kinetic energy budget during the afternoon transition. **Atmospheric Chemistry Physics**, v.16, p.8873–8898, 2016.

NUNES. **Crescimento da Camada Limite Convectiva**: Estudo analítico e numérico. 2008. Dissertação de mestrado — Programa de Pós Graduação em Meteorologia.

ÖZISIK, M. **Heat Conduction**. New York: John Wiley & Sons, 1974.

PANOFSKY, H. A.; DUTTON, J. A. **Atmospheric Turbulence**. New York: John Wiley & Sons, 1984.

PASQUILL, F. **Atmospheric Diffusion**. 2.ed. New York: John Wiley & Sons, 1974.

PASQUILL, F.; SMITH, F. B. **Atmospheric Diffusion**. Chichester: Ellis Howood Ltd., 1983.

PEREIRA, L. M.; GUERRERO, J. S.; BRAZÃO, N.; COTTA, R. M. Compressible flow and heat transfer in ultracentrifuges hybrid analysis via integral transforms. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.45, p.99–112, 2002.

PINO, D.; JONKER, H.; ARELLANO, J. VilÃ -Guerau de; DOSIO, A. Role of shear and the inversion strength during sunset turbulence over land: Characteristic length scales. **Boundary-Layer Meteorology**, v.121, p.537–556, 2006.

RIBEIRO, M.; CATALDI, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Estudo da dispersão de poluentes na atmosfera via transformação integral. In **XI Congresso Brasileiro de Meteorologia**, v.1, p.2969–2975, 2000.

RIBEIRO, M.; FERREIRA, M.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Efeito do mecanismo de reação química sobre o transporte de contaminantes na região camada limite atmosférica. **Proceedings do XII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, 2002a.

ROBERTS, O. F. T. The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. In **Royal Society of London**, v.104, p.640–648, 1923.

ROUNDS, W. Solutions of the two-dimensional diffusion equation. **American Geophysical Union**, v.36, p.395–405, 1955.

SCHUCH, D.; WEYMAR, G. J.; FURTADO, I.; QUADROS, R. S.; BUSKE, D. Simulação da dispersão de poluentes na camada limite atmosférica incluindo o efeito da deposição seca no solo. **Revista Ciência e Natura**, p.127–130, 2011.

SCIRE, J. S. e. a. **A user's guide for the CALMET meteorology model**. [S.I.]: Earth Tech. Inc., 1999.

SCRIVEN, R. A.; FISHER, B. A. The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout - II - The efect of turbulent diffusion. **Atmospheric Environment**, v.9, p.59–69, 1975.

SEIGNEUR, C. Understand the Basics of Air-Quality Modelling. **Chemical Engineering Progress**, v.88, p.68–74, 1992.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric chemistry and physics of air pollution**. New York: John Wiley & Sons, 1997.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K. A mathematical model for the atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmospheric Environment**, v.30 (7), p.1137–1145, 1996a.

SHARAN, M.; SINGH, M. P.; YADAV, A. K.; AGARWAL, P.; NIGAM, S. A mathematical model for dispersion of air pollutants in low winds conditions. **Atmospheric Environment**, v.30, p.1209–1220, 1996b.

SKAMAROCK, W. C. e. a. **A Description of the Advanced Research WRF Version 2**. Boulder, Colorado, USA: NCAR: Technical Note NCAR7TN-468+STR, NCAR, 2005.

SMITH, F. B. **Convection-diffusion processes below a stable layer**. London: Technical Report, Meteorological Research Committee, 1957a.

SMITH, F. B. The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere. **Journal of Fluid Mechanics**, v.2, p.49–76, 1957b.

SORBJAN, Z. Decay of Convective Revisited. **Boundary-Layer Meteorology**, v.82, p.501–515, 1997.

SORBJAN, Z. Numerical study of daily transitions in the atmospheric boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.123, p.365–383, 2007.

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo eulariano de dispersão de poluentes atmosféricos via GITT e modelos algébricos para os fluxos turbulentos. **Revista Ciência e Natura**, p.103–106, 2003.

STORCH, R.; PIMENTEL, L. Atmospheric dispersion simulation via generalized integral transform technique and sign-count method. **Revista Ciência e Natura**, p.277–280, 2005.

STROUD, A. H.; SECREST, D. **Gaussian quadrature formulas**. [S.I.]: Englewood Cliffs, N. J., Prentice Hall Inc., 1966.

STULL, R. B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. [S.I.]: Kluwer Academic Publishers, 1988.

TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. A two-dimensional solution of the advection-diffusion equation with dry deposition to the ground. **Journal of Applied Meteorology and Climatology**, v.47, p.2096–2104, 2008.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. An analytical model for a screen evaluation of the environmental impact from a single point source. **Il Nuovo Cimento**, v.15c, p.181–190, 1992.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. An air pollution model for complex terrain. **Proceeding of Air Pollution conference, Monterrey**, p.149–156, 1993.

TIRABASSI, T.; RIZZA, U. A practical model for the dispersion of skewed puffs. **Journal of Applied Meteorology**, v.34, p.989–993, 1995.

TIRABASSI, T.; TAGLIAZUCCA, M.; PAGGI, P. A climatological model of dispersion in an inhomogeneous boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.23, p.857–862, 1989.

TIRABASSI, T.; TIESI, A.; BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection-diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.43, p.2221–2227, 2009.

VAN ULDEN, A. P. Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground. **Atmospheric Environment**, v.12, p.2125–2129, 1978.

VELLOSO, M.; BARBARIOLI, A.; GUERRERO, J.; PIMENTEL, L. Desenvolvimento de um modelo computacional para estudo do efeito do mecanismo de deposição sobre a dispersão de poluentes atmosféricos. **Revista Ciência e Natura**, p.25–28, 2003.

VELLOSO, M. F.; STORCH, R. B.; PEREZ GUERRERO, J. S.; PIMENTEL, L. C. Estudo do transporte de poluentes na camada limite atmosférica a partir de dois modelos algébricos para o coeficiente de difusão turbulenta e transformação integral. In **XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**, p.1–16, 2004.

VENKATRAM, A.; BRODE, R.; CIMORELLI, A.; LEE, R. A complex terrain dispersion model for regulatory applications. **Atmospheric Environment**, v.35/24, p.4211–4221, 2001.

VILHENA, M.; RIZZA, U.; DEGRAZIA, G.; MANGIA, C.; MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. An analytical air pollution model: Development and evalution. **Contributions to Atmospheric Physics**, v.71, p.315–320, 1998.

VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; DEGRAZIA, G. A.; QUADROS, R. S. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v.391, p.2576–2584, 2012b.

VILHENA, M. T.; COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. A semi-analytical solution for the three-dimensional advection-diffusion equation considering non-local turbulence closure. **Atmospheric Research**, v.1, p.63–69, 2008.

WORTMANN, S.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M.; BUSKE, D. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, p.2171–2178, 2005.

YEH, G.; HUANG, C. Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere. **Boundary Layer Meteorology**, v.9, p.381–390, 1975.

8 APÊNDICE A - POLLUTANT DISPERSION SIMULATION DURING SUNSET TRANSITION TIME USING AN ANALYTICAL EULERIAN MODEL

Artigo publicado na revista American Journal of Environmental Engineering (AJEE), volume 6(4A), páginas 40-45, no ano de 2016.

Pollutant Dispersion Simulation During Sunset Transition Time Using an Analytical Eulerian Model

Jéssica K. Reis, Jonas C. Carvalho*, Daniela Buske, Regis S. Quadros

Pos-Graduate Program in Mathematical Modeling, Federal University of Pelotas, Pelotas, Brazil

Abstract In this study an analytical Eulerian model is employed to simulate the pollutant concentrations released from continuous point source during the sunset transition period. The analysis applies the dispersion model parameterized by the stable and decaying convective eddy diffusivities, representing the turbulent mixing in the stable boundary layer and residual layer. The concentration simulations are calculated considering different times in the transition process through the sunset period. The results presented in this paper show similarity with ones reported in the literature, where the mixing strong action generated by the decaying convective energy-containing eddies in the RL causes an effective entrance of pollutants to the interior of the recently established SBL. During the initial stage of the transition period, in which the SBL presents a small depth, the combination between residual convective and stable eddies act efficiently to transport the pollutants in direction to the ground surface. For the later stages, the height of the SBL depth reaches the point source height so that the dispersion occurs in a large vertical extension that is dominated by stable turbulence. The lack of effective turbulent mixing, acting over the vertical extension of the SBL, prevents pollutants to reach the surface. In the present contribution focus is put on an analytical description of the pollutant dispersion occurring around the evening transition, which allows simulate the turbulent transport in a computationally efficient procedure.

Keywords Planetary boundary-layer, Stable boundary layer, Residual layer, Pollutant dispersion, Eulerian modeling, Turbulent parameterization, Analytical solution

1. Introduction

About one hour before sunset over land, the surface heat flux becomes negative and, consequently, a stable boundary-layer (SBL) develops near the ground [12, 17]. Above this SBL, in the residual layer (RL), the convective eddies start to lose their strength and the convective boundary-layer (CBL) begins to decay. The dispersion of pollutants by turbulent flows is of central importance in a number of environmental problems, but less attention has been paid to the dispersion in the RL, where the diffusion of pollutants occurs in conditions of decaying convective turbulence. The decay of energy-containing eddies in the CBL is the physical mechanism that can sustain the dispersion process in the RL.

Turbulence decay in the CBL has been studied by [12] using the dynamical equation for the energy density spectrum, by [5, 16, 17, 19, 20] employing LES models and by [9] employing a random displacement model. Experimental results has been reported by [1, 2, 10, 14, 15].

In this paper is investigated the turbulent dispersion

process occurring during the sunset transition, focusing the characteristic patterns of the turbulent dispersion of pollutants released from a continuous point source in a diffusive PBL characterized by a decaying convective one. This analysis considers an analytical solution of the advection-diffusion equation, in which the turbulent effects are represented by eddy diffusivities for a SBL proposed by [11] and for a decaying turbulence in the CBL proposed by [11]. The use of these convective decaying eddy diffusivities in air quality models will generate realistic turbulent patterns associated to the sunset transition time. The simulation procedure is realized according methodology presented in [9], which used the random displacement equation to examine the dispersion process of contaminants emitted from low and tall sources during sunset period.

Thus, with these parameterizations (stable below and convective decaying turbulence aloft), the analytical Eulerian model can be used to evaluate the influence of the decaying convective eddies on the concentration field of pollutants released by elevated continuous point sources during the sunset transition time and the first hours of SBL development. The reason why adopting an analytical procedure instead of using the nowadays available computing power resides in the fact that once an analytical solution to a mathematical model is found one can claim that the problem has been solved. It is provided a closed form

* Corresponding author:

jonas.carvalho@ufpel.edu.br (Jonas C. Carvalho)

Published online at <http://journal.sapub.org/ajee>

Copyright © 2016 Scientific & Academic Publishing. All Rights Reserved

solution that may be tailored for numerical applications such as to reproduce the solution within a prescribed precision. As a consequence the error analysis reduces to model validation only, in comparison to numerical approaches where in general it is not straight forward to disentangle model errors from numerical ones [7].

2. Turbulence Parameterization

The aim of this section to exhibit and discuss the eddy diffusivities that have been employed in the analytical model to simulate the concentration field of contaminants by an elevated continuous point source during the sunset transition time. So, it is necessary parameterize the turbulent transport in a shear-dominated stable PBL and the decaying convective elevated turbulent dispersion.

2.1. Parameterization of the Stable PBL

The following relationships for longitudinal, lateral and vertical eddy diffusivities K_i ($i = u, v, w$) derived by [11], represent the turbulent diffusion in a shear-dominated stable PBL:

$$K_i = C_i \frac{(1-z/h)^{3/4}(u)_0}{1+3.7\left(\frac{z}{L(z-z/h)^{5/4}}\right)} \quad (1)$$

in which $C_x = 4.94$, $C_y = 1.04$ and $C_z = 4.94$, L is the Obukhov length, $(u)_0$ is the surface layer friction velocity and h is the height of the stable layer. The magnitudes of the C_i coefficients in the numerator of Eq. (1) show that the eddy vertical motion is strongly limited by the positive stratification.

2.2. Parameterization of the Residual Layer

A general method to derive eddy diffusivities in a decaying turbulence in the CBL has been proposed by [13]. The method is based on a model for the budget equation describing the energy density spectrum and the Taylor statistical diffusion theory. The turbulent field has been considered isotropic to calculate the longitudinal and lateral eddy diffusivities and non-isotropic to derive the vertical eddy diffusivity. The following relationships represent fits to the decaying convective eddy diffusivities obtained from the model proposed by [13]:

$$\frac{K_x}{w*z_i} = \frac{0.069}{\sqrt{1+t^{1.44}}} \quad (2a)$$

$$\frac{K_y}{w*z_i} = \frac{0.079}{\sqrt{1+t^{1.44}}} \quad (2b)$$

and

$$\frac{K_z}{w*z_i} = \frac{0.079}{\sqrt{1+2t^{1.44}}} \quad (2c)$$

where z_i is the height of the mixing layer, w is the convective velocity scale and $t = t_w / z_i$.

3. Eulerian Modelling

The Eulerian model considered here is represented by the advection-diffusion equation. We must recall that this equation is obtained combining the continuity equation ruled by the conservation law with the Fickian closure of turbulence. Indeed, we write the advection-diffusion equation in Cartesian geometry like [6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + \dot{u} \frac{\partial c}{\partial x} + \dot{v} \frac{\partial c}{\partial y} + \dot{w} \frac{\partial c}{\partial z} = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

subject to the following boundary and initial conditions:

$$K_z \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \text{ at } z = 0, h \quad (3a)$$

$$K_y \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \text{ at } y = 0, L_y \quad (3b)$$

$$K_x \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \text{ at } x = 0, L_x \quad (3c)$$

$$c(x, y, z, 0) = 0 \text{ at } t = 0 \quad (3d)$$

and by a source condition quoted as:

$$\dot{u}c(0, y, z, t) = Q\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - H_s) \quad (3e)$$

where c denotes the mean concentration of a passive contaminant, \dot{u} , \dot{v} and \dot{w} are the cartesian components of the mean wind in the directions x ($0 < x < L_x$), y ($0 < y < L_y$) and z ($0 < z < h$) and K_x , K_y and K_z are the eddy diffusivities. Q is the emission rate, h the height of the atmospheric boundary layer, H_s the height of the source, L_x and L_y are the limits in the x and y -axis and far away from the source and δ represents the Dirac delta function. The source position is at $x = x_0$, $y = y_0$ and $z = H_s$.

Problem (3) is solved by the 3D-GILTT method [7, 8]. In the initial step it is expanded, without physical equivalence, the contaminant concentration in a series in terms of a set of orthogonal eigenfunctions. These eigenfunctions are the solution of a simpler but similar problem to the existing one. Replacing this expansion in the Eq. (3), the resulting problem reduces to a two-dimensional one already solved by the Laplace transform technique and GILTT method as shown in [15, 16]. For the simulations, the methodology presented by [15, 16] is considered. Here we assumed a Cartesian coordinate system in which the x direction coincides with the one of the predominant wind, the advection is much larger than the diffusion in the x -direction and the crosswind integration of the Eq. (3).

The micrometeorological parameters $z_i = 1350$ m, $w = 2.3 \text{ m s}^{-1}$, $L = 4.8$ m and $u = 0.26 \text{ m s}^{-1}$ [16] were considered for generating the eddy diffusivity profiles during the simulation. The simulations started at the moment of sunset when the surface heat flux progressively decreases and a stable boundary-layer develops near the ground. Profiles of eddy diffusivities suggested by [11] were informed to the stable boundary layer and derived by [13] (Eqs. 1-3) were informed to the residual layer. The evolution of the PBL height was calculated according to the expression $h = 70\sqrt{t}$

[2], where h is given in meters and t in hours. During the simulation, new profiles of eddy diffusivities and new values of SBL height were provided to the model in intervals according to Table 1.

Table 1. Simulation time (t) and SBL height according expression ($h = 70\sqrt{t}$)

t (s)	900	1800	2700	3600	4500
 (m)	35	50	60	70	80

4. Results

In this section is discussed the simulation results obtained with the Eulerian analytical model (Eq. 3) parameterized by the eddy diffusivities given by the Eqs. (1), (2a), (2b) and (2c). For the sunset transition period there will be analyzed the simulation of the cross-wind concentration field of contaminants released from a continuous point source at a height of 60m. The dispersion simulation is realized during the evolution time of the sunset transition according to Table 1.

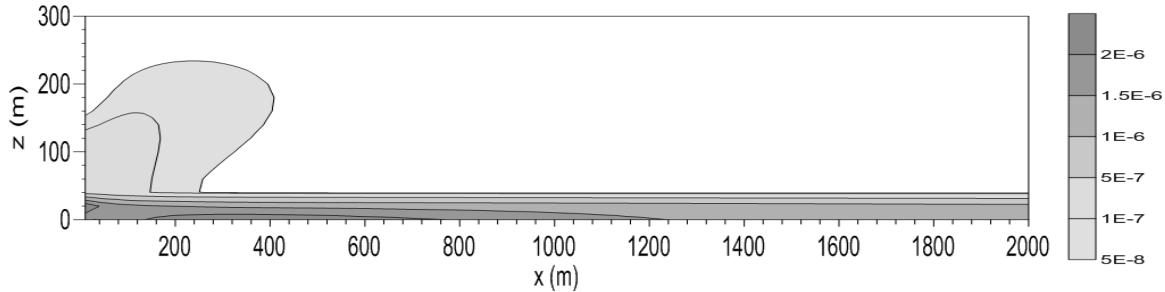


Figure 1. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 35 m. Concentration in g m^{-3}

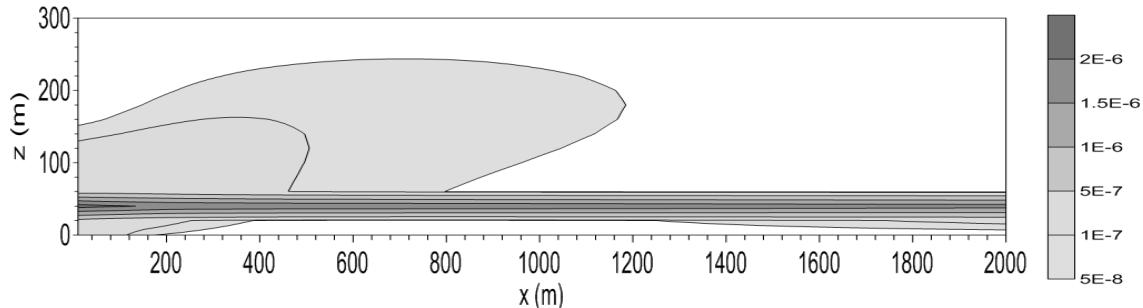


Figure 2. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 50 m. Concentration in g m^{-3}

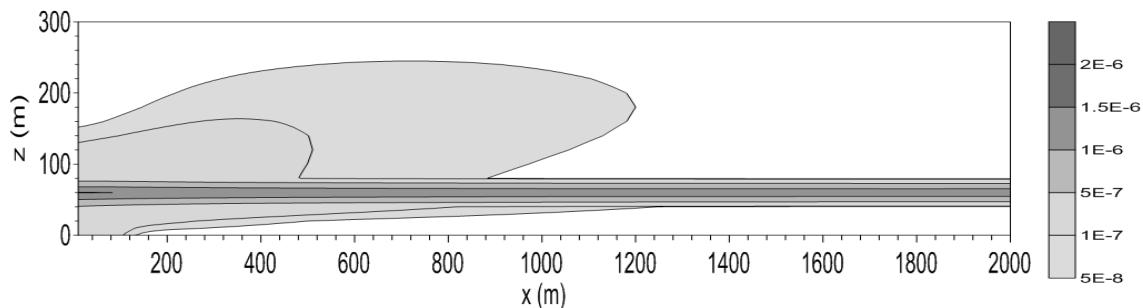


Figure 3. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 60 m. Concentration in g m^{-3}

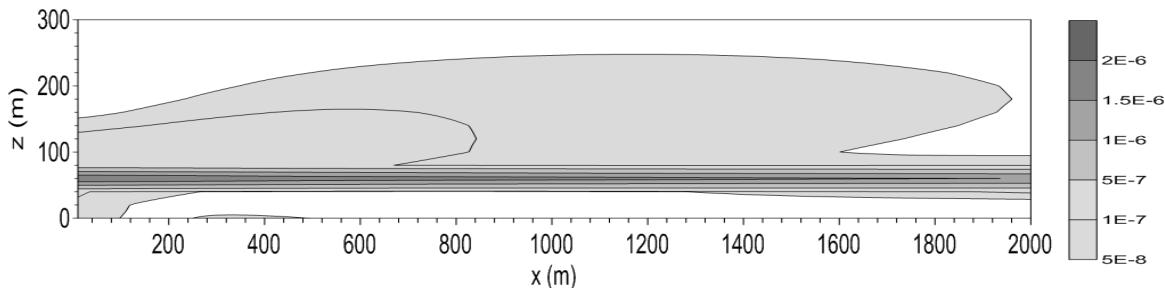


Figure 4. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 70 m. Concentration in g m^{-3}

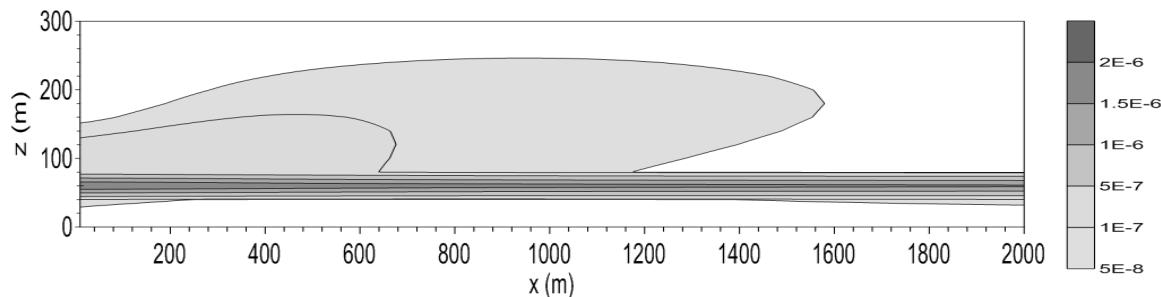


Figure 5. Cross-wind concentration field (x-z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 80 m. Concentration in g m^{-3}

Fig. 1 exhibits dispersion effects for the initial time of 900s and height of the stable layer of 35m. Analyzing the diffusion pattern associated to this figure it can be seen that the contaminants released from the source directly into the RL suffer a strong mixing action. This intense level of dispersion associated to the decaying turbulence in the RL is responsible for the entrance of contaminants to the interior of the SBL. It is possible to notice also that the contaminants go through in the interior of the SBL and reach the ground next to the point source. The dispersion effect of the decaying convective eddies in the RL over the plume of contaminant, pushes it down toward the top of the SBL and is captured by this new environment containing different diffusion properties. Then, the plume of contaminants disperses under the action of shear-dominated stable turbulence in the interior of the SBL. The stable turbulence from mechanical origin, is generated by the surface wind shear and consequently the energy-containing eddies in this layer are in the proximity to the surface. For a continuous stable turbulence, sustained by the mechanical forcing, the turbulent vertical velocity variance decreases with the height and this variance asymmetry (vertical inhomogeneous turbulence), induces an acceleration (drift velocity) that transports the contaminants in the direction to the surface where the wind shear turbulence diffusion action is dominant. This transport downward, associated to the wind shear turbulence above discussed, is particularly dominant in SBLs that present a small depth. In this thin initial SBL the effects of surface turbulence generation influence the major part of the SBL vertical extension.

Figs. 2 and 3 present the simulation results for the evolution times $t = 1800\text{s}$ and 2700s , and heights of the stable layer of 50m and 60m, respectively. These figures exhibit the noticeable reduction of the concentration of contaminants in the surface due the SBL expansion and the loss of the diffusion capacity of the decaying convective energy-containing eddies. The loss of the diffusion capacity contributes to reduce the entrance of contaminants into the SBL and therefore to decrease the surface contaminant concentrations. The deepening of the SBL tends to engulf the RL region and covers the emission source, that reduces the dispersion process generated by the decaying convective eddies and the contaminants are emitted in an ambient where the diffusion is directed by mechanical turbulence. Figure 2 shows a configuration in which the maximum of concentration is increasingly inside the SBL. For the

evolution time of 2700s, showed in Fig. 3, the height of the SBL reaches the height of the point source and consequently the contaminants are emitted into the SBL. For this source localization, the contaminants can travel long distances touch less the surface and, as result, the ground concentration is decreased as can be seen in figures 1-5. A quantity of contaminant, emitted during evolution times 900s and 1800s inside the RL, continues to experience the dispersion generated by the decaying convective eddies.

For the final phase of the sunset transition period the SBL height increases and supplants the contaminants point source height and hence the dispersion occurs in a stable boundary layer environment. In this stable turbulent field, characterized by small mechanical eddies, the low magnitude of the eddy diffusivities generates a very little spread in the vertical direction. This condition generate a fanning plume shape frequently observed in stable boundary layers, so that the plume acquires the shape of an angular fan, with a large spread in the horizontal and vary little spread, if any, in the vertical direction. This characteristic shape occurs typically at night in a very SBL with strong surface inversion and weak and variable winds [3]. This diffusion pattern is reproduced in Figs. 4 and 5, which show the crosswind concentration field for the final evolution times $t=3600\text{s}$ and $t=4500\text{s}$, respectively. The figures show that the plume travels for long distance and the maximum of the concentration remains in the same level of the emission source. The low magnitude of the eddy diffusivities generates a very little spread in the vertical direction and it avoids the arrival of contaminants in the surface. For these evolution times, the decaying convective eddies have still sufficiently energy for dispersing the contaminants emitted inside the RL when the SBL height was shorter than the source height. These results are similar to the ones obtained by [9] in a numerical approach, using a Lagrangian particle model.

5. Conclusions

In this study an analytical description was employed to simulate the pollutants concentration released from continuous point source during the sunset transition period. The analysis applied the dispersion model parameterized by the stable and decaying convective eddy diffusivities, representing the turbulent mixing in the SBL and RL. The

concentration simulations were calculated considering different times in the transition process through the sunset period. The simulations analyzed the crosswind concentration field of contaminants released from a continuous point source at a height of 60m.

The simulations showed that during the initial evolution times during the sunset transition, the turbulent diffusion generated by the decaying convective eddies in the RL caused an effective transference of contaminants to the interior of the SBL. During the initial stage, in which the SBL presents a small depth, the combination between residual convective and stable eddies acts efficiently to transport the pollutants in direction to the ground surface. Therefore, the present analysis showed that for this initial time, the combination between residual convective and stable eddies acts to transport the contaminants in direction to the ground, increasing the concentration at the surface.

For the final phase of the sunset transition period the SBL height reached the point source height and the dispersion occurred in a stable environment. This condition generated a fanning plume shape, which is characterized by a large spread in the horizontal and very little spread in the vertical direction. The results showed that the plume traveled for long distance and the maximum of the concentration remains in the same level of the emission source. As a consequence of this lack of an effective turbulent mixing, acting over the whole vertical extension of the SBL, the contaminants do not arrive at the surface.

The results presented in this paper show similarity with ones reported in the literature, where the strong mixing action generated by the decaying convective energy-containing eddies in the RL causes an effective entrance of pollutants to the interior of the recently established SBL.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors acknowledge the financial support provided by CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) and FAPERGS (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul).

REFERENCES

- [1] O.C. Acevedo, D.R. Fitzjarrald, The early evening surface layer transition: temporal and spatial variability, *J. Atmos. Sciences* 58(17), 2650-2667, 2001.
- [2] D. Anfossi, P. Bacci, A. Longhetto, An application of Lidar technique to the study of nocturnal radiation inversion, *Atmos. Environ.* 8, 537-541, 1974.
- [3] D. Anfossi, G.A. Degrazia, A.G. Goulart, Atmospheric turbulence decay during the solar total eclipse of 11 August 1999, *Boundary-Layer Meteor.* 111, 301-311, 2004.
- [4] S. Arya, *Air Pollution Meteorology and Dispersion*, Oxford University Press, New York, 1999.
- [5] R.J. Bear, J.M. Edwards, A.J. Lapworth, Simulation of the observed evening transition and nocturnal boundary layer: Large-eddy modeling, *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 132, 81-99, 2006.
- [6] A.K. Blackadar, *Turbulence and diffusion in the atmosphere: Lectures in Environmental Sciences*, Springer-Verlag, 1997.
- [7] D. Buske, M.T. Vilhena, B. Bodmann, T. Tirabassi, Analytical Model for Air Pollution in the Atmospheric Boundary Layer, *Air Pollution*, M. Khare (org.), 39-58, 2012a.
- [8] D. Buske, M.T. Vilhena, T. Tirabassi, B. Bodmann, Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution, *JEP* 3, 1124-1134, 2012b.
- [9] J.C. Carvalho, G.A. Degrazia, D. Anfossi, A.G. Goulart, G.C. Cuchiara, L. Mortarini, L., Simulating characteristic patterns of the dispersion during sunset PBL, *Atmos. Research* 98, 274-284, 2010.
- [10] S.J. Caughey, J.C. Kaimal, Vertical heat flux in the convective boundary layer, *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 103, 811-815, 1997.
- [11] G.A. Degrazia, D. Anfossi, J.C. Carvalho, C. Mangia, T. Tirabassi, Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions, *Atmos. Environ.* 34, 3575-3583, 2000.
- [12] A.G. Goulart, G.A. Degrazia, U. Rizza, D. Anfossi, A theoretical model for the study of the convective turbulence decay and comparison with LES data, *Boundary-Layer Meteor.* 107, 143-155, 2003.
- [13] A.G. Goulart, M. Vilhena, G. Degrazia, D. Flores, Vertical, lateral and longitudinal eddy diffusivities for a decaying turbulence in the convective boundary layer, *Ecol. Modelling* 204, 516-522, 2007.
- [14] A.L.M. Grant, An observational study of the evening transition boundary-layer, *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 123, 657-677, 1997.
- [15] A.W. Grimsdell, W.M. Angevine, Observations of the afternoon transition of the convective boundary layer, *J. Applied Meteor.* 41, 3-11, 2002.
- [16] D.M. Moreira, M.T. Vilhena, D. Buske, T. Tirabassi, The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL, *Atmos. Environ.* 40, 3186-3194, 2006.
- [17] D.M. Moreira, M.T. Vilhena, D. Buske, T. Tirabassi, The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere, *Atmos. Research* 92 1-17, 2009.
- [18] F.T.M. Nieuwstadt, R.A. Brost, The decay of convective turbulence, *J. Atmos. Sciences* 43, 532-546, 1986.
- [19] D. Pino, H.J.J. Jonker, J. Vilà-Guerau de Arellano, A. Dosio, Role of shear and the inversion strength during sunset turbulence over land: Characteristic length scales, *Boundary-Layer Meteor.* 121 (3), 537-556, 2006.

- [20] Z. Sorbjan, Decay of Convective Revisited, Boundary-Layer Meteor. 82, 501–515, 1997.
- [21] Z. Sorbjan, Numerical study of daily transitions in the atmospheric boundary layer, Boundary-Layer Meteor. 123, 365-383, 2007.

9 APÊNDICE B - ESTUDO EULERIANO DO DECAIMENTO DA CLP

Artigo publicado na Revista de Tecnologias (RETEC), volume 9, número 3, páginas 75-79, no ano de 2016.

ESTUDO EULERIANO DO DECAIMENTO DA CLP

Jéssica Kanopp dos Reis¹, Jonas da Costa Carvalho², Daniela Buske³e Régis Sperotto de Quadros⁴

Resumo

Neste estudo, um modelo analítico Euleriano é utilizado para simular a concentração de poluentes emitidos a partir de uma fonte pontual contínua durante o período de transição dia-noite. A análise aplica o modelo de dispersão parametrizado por coeficientes de difusão da camada limite estável e camada pré-residual. As simulações da concentração são realizadas considerando diferentes intervalos de tempos no processo de transição durante o pôr do sol. Os resultados apresentados neste trabalho mostram similaridade com aqueles encontrados na literatura onde a ação da mistura turbulenta gerada pelo decaimento da energia convectiva na camada residual causa uma transferência efetiva dos poluentes para o interior da camada limite estável. Durante o estágio inicial do período de transição, no qual a camada estável apresenta pouca profundidade, a combinação entre turbilhões convectivos e estáveis agem eficientemente para transportar os poluentes em direção à superfície. Para o estágio posterior, a altura da camada estável alcança a altura da fonte pontual tal que a dispersão ocorre numa extensão vertical mais profunda que é dominada pela turbulência estável. A falta de uma mistura turbulenta efetiva, agindo sobre a extensão vertical da camada limite estável, impede que os poluentes cheguem à superfície. Este trabalho tem no seu foco principal uma descrição analítica da dispersão de poluentes ocorrendo em torno do pôr do sol, a qual permite simular o transporte turbulento de forma computacionalmente eficiente.

Palavras-Chave: Camada Pré-residual, Camada Limite Estável, Modelo Analítico Euleriano.

Abstract

In this study, an analytical Eulerian model was employed to simulate the pollutants concentration released from continuous point source during the sunset transition period. The analysis applies the dispersion model parameterized by the stable and decaying convective eddy diffusivities, representing the turbulent mixing in the stable boundary layer and pre-residual layer. The concentration simulations were calculated considering different times in the transition process through the sunset period. The results presented In this work show similarity with ones reported by literature, where the mixing strong action caused by the decaying convective energy-containing eddies in the RL causes an effective entrance of pollutants to the interior of the recently established SBL. During the initial stage of the transition period, in which the SBL presents a small depth, the combination between residual convective and stable eddies acts efficiently to transport the pollutants in direction to the ground surface. For the later stages, the height of the SBL depth reaches the point source height so that the dispersion occurs in a large vertical extension that is dominated by a stable turbulence. The lack of an effective turbulent mixing, acting over the vertical extension of the SBL, prevents that pollutants do reach

¹ Mestranda do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática pela UFPel; e-mail: jessicareis15@hotmail.com.

² Professor do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática pela UFPel; e-mail: jonas.carvalho@ufpel.edu.br.

³ Professora do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática pela UFPel; e-mail: daniela.buske@ufpel.edu.br.

⁴ Professor do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática pela UFPel; e-mail: regis.quadros@ufpel.edu.br.

the surface. In the present contribution was focused on an analytical description of the pollutant dispersion occurring around the evening transition, which allows simulate the turbulent transport in a computationally efficient procedure.

Keywords: Pre-residual layer, Stable boundary layer, Eulerian Analytical Model.

Introdução

A turbulência na camada limite planetária (CLP) é um fenômeno físico complexo controlado pela ação de diferentes forçantes. Um exemplo importante está associado ao processo que ocorre diariamente na CLP durante o período de transição dia-noite. Aproximadamente 1 hora antes do pôr do sol, o fluxo de calor na superfície diminui progressivamente e, então, torna-se negativo durante a noite e, consequentemente, uma camada limite estável (CLE) desenvolve-se junto à superfície. Acima da CLE, na camada residual (CR), os turbilhões convectivos começam a perder intensidade e capacidade de mistura e, assim, a camada limite convectiva (CLC) começa a decair. A CR é definida como uma camada estaticamente neutra, caracterizada por turbulência esporádica fraca, que encontra-se acima da CLE e abaixo da inversão de temperatura (capa de inversão), separando a camada limite da atmosfera livre. Por definição, ela desenvolve-se somente após a superfície começar a se estratificar de forma estável. Portanto, é usual denominar a região de turbulência fraca que existe durante condições instáveis, precedendo a CR, como camada pré-residual (NILSSON et al., 2016).

A dispersão de poluentes por escoamentos turbulentos é de importância central em um número de problemas ambientais. Porém, menos atenção tem sido dada à dispersão na camada pré-residual, onde a difusão de poluentes ocorre em condições de decaimento da turbulência convectiva. O decaimento da energia dos grandes turbilhões na CLC é o mecanismo físico que pode sustentar o processo de dispersão na camada pré-residual.

Neste estudo é investigado o processo de dispersão turbulenta durante o período do pôr do sol, com o objetivo de avaliar os padrões característicos da dispersão turbulenta de poluentes liberados de uma fonte pontual contínua em uma camada limite planetária (CLP) caracterizada pelo decaimento convectivo. Esta análise considera uma solução analítica da equação advecção-difusão, na qual os efeitos turbulentos são representados por coeficientes de difusão para a CLE e para o decaimento da turbulência na CLC. A utilização destes coeficientes de difusão em modelos de qualidade do ar gera padrões de turbulência realistas associados ao tempo de transição dia-noite.

Para simular a dispersão turbulenta durante o período do pôr do sol é utilizado um procedimento analítico, sendo fornecida uma solução de forma fechada, que pode ser adaptada para aplicações em métodos numéricos para reproduzir a solução dentro de uma precisão prescrita. Como consequência, a análise de erro é reduzida em comparação as aproximações numéricas (BUSKE et. al., 2012).

O decaimento da turbulência na CLC foi investigado por Goulart et. al. (2003), usando a equação para o espectro de energia turbulenta, e por Nieuwstadt et. al. (1986), Sorbjan (1997), Bear et. al. (2006), Pino et. al. (2006) e Sorbjan (2007) empregando modelo de simulação dos grande turbilhões LES (*Large-Eddy Simulation*). Além disso, Caughey et. al. (1977), Grant (1997), Anfossi (2004), Carvalho et. al. (2010) e Nadeau et. al. (2011) apresentaram alguns resultados experimentais durante o período de transição dia-noite.

1 Modelo euleriano

O modelo Euleriano aqui considerado é representado pela equação de advecção-difusão. Deve-se lembrar que esta equação é obtida combinando a equação de continuidade com o fechamento Fickiano da turbulência. Podendo assim, escrever a equação de advecção-difusão em geometria cartesiana como (BLACKADAR, 1997):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + S \quad (1)$$

onde \bar{c} indica a concentração média de um contaminante passivo (em unidades de gm^{-3}) e S é o termo fonte. A difusividade turbulenta $K = diag(K_x K_y K_z)$ (em unidades de m^2/s) é representada por uma matriz diagonal com as componentes cartesianas nas direções x , y e z , respectivamente. Na primeira ordem de fechamento, todas as informações sobre a complexidade turbulenta estão contidas na difusividade turbulenta.

A equação (1) é considerada válida no domínio delimitado por $0 < x < L_x$, $0 < y < L_y$ e $0 < z < z_i$ e sujeito às seguintes condições (contorno, inicial e fonte):

$$K \nabla \bar{c}|_{(0,0,0)} = K \nabla \bar{c}|_{(L_x, L_y, z_i)} = 0 \quad \text{para } t > 0 \quad (2)$$

$$\bar{c}(x, y, z, 0) = 0 \quad \text{em } t = 0 \quad (3)$$

$$\bar{u}\bar{c}(0, y, z, t) = Q \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \quad (4)$$

onde Q é a taxa de emissão (em unidades de g/s), z_i é a altura da CLP (em unidades de m), o H_s é a altura da fonte (em unidades de m), L_x e L_y são os limites horizontais do domínio (em unidades de m) e $\delta(x)$ representa a função delta de Dirac. O problema (1) já foi resolvido em Buske et. al. (2012) através do método 3D-GILTT (*Three-dimensional Generalized Integral*

Laplace Transform Technique) aplicando o método de Transformada de Laplace, o método 3D-GILTT é aplicado em problemas de dispersão de poluentes na atmosfera, onde inclui os problemas que consideram o coeficiente de dispersão dependente do tempo.

Neste artigo, é assumido inicialmente, sem perda de generalidade, que o transporte do poluente é realizado pela componente longitudinal da velocidade média do vento ($U_1 \neq 0, U_2 = 0, U_3 = 0$), o fluxo turbulento é não homogêneo apenas em relação à vertical $\partial/\partial_{x_1} = 0, \partial/\partial_{x_2} = 0, \partial/\partial_{x_3} \neq 0$, e o tensor de difusividade turbulenta é diagonal ($K_{ij} = 0$ se $i \neq j$), obtendo assim o seguinte problema bidimensional:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (5)$$

O problema (5) é resolvido pela transformada de Laplace e pelo método de GILTT. Aplicando a transformada de Laplace na variável temporal, obtém-se um problema estacionário, com solução conhecida e encontrada pelo método GILTT. Basicamente, a solução do problema proposto pelo método GILTT se dá nas seguintes etapas: Na etapa inicial a concentração de poluentes é expandida em série, em termos de um conjunto de funções ortogonais, obtidas da solução de um problema auxiliar de Sturm-Liouville. Substituindo esta expansão na equação de advecção-difusão estacionária, e integrando em todo o domínio, resulta em um sistema de EDO's (equações diferenciais ordinárias), chamado de problema transformado. Tal problema já foi resolvido pela técnica de transformada de Laplace e diagonalização. Detalhes no trabalho de Moreira et. al. (2009).

O domínio horizontal foi configurado com 2x2 km e o domínio vertical igual à altura da CLE. Os parâmetros micrometeorológicos $z_i = 1350m$, $w_* = 2.3 \text{ ms}^{-1}$, $L = 4.8m$, e $u_* = 0.26 \text{ ms}^{-1}$ foram considerados para gerar os perfis de difusividade turbulenta (NIEUWSTADT et. al., 1986). A altura da CLP é calculada de acordo com a expressão $h = 70\sqrt{t}$, obtida a partir de medições experimentais realizados por Anfossi et. al. (1974), onde h é dado em metros e t em horas. Durante a simulação, os novos perfis de coeficientes de difusão e os novos valores de altura de CLE são fornecidos de acordo com a sequência apresentada na Tabela 1.

Tabela 1 - Evolução da altura da CLE de acordo com a expressão $h = 70\sqrt{t}$.

t(s)	900	1800	2700	3600	4500
h(m)	35	50	60	70	80

Fonte: Elaborada pelos autores.

2 Parametrização do tempo da transição do pôr do sol

Nos modelos de difusão atmosféricas a escolha correta da parametrização turbulenta desempenha um papel chave para calcular a concentração de contaminantes na CLP. Portanto, a precisão de cada modelo para simular corretamente o campo de concentração de contaminantes é uma função direta dos parâmetros turbulentos que estão relacionados às propriedades dinâmicas e termodinâmicas da CLP. Como consequência, os coeficientes de difusão são propriedades do fluxo turbulento e são descritos em termos de características físicas e magnitude da difusão em uma CLP (VENKATRAM et. al., 2001). Nesta seção serão apresentadas uma formulação para a parametrização da turbulência na CLE e na camada pré-residual. Estas parametrizações serão aplicadas nos modelos de partículas Eulerianos para realizar as simulações de poluentes durante o período do pôr do sol.

2.1 Parametrização da turbulência na camada limite estável

A dispersão da turbulência é gerada junto a superfície através de processos mecânicos que estão relacionados com o cisalhamento do vento. Em uma CLP estável existe uma relação entre a turbulência gerada pelo cisalhamento do vento e pelos efeitos de estratificação em uma camada estável. Portanto, nesta descrição da dispersão dos poluentes no período de transição dia-noite, uma camada superficial estável é considerada, na qual uma turbulência contínua e um fluxo de calor turbulento negativo coexistem (NIEUWSTADT, 1984). As seguintes relações para os coeficientes de difusão longitudinal, lateral e vertical, derivadas por Degrazia et. al. (2000), representam a difusão turbulenta dominadas por cisalhamento em uma CLP estável:

$$K_i = C_i \frac{(1-z/h)^{3/4} u_*}{1+3,7 \left(\frac{z}{L(z-z/h)^{5/4}} \right)} \quad (6)$$

onde ($i = uvw$), em que $C_x = 4,94$, $C_y = 1,04$ e $C_z = 0,41$, L é o comprimento de Obukhov, u_* é a velocidade de fricção da camada de superfície e h é a altura da camada estável. As magnitudes de C_i indicam que o movimento vertical é fortemente limitado pela estratificação na CLP noturna.

3.2 Parametrização da turbulência na camada pré-residual

Recentemente, um método geral para derivar os coeficientes de difusão turbulentos em uma CLC em decaimento foi proposto por Goulart et. al. (2007). O método baseia-se em um modelo para a densidade de energia de uma equação dinâmica 3D e a teoria de difusão

estatística de Taylor. Por conseguinte, é obtida uma solução analítica da equação em termos de um espectro inicial 3D, a qual se descreve o espectro da turbulência observada na CLC. Além disso, como consequência da decomposição da turbulência não isotrópica, este espectro é calculado a partir do espectro 1D, através da utilização de uma metodologia desenvolvida por Kristensen et. al. (1989). Na obtenção dos coeficientes de difusão longitudinal e lateral, o campo turbulento é considerado isotrópico. Já para o coeficiente de difusão vertical, a turbulência é considerada não-isotrópica. A seguinte relação algébrica proposta por Goulart et. al. (2007) representa um ajuste para as difusividades convectivas em decaimento:

$$\frac{K_x}{z_i w_*} = \frac{0,069}{\sqrt{1+t_*^{1,44}}} \quad (7)$$

$$\frac{K_y}{z_i w_*} = \frac{0,079}{\sqrt{1+t_*^{1,44}}} \quad (8)$$

$$\frac{K_z}{z_i w_*} = \frac{0,079}{\sqrt{1+2t_*^{1,7}}} \quad (9)$$

onde z_i é a altura da camada de mistura (m) e $t_* = tw_*/z_i$, w_* representa a velocidade convectiva (m/s) e t é o tempo (s).

3 Resultados

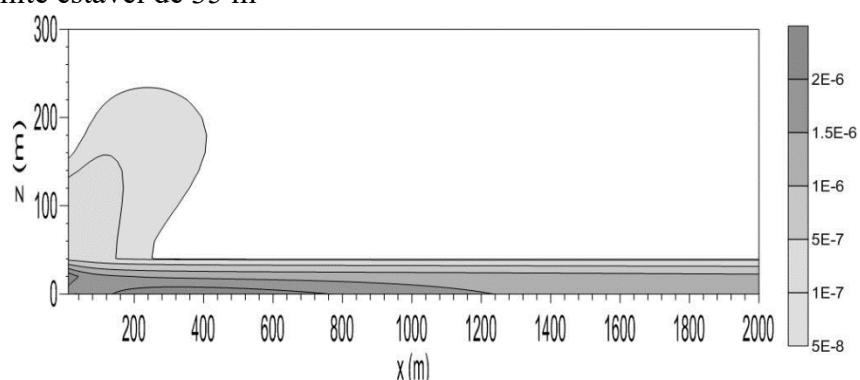
O objetivo desta seção é discutir os resultados das simulações da dispersão de poluentes na camada pré-residual e na camada limite estável (CLE). São apresentados resultados da concentração de contaminantes integrada perpendicular à direção preferencial do vento (C_y), emitidos a partir de uma fonte pontual contínua na altura de 60m.

As simulações iniciam no momento do pôr do sol quando o fluxo de calor na superfície diminui progressivamente e uma CLE desenvolve-se perto da superfície. Os resultados das simulações são gerados pelo modelo analítico Euleriano (Eq. 5), empregando perfis de coeficientes de difusão turbulenta para a CLE, sugeridos por Degrazia et. Al. (2000), Eq. (6), e perfis de coeficientes de difusão turbulenta para a camada pré-residual, derivados por Goulart et. al. (2007) (dadas nas Eqs. (7), (8) e (9)).

A Fig. 1 mostra o efeito da dispersão para o tempo inicial de $t=900$ s e altura da camada estável de 35m. Analisando o padrão de difusão associado a esta figura, pode-se notar que os contaminantes liberados na camada pré-residual sofrem uma forte ação de mistura ocasionada pela turbulência convectiva em decaimento. A intensidade do transporte associado à turbulência é responsável pela entrada de contaminantes para o interior da CLE até alcançar a superfície. O

efeito da dispersão na camada pré-residual sobre a pluma age no sentido de transportar os contaminantes para baixo em direção ao topo da CLE e, na sequência, é capturado por este novo ambiente com diferentes propriedades de difusão. Em seguida, a pluma de contaminantes se dispersa sob a ação da turbulência estável dominada por cisalhamento no interior da CLE. A turbulência de origem mecânica é gerada pelo cisalhamento do vento na superfície e, consequentemente, os turbilhões contendo energia estão localizados nas proximidades da superfície. Para uma turbulência contínua estável, a variância da velocidade vertical turbulenta diminui com a altura e esta assimetria de variância (turbulência vertical não homogênea) induz a uma aceleração que transporta os contaminantes em direção à superfície, onde o cisalhamento do vento é dominante. Este transporte para baixo, associada à turbulência mecânica, é particularmente dominante na CLE, que apresenta pouca profundidade. Observa-se, ainda, que o padrão de dispersão da pluma gerado pelo modelo Euleriano, mostrando forte mistura turbulenta na camada pré-residual e o transporte de contaminantes para dentro da CLE, assemelha-se ao padrão de dispersão gerado pelo modelo de partículas Lagrangeano, presente na literatura.

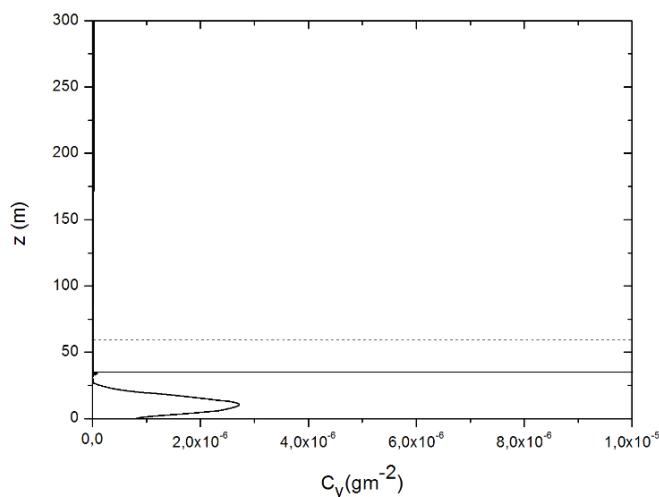
Figura 1 - Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 60m e altura da camada limite estável de 35 m



Fonte: Elaborada pelos autores.

O perfil de concentração integrada (C_y) apresentado na Fig. 2 evidencia o movimento da pluma de contaminantes em direção à superfície. A partir desta figura pode ser visto que, na distância de 1000 m a partir da fonte, existe um máximo de C_y dentro da CLE, o que significa uma considerável entrada de contaminantes para dentro desta camada. O modelo analítico Euleriano gera um perfil com configuração semelhante ao modelo Lagrangeano, mas com valores menores de C_y . Além disso, o máximo de concentração localiza-se mais próximo da superfície.

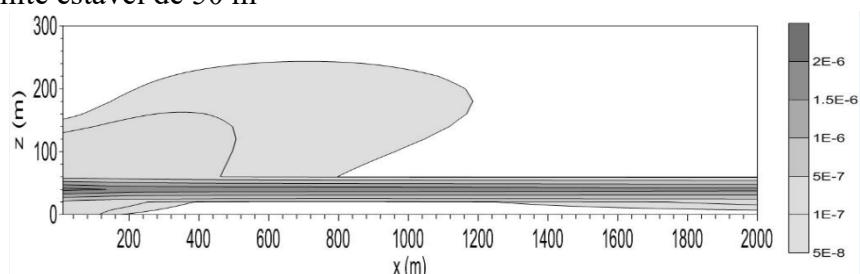
Figura 2 - Perfil de concentração na distância $x = 1000$ m para altura da fonte de 60 m e altura da CLE de 35m. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.



Fonte: Elaborada pelos autores.

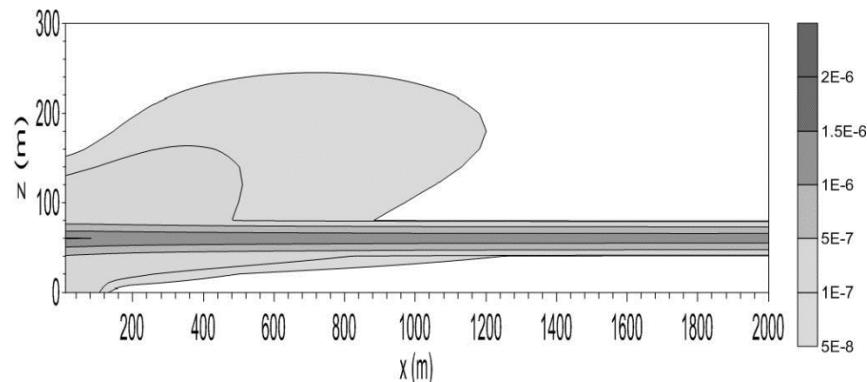
As Figs. 3 e 4 apresentam os resultados da simulação para os tempos $t=1800$ s e $t=2700$ s, e alturas da camada estável de 50m e 60m, respectivamente. Estas figuras mostram uma redução notável da concentração de contaminantes na superfície devido à evolução da altura da CLE e a perda da capacidade de difusão dos turbilhões contendo energia convectiva dentro da camada pré-residual; a perda da capacidade de difusão contribui para reduzir a entrada de contaminantes na superfície. O aprofundamento da CLE tende a engolfar a região da CR, reduzindo o processo de dispersão gerado pelos turbilhões convectivos em decaimento. Esse aumento da altura da CLE faz com que os contaminantes passem a ser emitidos em um ambiente de turbulência mecânica, gerado pelo atrito do vento na superfície. É possível observar na Fig. 3 uma configuração na qual o máximo de concentração está cada vez mais no interior da CLE. Analisando a Fig. 4, a altura da CLE cobre a fonte de emissão e, consequentemente, os contaminantes são liberados no limite entre a camada pré-residual e a CLE. Dentro da CLE, os contaminantes podem percorrer longas distâncias sem tocar a superfície e, como resultado, a concentração no solo é reduzida.

Figura 3 - Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 60m e altura da camada limite estável de 50 m



Fonte: Elaborada pelos autores.

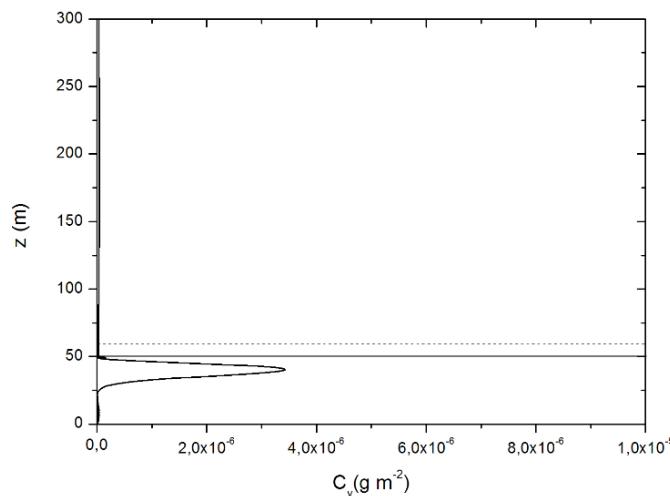
Figura 4 - Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 60m e altura da camada limite estável de 60 m.



Fonte: Elaborada pelos autores.

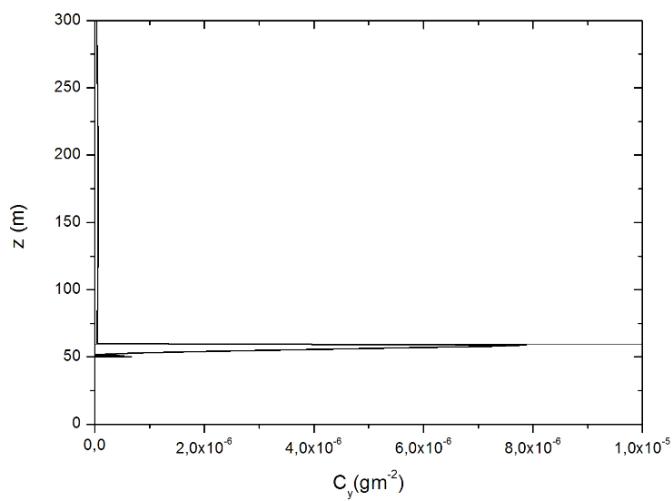
Estes comportamentos do padrão de dispersão também podem ser verificados nas Figs. 5 e 6, que apresentam os perfis de concentração C_y para as alturas de CLE de 50m e 60m, respectivamente. Quando a altura da CLE é 50m observa-se que, para a distância de 1000m a partir da fonte de emissão, o máximo de concentração ocorre em aproximadamente 40m de altura, evidenciando que existe entrada de contaminantes no interior da CLE e o transporte de contaminantes para a superfície. Já para a altura da CLE de 60 m, o máximo de concentração desloca-se um pouco mais para cima, ocorrendo uma diminuição significativa da concentração na superfície.

Figura 5 - Perfil de concentração na distância $x = 1000$ m para altura da fonte de 60 m e altura da CLE de 50m. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE.



Fonte: Elaborada pelos autores.

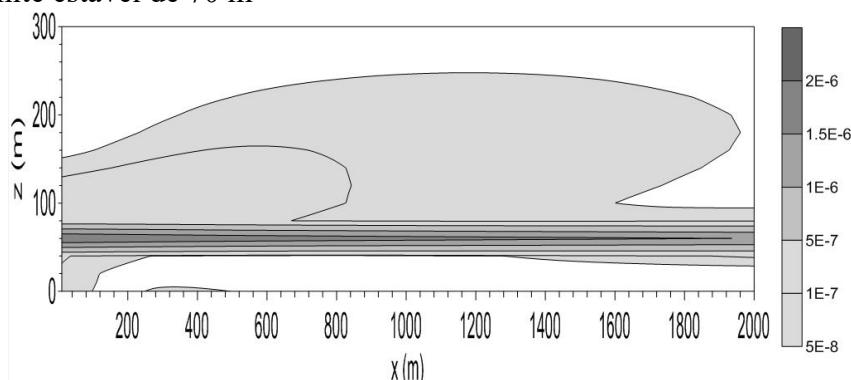
Figura 6 - Perfil de concentração na distância $x = 1000$ m para altura da fonte de 60 m e altura da CLE de 60m. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE



Fonte: Elaborada pelos autores.

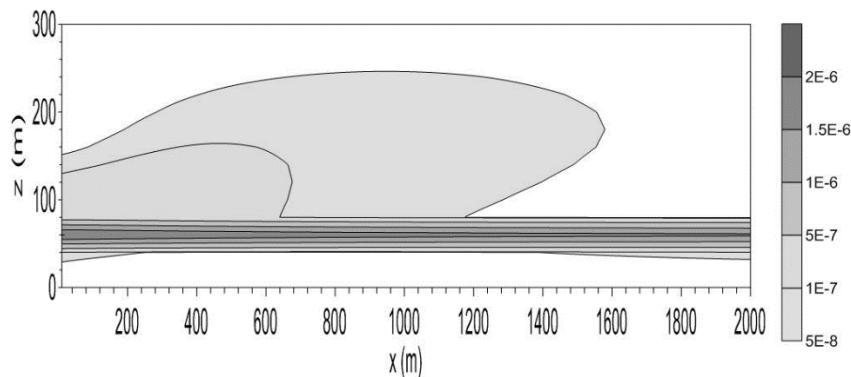
Na fase final do período do pôr do sol, a altura da CLE ultrapassa a altura da fonte de emissão e, portanto, a dispersão ocorre totalmente no ambiente estável. Neste ambiente, caracterizado pela atuação de pequenos turbilhões mecânicos, a baixa amplitude dos coeficientes de difusão gera pouca difusão tanto na direção horizontal quanto na direção vertical. Estas condições produzem uma pluma de contaminantes no formato *fanning*, frequentemente observada na camada limite estável, que sofre um transporte horizontal a grandes distâncias, por ação do vento médio. Este formato de pluma ocorre normalmente durante a noite, onde condições de vento fraco e inversão de temperatura na superfície são frequentemente observadas. Este padrão de dispersão é reproduzido nas Figs. 7 e 8, que mostram o campo de concentração para a evolução final com tempos de $t=3600\text{s}$ e $t=4500\text{s}$, respectivamente. Para estes tempos de evolução, os turbilhões convectivos em decaimento ainda têm energia suficiente para dispersar a pluma dentro da camada pré-residual quando a altura da CLE for menor do que a altura da fonte. Dentro da CLE, a pluma de contaminantes viaja a uma longa distância, com máximo de concentração no nível da fonte de emissão. Nesse ambiente, a baixa magnitude dos coeficientes de difusão gera pouca difusão na direção vertical, impossibilitando o transporte de contaminantes para a superfície. Estes resultados são semelhantes aos obtidos por Carvalho et. al. (2010), na abordagem numérica, utilizando um modelo de partículas Lagrangeano.

Figura 7 - Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 60m e altura da camada limite estável de 70 m



Fonte: Elaborada pelos autores.

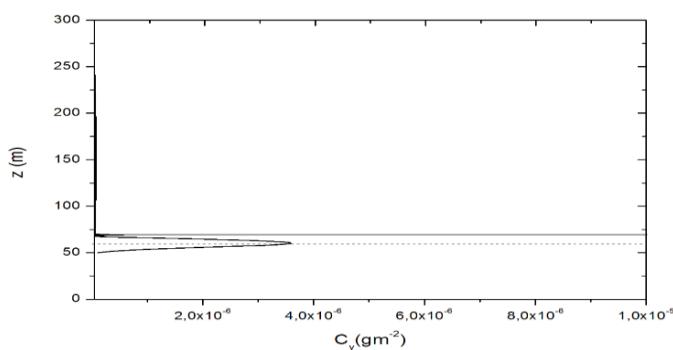
Figura 8 - Campo de concentração integrada (plano x-z) para emissão na altura de 60m e altura da camada limite estável de 80 m.



Fonte: Elaborada pelos autores.

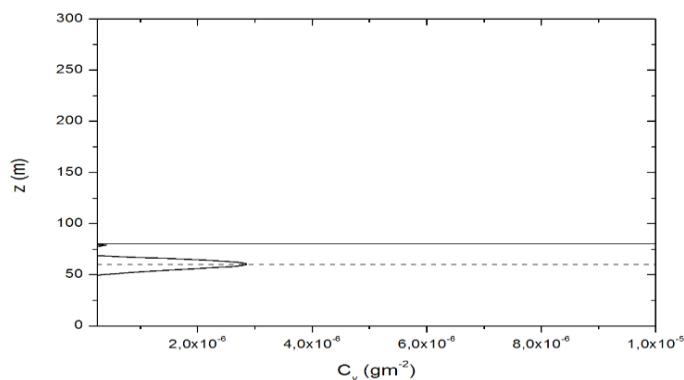
As Figs. 9 e 10 mostram os perfis de concentração C_y para as alturas de CLE 70m e 80m, respectivamente, a uma distância de 1000m a partir da fonte. Os perfis confirmam o comportamento dos campos de concentração, evidenciando o formato *fanning* da pluma de contaminantes devido à baixa magnitude dos coeficientes de difusão. Este padrão é o mesmo apresentado pelo modelo Lagrangeano, porém com valores menores de C_y .

Figura 9 - Perfil de concentração na distância $x = 1000$ m para altura da fonte de 60 m e altura da CLE de 70m. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE



Fonte: Elaborada pelos autores.

Figura 10 - Perfil de concentração na distância $x = 1000$ m para altura da fonte de 60 m e altura da CLE de 80m. A linha tracejada indica a altura da fonte enquanto a linha contínua indica a altura da CLE



Fonte: Elaborada pelos autores.

4 Conclusão

Neste estudo, foi utilizado um modelo Euleriano analítico para simular a concentração de poluentes liberados a partir da fonte pontual contínua durante o período de transição do pôr do sol. A análise aplica-se ao modelo de dispersão parametrizado por coeficientes de difusão convectivos estáveis e em decomposição, que representa a mistura turbulenta na CLE e na camada pré-residual. As simulações de concentração são calculadas considerando diferentes momentos no processo de transição dia-noite. As simulações analisadas no campo de concentração de vento cruzado de contaminantes e dos perfis dessas concentrações são lançadas a partir de uma fonte pontual contínua a uma altura de 60m.

As simulações mostraram que, durante os tempos de evolução inicial durante a transição do sol, a difusão turbulenta gerada pelo decaimento convectivo na CR causou uma transferência eficaz de contaminantes para o interior da CLE. Durante a fase inicial, em que a CLE apresenta uma pequena profundidade, a combinação entre residual convectivo e turbilhões estáveis atuam de forma eficiente para o transporte dos poluentes em direção à superfície, aumentando a concentração no solo. Para a fase final do período de transição a altura da CLE chegou a uma altura de fonte pontual e a dispersão ocorreu em um ambiente estável. Esta condição gera uma pluma de forma *fanning*, que se caracteriza por uma grande disseminação na horizontal e com pouca propagação em relação à vertical. Os resultados mostram que em uma pluma de longa distância, o valor máximo da concentração permanece no mesmo nível da fonte de emissão. Como consequência desta falta de mistura turbulenta eficaz, os contaminantes não chegam à superfície.

Os resultados apresentados neste trabalho mostram similaridade com os relatados pela literatura, onde a ação da forte mistura gerada pelo decaimento dos turbilhões contendo energias convectivas na camada pré-residual provoca uma entrada eficaz de poluentes no interior da CLE recentemente criado.

Agradecimento: Os autores agradecem o apoio financeiro concedido pela CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior).

6 Referências

- ANFOSSI, D.; BACCI, P.; LONGHETTO, A. An application of lidar technique to the study of nocturnal radiation inversion. **Atmospheric Environment**, v. 8, p. 537–541, 1974.
- ANFOSSI, D.; DEGRAZIA, G. A; GOULART, A. G. Atmospheric turbulence decay during the solar total eclipse of 11 august 1999. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 111, p. 301–311., 2004.
- BEAR, R.J.; EDWARDS, J. M.; LAPWORTH, A. J. Simulation of the observed evening transition and nocturnal boundary layer: Large-eddy modeling. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 132, p. 81–99, 2006.
- BLACKADAR, A. K. **Turbulence and diffusion in the atmosphere:** lectures in Environmental Sciences. Springer-Verlag, 1997.
- BUSKE, D.; VILHENA, M.T.; BODMANN, B.; TIRABASSI, T. **Analytical Model for Air Pollution in the Atmospheric Boundary Layer**, Air Pollution, v. 1, p. 39-58.
- CARVALHO, J.C.; DEGRAZIA, G.A.; ANFOSSI, D., GOULART, A.G., CUCHIARA, G.C.; MORTARINI, L. Simulating characteristic patterns of the dispersion during sunset pbl. **Atmospheric Research**, v. 98., 2010.
- CAUGHEY, S.J.; KAIMAL, J.C. Vertical heat flux in the convective boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 103, p. 811–815, 1977.
- DEGRAZIA, G.A.; ANFOSSI, D.; CARVALHO, J.C.; MANGIA, C.; TIRABASSI, T.; VELHO, H.F.C. Turbulence parameterisation for pbl dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v. 34, p. 3575–3583, 2000.
- GOULART, A.G.; DEGRAZIA, G.A.; RIZZA, U.; ANFOSSI, D. A theoretical model for the study of the convective turbulence decay and comparison with les data. **American Meteorological Society**, v. 107, p. 143–155, 2003.
- GOULART, A.G.; VILHENA, M.; DEGRAZIA, G.; FLORES, D. Vertical, lateral and longitudinal eddy diffusivities for a decaying turbulence in the convective boundary layer. **Ecological Modelling**, v. 204, 2007.
- GRANT, A.L.M. An observational study of the evening transition boundary-layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v. 123, p. 657–677, 1997.

KRISTENSEN, L.; LENSCHOW, D.; KIRKEGAARD, P.; COURTNEY, M. The spectral velocity tensor for homogeneous boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 47, p. 149–193, 1989.

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

NADEAU, D.F.; PARDYJAK, E.R.; HIGGINS, C.W.; FERNANDO, H.J.S.; PARLANGE, M.B. A simple model for the afternoon and early evening decay of convective turbulence over different land surfaces. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 141, p. 301–324, 2011.

NIEUWSTADT, F.T.M. The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer. **Atmospheric Sciences**, v. 41, p. 2202–2216, 1984.

NIEUWSTADT, F.T.M.; BROST, R.A. The decay of convective turbulence. **Atmospheric Sciences**, v. 43, p. 532–546, 1986.

NILSSON, E.; LOTHON, M.; LOHOU, F.; PARDYJAK, E.; HARTOGENSIS, O.; DARBIER, C. Turbuence kinetic energy budget during the afternoon transition. **Atmospheric Chemistry Physics**, v.12, p. 2119-2124, 1978.

PINO, D.; JONKER, H.J.J.; ARELLANO, J.V.G.; DOSIO, A. Role of shear and the inversion strength during sunset turbulence over land: Characteristic length scales. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 121, p. 537–556, 2006.

SORBJAN, Z. Decay of convective revisited. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 82, p. 501–515, 1997.

SORBJAN, Z. Numerical study of daily transitions in the atmospheric boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 123, p. 365–383, 2007.

VENKATRAM, A.; BRODE, R.; CIMORELLI, A.; LEE, R. A complex terrain dispersion model for regulatory applications. **Atmospheric Environment**, v.35/24, p.4211–4221, 2001.

10 ANEXO A - SIMULATING THE CHARACTERISTIC PATTERNS OF THE DISPERSION DURING SUNSET PBL

Provided for non-commercial research and education use.
Not for reproduction, distribution or commercial use.



This article appeared in a journal published by Elsevier. The attached copy is furnished to the author for internal non-commercial research and education use, including for instruction at the authors institution and sharing with colleagues.

Other uses, including reproduction and distribution, or selling or licensing copies, or posting to personal, institutional or third party websites are prohibited.

In most cases authors are permitted to post their version of the article (e.g. in Word or Tex form) to their personal website or institutional repository. Authors requiring further information regarding Elsevier's archiving and manuscript policies are encouraged to visit:

<http://www.elsevier.com/copyright>



Contents lists available at ScienceDirect



Atmospheric Research

journal homepage: www.elsevier.com/locate/atmos

Simulating the characteristic patterns of the dispersion during sunset PBL

Jonas C. Carvalho ^{a,*}, Gervásio A. Degrazia ^b, Domenico Anfossi ^c, Antônio G. Goulart ^d, Gustavo C. Cuchiara ^a, Luca Mortarini ^c

^a Universidade Federal de Pelotas, Faculdade de Meteorologia, PPGMet, Pelotas-RS, Brazil

^b Universidade Federal de Santa Maria/INPE, Departamento de Física, Santa Maria-RS, Brazil

^c Istituto di Scienze dell'Atmosfera e del Clima (ISAC), CNR, Torino, Italy

^d Universidade Federal do Pampa, Centro de Tecnologia de Alegrete, Alegre-RS, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 15 June 2009

Received in revised form 29 May 2010

Accepted 30 June 2010

Keywords:

Planetary boundary layer

Stable boundary layer

Residual layer

Pollutant dispersion

Lagrangian modeling

Turbulent parameterization

ABSTRACT

A diffusion equation limit derived from the Langevin stochastic particle model is used to study the dispersion of scalars caused by an evolving turbulence in the transition process occurring during the sunset period. Therefore, the random displacement equation is employed to simulate the cross-wind concentrations of pollutants released from low and high point sources. Turbulence inputs are parameterized to describe in a continuous manner the dispersion effects produced by a decaying convective elevated and a shear-dominated stable surface turbulence. The simulation results show that for the initial stage of the sunset transition phenomenon, the pollutants are transported rapidly to the surface. On the other hand, for the sunset evolution advanced stages, the dispersion process happens in a deep stable boundary layer (SBL), in which the pollutants can travel long distances practically without reaching the surface. The major progress shown in this analysis is the description of the transport properties associated to decaying convective eddies in the residual layer (RL). The study shows that the diffusion effects associated to these decaying convective eddies strongly influence the dispersion of scalars during the sunset transition period.

© 2010 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The turbulence in the planetary boundary layer (PBL) is a complex physical phenomenon, which is in a process of continuous evolution controlled by the action of different forcings (Sorjan, 2007). An important example of this evolving turbulence is associated to the transition process that happens daily in the layer at sunset. About 1 h before sunset over land, the surface heat flux progressively decreases and, then, during night time becomes negative and, consequently, a stable boundary layer (SBL) develops near the ground (Goulart et al., 2003; Pino et al., 2006). Above this SBL in the Residual Layer (RL), the convective energy-containing eddies start to lose their strength and mixing capacity and the convective boundary layer (CBL) begins to

decay. Turbulence decay in the CBL has been investigated by Goulart et al. (2003) using the dynamical equation for the energy density spectrum and by Nieuwstadt and Brost (1986), Sorjan (1997), Beare et al. (2006), Pino et al. (2006) and Sorjan (2007) employing LES models. Furthermore, Caughey and Kaimal (1977), Grant (1997), Acevedo and Fitzjarrald (2001), Grimsdell and Angevine (2002), Lapworth (2003) and Anfossi et al. (2004) reported some experimental results about of this sunset transition time.

The dispersion of pollutants by turbulent flows is of central importance in a number of environmental problems. Thusly, the investigation and the use of diffusion mathematical models for the analysis of environmental impact conditions have revealed to be of fundamental value in the assessment of air quality in a large range of distinct scales. In the recent years, a great deal of work has been done to study the airborne pollutant dispersion in convective and stable PBLs. However, the dispersion of pollutants occurring around the evening transition was put aside and most of the diffusion models focused on the CBL under idealized quasi-

* Corresponding author.

E-mail address: jonas.carvalho@ufpel.edu.br (J.C. Carvalho).

Table 1Simulation time (t) and SBL height according expression ($h = 70\sqrt{t}$).

t (s)	900	1800	2700	3600	4500
h (m)	35	50	60	70	80

steady conditions, characterized by a constant surface heat flux. Indeed, less attention has been paid to the dispersion in the residual layer, where the diffusion of pollutants occurs in conditions of decaying convective turbulence. It was mentioned that [Desiato et al. \(1998\)](#), simulating the ETEX I long range tracer dispersion experiments with two Lagrangian particle models, obtained the best results when the dispersion in the RL was also included.

The decay of energy-containing eddies in the CBL is the physical mechanism that can sustain, in a robust way, the dispersion process in the RL. To our knowledge, there are no conclusive turbulence observations and studies concerning the dispersion process associated to the release of pollutants happening around the evening transition, where near the surface layer there is the development of the SBL, and above this, the convective eddies that start to decay in the RL. It is important to note that around the evening transition, all the high stacks release pollutants at heights comparable to or interacting with the layer of transition between SBL and RL. This sunset transition time regularly happens on a daily basis and for this situation the investigation of the turbulence diffusion process in this particular period can be employed to evaluate the impact of air pollutants on urban and agricultural environment.

From the above-mentioned discussed arguments and motivated by the scarceness of experimental studies as well as the lack of detailed data about the observed pollutant concentration during the night-day evolution process, it is investigated the turbulent transport process occurring around the evening transition. Therefore, the focus of this study is to simulate the characteristic patterns of the turbulent dispersion of pollutants released from a continuous point source in a diffusive PBL characterized by a decaying convective elevated and stable surface continuous turbulence. To accomplish this analysis, the starting point is the random displacement equation (solution for the asymptotic Langevin equation), in which the turbulent effects are represented by eddy diffusivities for a SBL ([Degrazia et al., 2000](#)) and for a decaying turbulence in the CBL ([Goulart et al., 2007](#)). The use of these convective decaying eddy diffusivities in air quality models will generate realistic turbulent patterns associated to the sunset transition time. Generally, in this transition state, operational dispersion models consider only the stable turbulent parameterization.

Incorporating the diffusive action associated to the decaying turbulence, happening in the PBL around the evening transition, it is feasible to adequately estimate the air pollution for this particular time period. Throughout this transition period, dispersion models shall incorporate turbulent parameters that present distinct diffusive properties acting simultaneously to dilute the pollutants concentration. Thusly, with these parameterizations (stable below and convective decaying turbulence aloft), the random displacement equation can be used to evaluate, in a quantitative manner, the influence of the

decaying convective eddies on the concentration field of pollutants released by high continuous point sources during the sunset transition time and the first hours of SBL development. Finally, it is important to note that in the present study we are dealing with inert pollutant without any chemical reaction or plume rise involved, and as a consequence the changes in concentration are only due to dispersion processes.

2. Turbulence parameterization in the sunset transition time

In the PBL turbulent dispersion models, the selection of an adequate parameterization plays a fundamental role to evaluate the pollutants concentration in the atmosphere. Therefore, the efficiency of each approach, to reproduce correctly the pollutants concentration field, depends on the manner in which turbulent parameters are related to dynamical and thermodynamic evolving properties of the PBL. As a consequence, eddy diffusivities which are used in the random displacement equation are properties of the turbulent environment and are described in terms of the physical quantities that characterize the magnitude of the dispersion in a PBL. Hence, the aim of this section is to show and discuss the eddy diffusivities that have been employed in the random displacement equation to simulate the concentration field of pollutants by a high continuous point source during the sunset transition time. For this reason, it is necessary to parameterize the turbulent transport in a shear-dominated stable PBL (occurring near the ground) and the decaying convective elevated turbulent dispersion (associated to the residual layer).

2.1. Parameterization of the shear-dominated stable turbulence

Turbulent dispersion in a shear-dominated stable PBL is generated close to the ground by mechanical processes that are related to wind shear. In a stable PBL there is a competition between wind shear generated turbulence and stabilizing effects of stratification. Therefore, in our description of the dispersion of pollutants in the sunset transition time, a stable surface layer is considered, in which a continuous turbulence and a negative turbulent heat flux coexist ([Nieuwstadt, 1984](#)).

The following relationships for longitudinal, lateral, and vertical eddy diffusivities K_i ($i = u, v, w$) derived by [Degrazia et al. \(2000\)](#), represent the turbulent diffusion in a shear-dominated stable PBL:

$$K_i = C_i \frac{(1-z/h)^{3/4} u_*}{1 + 3.7 \left(\frac{z}{L(z-z/h)^{5/4}} \right)} \quad (1)$$

in which $C_x = 4.94$, $C_y = 1.04$ and $C_z = 0.41$, L is the Obukhov length, u_* is the surface layer friction velocity and h is the height of the stable layer. The magnitudes of the C_i coefficients in the numerator of Eq. (1) show that the eddy vertical motion is strongly limited by the positive stratification.

2.2. Parameterization of the residual layer decaying convective turbulence

According to Garrat (1992), p. 163 “over land, under clear skies, decay of the CBL normally happens in late afternoon and towards sunset, when the surface buoyancy flux decreases rapidly towards zero (and may change sign). Under these conditions the main source of turbulent kinetic energy (TKE) is removed, with consequent decay in TKE and other turbulent properties in the deep, near-adiabatic remnant of the daytime boundary layer”. Recently, a general method to derive eddy diffusivities in a decaying turbulence in the daytime CBL has been proposed by Goulart et al. (2007). The method is based upon a model for the budget equation describing the 3D energy density spectrum and the Taylor statistical diffusion theory. Therefore, an analytical solution for the budget equation is obtained in terms of an initial 3D spectrum, which describes the observed turbulent spectrum in the daytime CBL. Furthermore, as a consequence of the non-isotropic decaying convective turbulence, this initial 3D spectrum is calculated from 1D spectrum by the use of a complex mathematical methodology developed by Kristensen et al. (1989). To calculate the decaying longitudinal and lateral eddy diffusivities, the turbulent field has been considered isotropic. Differently, to derive the decaying vertical eddy diffusivity, the turbulence has been considered non-isotropic. The following algebraic relationships proposed by Goulart et al. (2007) represent good fits to the decaying convective eddy diffusivities calculated from the theoretical model above described:

$$\frac{K_x}{w_* z_i} = \frac{0.069}{\sqrt{1 + t_*^{1.44}}} \quad (2a)$$

$$\frac{K_y}{w_* z_i} = \frac{0.079}{\sqrt{1 + t_*^{1.44}}} \quad (2b)$$

and

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = \frac{0.079}{\sqrt{1 + 2t_*^{1.7}}} \quad (2c)$$

where z_i is the height of the mixing layer and $t_* = tw_*/z_i$.

The eddy diffusivities, given by the Eqs. (2a), (2b), and (2c) were compared with those generated from LES data for a decaying CBL (Nieuwstadt and Brost, 1986). From this comparison, it has been concluded that the theoretical model derived by Goulart et al. (2007) describes well the decaying process of the convective turbulence in a PBL. It is important to highlight the fact that our parameterization of the turbulence decay has only been tested with LES simulations accomplished by Nieuwstadt and Brost (1986). For such simulations, the wind was quite low (5 m s^{-1}). For larger winds the eddy diffusivities (2a–2c) might not scale with w_* , but with a new velocity scale which includes w_* and u_* .

3. Lagrangian modeling

Under the condition that the Lagrangian decorrelation time scale $\tau_L \rightarrow 0$ (or $t/\tau_L \rightarrow \infty$), the Langevin model can be transformed into a stochastic differential equation, which permits to determine the particle positions x_i directly (Rodean, 1996):

$$dx_i = \left[U_i(x, t) + \frac{\partial K_{ij}(x, t)}{\partial x_j} \right] dt + \left(2K_{ij}(x, t) \right)^{1/2} dW_j(t) \quad (3)$$

where x is the displacement vector, t is the time, U_i is the mean wind velocity, K_{ij} is the eddy diffusivity tensor, and dW_j is the incremental Wiener process. The Eq. (3) is called Markov or diffusion equation limit of the Langevin stochastic particle model.

For the simulations, the turbulent flow is assumed inhomogeneous only in the vertical ($\partial/\partial x_1 = 0, \partial/\partial x_2 = 0, \partial/\partial x_3 \neq 0$), the transport is realized by the longitudinal component of the mean wind velocity ($U_1 \neq 0, U_2 = 0, U_3 = 0$), and the eddy diffusivity tensor is diagonal ($K_{ij} = 0$ if $i \neq j$). The distribution of the turbulent velocity components is Gaussian in all directions. The horizontal domain was set to $2000 \text{ m} \times 2000 \text{ m}$ and the vertical one was set equal to PBL height. The time step was kept constant and it was obtained in accordance with the value of the Lagrangian decorrelation time scale ($\Delta t = \tau_L/c$), where τ_L must be the smaller value between $\tau_{L_w}, \tau_{L_v}, \tau_{L_h}$ and c is an empirical coefficient set equal to 10; the values of τ_{L_i} were calculated according to scheme suggested by Degrazia et al. (2000). One-hundred particles were released in each time step during 5400 time steps. The concentration field is determined by counting the particles in a cell or imaginary volume in the position x, y, z . The micrometeorological parameters $z_i = 1350 \text{ m}$, $w_* = 2.3 \text{ m s}^{-1}$, $L = 4.8 \text{ m}$, and $u_* = 0.26 \text{ m s}^{-1}$ (Nieuwstadt and Brost, 1986) were considered for generating the eddy diffusivity profiles during the simulation. The simulations started at the moment of sunset when the surface heat flux progressively decreases and a stable boundary layer develops near the ground. Profiles of eddy diffusivities suggested by Degrazia et al. (2000) (Eq. 1) were employed to simulate the turbulent dispersion in the surface SBL. On the other hand, magnitudes of eddy diffusivities derived by Goulart et al. (2007) (Eqs. 2a, 2b, and 2c) were used to simulate the turbulent transport in the elevated RL. The evolution of the PBL height was calculated according to the expression $h = 70\sqrt{t}$, where h is given in meters and t in hours. This parabolic law for the time evolution of the top h of the SBL has been obtained from experimental measurements accomplished by Anfossi et al. (1974) employing Lidar observations. The increase of the SBL height as prescribed by a $t^{1/2}$ power law describes the development of the nocturnal radiation inversion (Anfossi et al., 1976, p.175). During the simulation, new profiles of eddy diffusivities and new values of SBL height were provided to the model in intervals according to Table 1.

4. Results

The purpose of this section is to discuss the concentration simulation results derived from the random displacement model provided by the Eq. 3 employing the eddy diffusivities

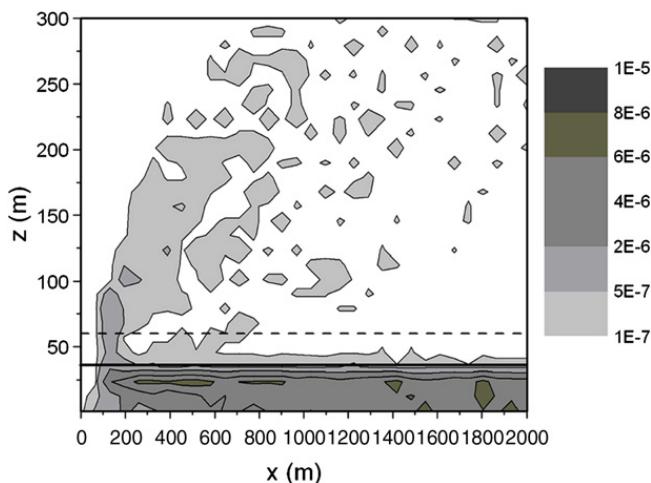


Fig. 1. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 35 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

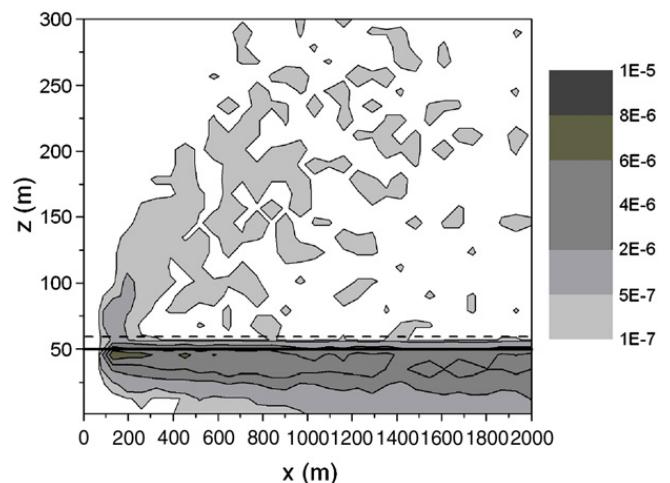


Fig. 3. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 50 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

given by the Eqs. (1), (2a), (2b) and (2c). For the sunset transition period the dispersion characteristics of pollutants released by a low and a high continuous point source will be discussed.

4.1. Low pollutants point source

In this first part of the discussion, the simulation of the cross-wind concentration field of pollutants released from a continuous point source at a height of 60 m is analyzed. The investigated dispersion covers distinct evolution periods during the sunset transition process daily happening in the PBL. For an initial transition time of 0.25 h, when the height of the stable layer is of only 35 m, the dispersion effects of the aloft decaying convective turbulence and of the below surface continuous stable turbulence acting on the pollutants are shown in Fig. 1. By analyzing the diffusion pattern associated to this figure, it is possible to notice

that the pollutants released from the emission source directly into the RL suffer a strong mixing action caused by the decaying of the large convective eddies. This intense level of dispersion associated to the initial decaying turbulence in the RL is the responsible mechanism that guarantees the rapid entrance of pollutants to the interior of the SBL. The simulation results presented in Fig. 1 also show that the pollutants penetrate in the interior of the SBL and reach the ground in the proximity of the continuous point source. This diffusion to the surface can be explained as follows: the pollutant particles, suffering the dispersion effects of the decaying large convective eddies, reach the top of the SBL and are then captured by this new environment of stable turbulence containing very different transport properties from that experienced by the particles in the RL. Therefore, as a consequence of the relatively small depth of the SBL (for this initial time), the pollutants contained in this layer start to disperse under the action of the stable eddies. The stable

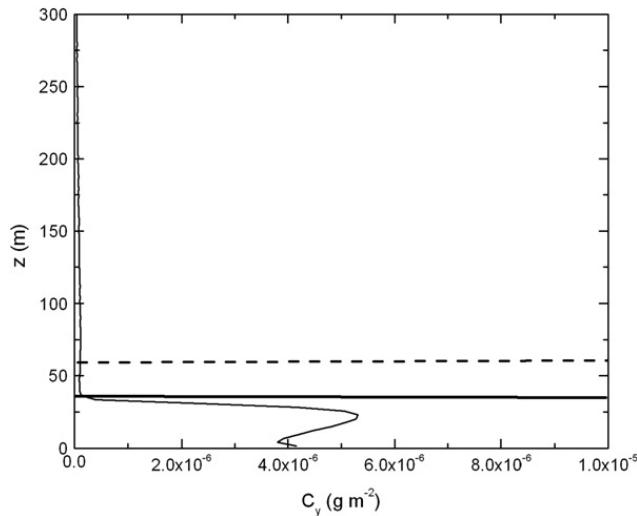


Fig. 2. Cross-wind concentration profile in $x = 1000$ m. Source height of 60 m and stable boundary layer height of 35 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

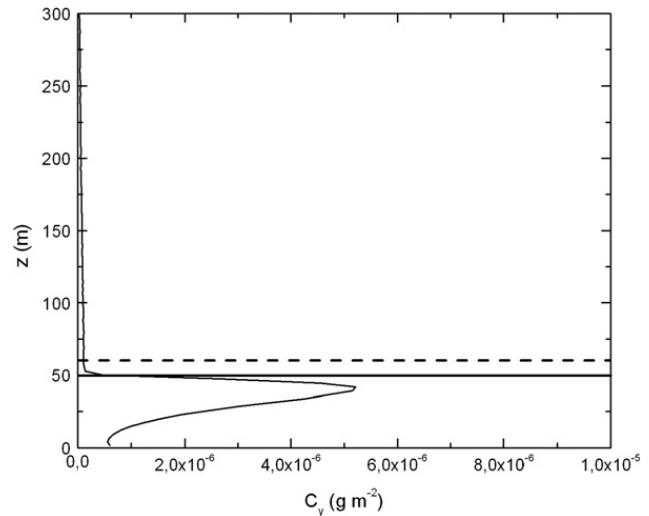


Fig. 4. Cross-wind concentration profile in $x = 1000$ m. Source height of 60 m and stable boundary layer height of 50 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

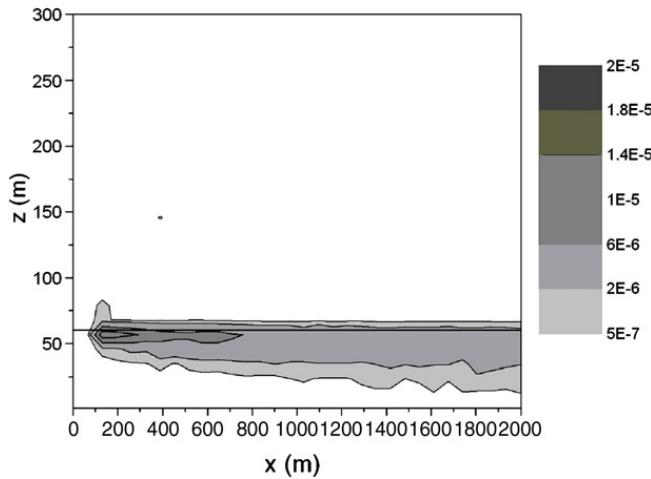


Fig. 5. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 60 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

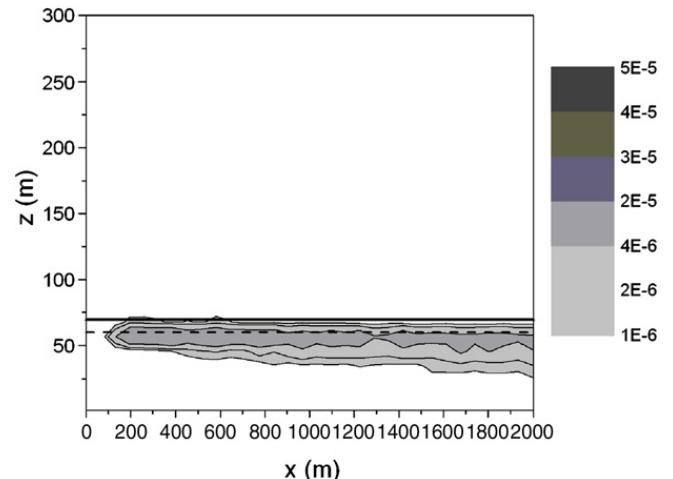


Fig. 7. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 70 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

turbulence from mechanical origin is generated by the surface wind shear and consequently the energy-containing eddies in this layer are in the proximity to the surface. For a continuous stable turbulence, sustained by the mechanical forcing, the turbulent vertical velocity variance decreases with the height and this variance asymmetry (vertical inhomogeneous turbulence), induces an acceleration (drift velocity) that transports the pollutant particles in the direction to the surface where the wind shear turbulence diffusion action is dominant. This transport downward, associated to the wind shear turbulence above discussed, is particularly dominant in SBLs that present a little depth. In this thin initial SBL, the effects of surface turbulence generation influence the major part of the SBL vertical extension. The cross-wind concentration vertical profile shown in Fig. 2 evidences this movement of the pollutant particles in direction to the ground. From this figure it can be seen that for a

source distance of 1000 m there is a maximum in C_y at the height of the order of 20 m, meaning a considerable penetration of the pollutants in relation to the SBL height. Furthermore, for this same source distance a significant fraction of this maximum in C_y can be found at the surface. The following considerations, proposed by Hunt (1982), p.241 give support to this simulated behavior “Think of marking the edges of an agitated region of fluid; the marked elements move preferentially into the agitated region, even if there is no mean flow in that direction”.

For evolving times, during the sunset transition period, the expansion of the deep of the SBL and the loss of the diffusion capacity of the decaying convective energy-containing eddies contribute to reduce the entrance of pollutants into the SBL and, therefore, to decrease the surface pollutant concentrations. Figs. 3 and 5, generated by the simulation for the evolution times $t = 0.51$ h and 0.73 h, respectively, show this reduction in the

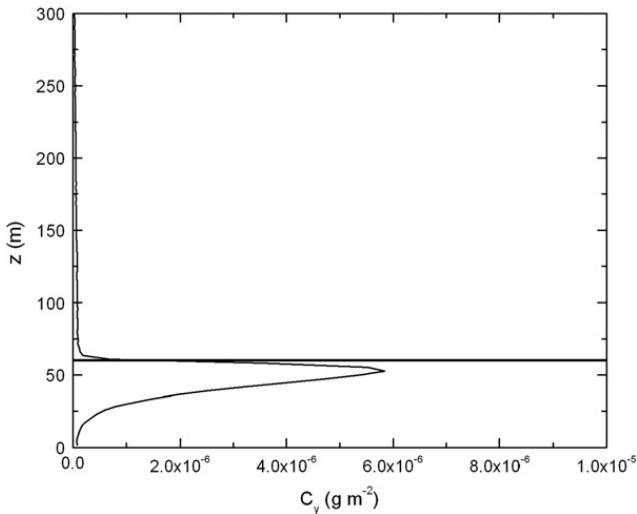


Fig. 6. Cross-wind concentration profile in $x = 1000$ m. Source height of 60 m and stable boundary layer height of 60 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

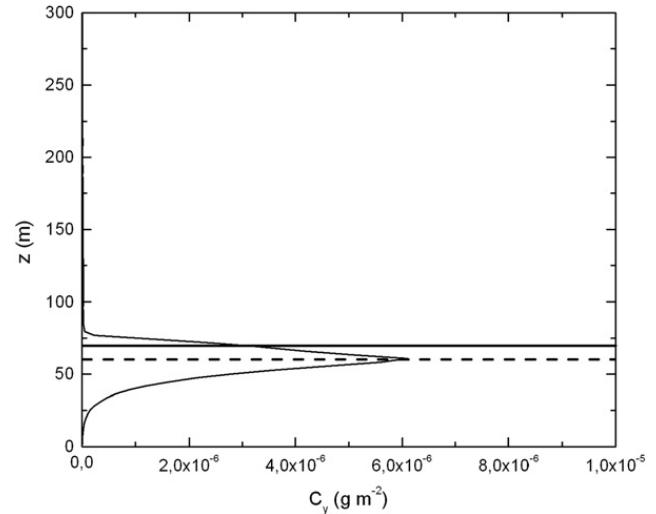


Fig. 8. Cross-wind concentration profile in $x = 1000$ m. Source height of 60 m and stable boundary layer height of 70 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

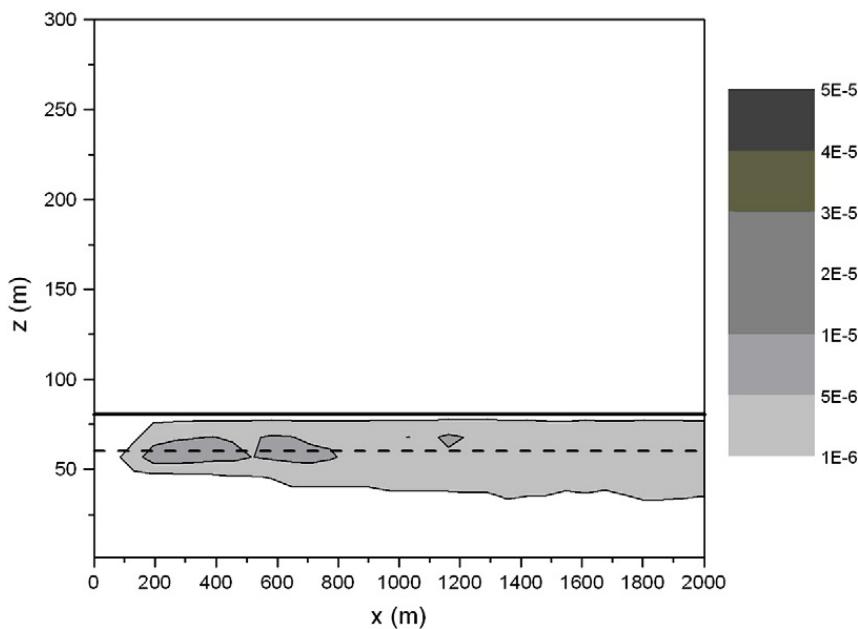


Fig. 9. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 60 m and stable boundary layer height of 80 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

surface pollutants concentration. The growth of the SBL tends to engulf the RL region and consequently the pollutants emission source. This deepening of the SBL reduces the dispersion process caused by the decaying convective eddies of the RL acting on the pollutants. Thusly, Fig. 3 shows a diffusion pattern in which the height of the maximum concentration tends slowly to sink in the SBL. This behavior can also be seen in Fig. 4, which points out the fact that for a source distance of 1000 m, the maximum in C_y occurs at the height of approximately 40 m, yielding in a penetration of the order of 10 m into the SBL. The same figure also indicates that a very small fraction of the pollutants reaches the surface. Particularly, for the evolution time represented in

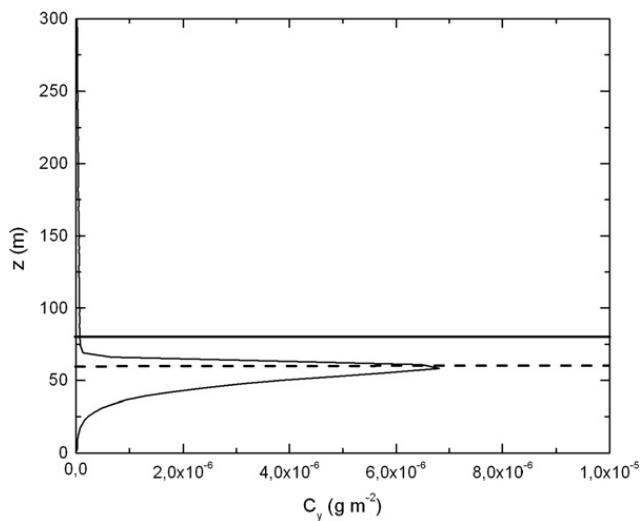


Fig. 10. Cross-wind concentration profile in $x = 1000$ m. Source height of 60 m and stable boundary layer height of 80 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

Fig. 5, the height of the SBL reaches the height of the point source. Consequently, there is no more vertical spacing occupied by the RL turbulence between the low source and the SBL top. Therefore, for this source special localization, in which there is not considerable vertical spacing for the action of the decaying convective turbulence, the pollutants can travel long distances without touching the surface. For this case, the maximum of the concentration tends to remain at the top of the SBL. This behavior is evidenced in Fig. 6, where for a distance of 1000 m from the source, the height of the maximum concentration occurs between 50 and 60 m without a significant concentration of pollutants at the surface. Figs. 7 and 9 show the cross-wind concentration field for the final evolution times $t = 1.0$ h and $t = 1.31$ h respectively. For these final stages of the sunset transition period, the SBL height is above the pollutants point source, consequently, the dispersion occurs in a stable turbulence extended environment. For this thick stable turbulent field, characterized by small eddies, the low magnitude of the eddy diffusivities generates a very little spread in the vertical direction. These dispersion conditions produce ribbon like pollutant plumes. In this situation, it is feasible to observe for long distances an elevated maximum in C_y in the pollutants point source height (Arya, 1999). This diffusion pattern occurring in a deep SBL is reproduced in Figs. 7, 8, 9, and 10. From these figures it is possible to notice that for long travel distance the maximum of the concentration remains at approximately 60 m. Furthermore, the simulation results show that the small magnitudes of the stable eddy diffusivities yield to an uncoupling between the layers of the deep SBL. Therefore, as shown in Figs. 8 and 10 this lack of an efficient turbulence avoids the arrival of pollutants in the surface.

4.2. High pollutants point source

In this final part of the analysis we interpret the dispersion pattern of pollutants released from a continuous point source

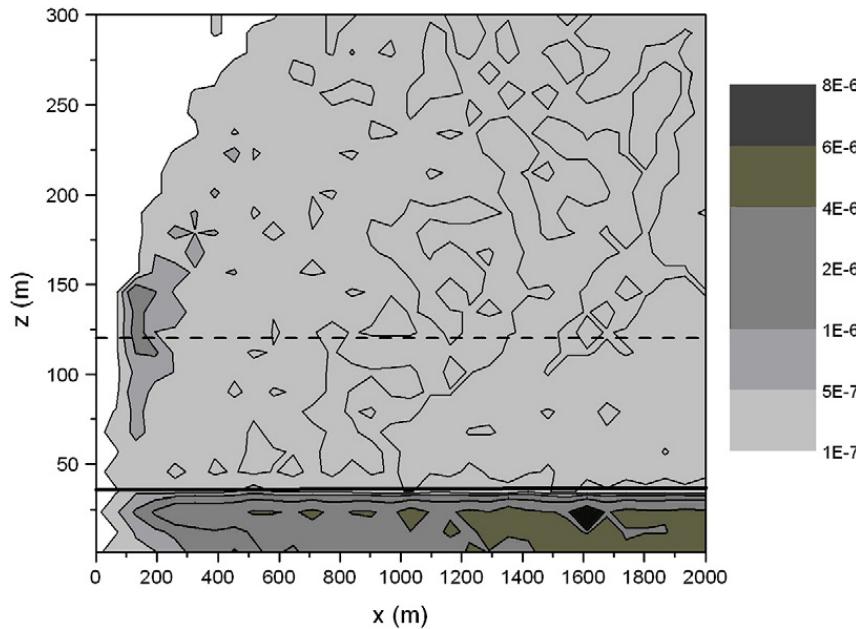


Fig. 11. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 120 m and stable boundary layer height of 35 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

at a height of 120 m during the sunset transition period. The simulation results for this source were obtained for the same evolution times employed in the description of the dispersion of pollutants released by the continuous point source at the height of 60 m. Fig. 11 presents the cross-wind concentration field for the sunset transition initial time. The simulated results show that the dispersion mechanisms, associated to the decaying convective turbulence and the stable turbulence described in Section 4.1, transport the pollutant to the inside of the SBL and to the ground. Therefore, for the sunset transition initial stage, the simulation results show that the pollutants originated from a high continuous point source,

localized well above of the SBL height, reach the surface near the emission point. Responsible for these simulated surface concentrations is the transport process generated by the decaying convective turbulence in the RL that impacts the pollutants directly on the top of the SBL and enhances its inclusion into the turbulent stable environment. Fig. 12 points out the presence of a maximum in C_y at a height of 20 m for a source distance of 1000 m and confirms that a significant fraction of the pollutant reaches the surface. On the other hand, for this initial evolution time, a comparison between the Figs. 1, 2, 11 and 12 shows clearly that the surface concentration magnitudes for the case of a high source are smaller than those generated from a low pollutants source. However, as sunset transition evolving process happens, the dispersion effect associated to the decaying turbulence decreases in the RL and the height of the turbulent SBL increases. Therefore, during the growth of the SBL, the height of the maximum concentration also grows. This behavior can be seen, for distinct evolution times, in Figs. 13, 14, 15, and 16 that show a progressive rise of the height of the maximum concentration level. This continuous upward movement associated to the height of the maximum concentration level becomes evident in Figs. 17, 18, 19, and 20. Such figures display the cross-wind concentration profile for a source distance of 1000 m for different times during the sunset transition period. Therefore, by observing the simulated results in these figures, expressing the evolving stages of the sunset PBL, it can be observed that the height of the maximum concentration occurs approximately 10 m below the SBL top. During the transition, the continuous growth of the SBL depth and of the height of the maximum concentration avoids large surface pollutant concentration. This lack of pollutants in the surface can be observed in Figs. 18, 19, and 20. Differently from the low pollutants point source where height of the maximum concentration happens at the release

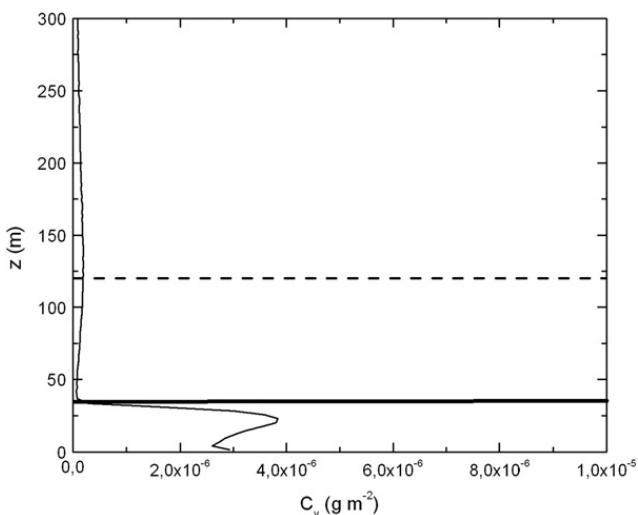


Fig. 12. Cross-wind concentration profile in $x = 1000$ m. Source height of 120 m and stable boundary layer height of 35 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

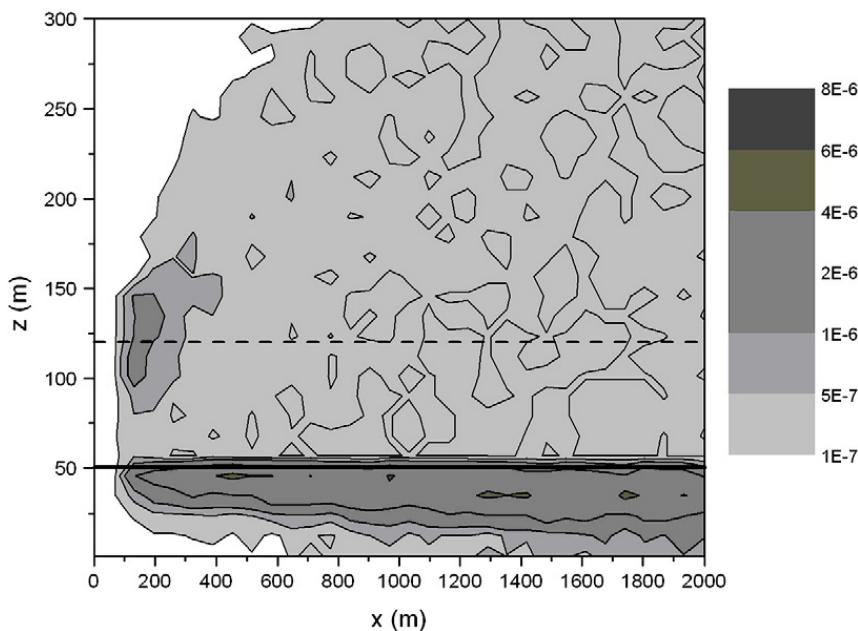


Fig. 13. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 120 m and stable boundary layer height of 50 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

height for these sunset transition development stages, the height of the maximum concentration associated to the high point source follows the continuous growth of the SBL top. As a consequence of this constraint, associated to the high emission source, for advanced evolution times during the sunset period, the height of the maximum concentration can be found in the neighborhood of the SBL top. Therefore, the pollutants dispersion in these elevated vertical regions of the deep SBL is caused by very small eddies which mixing capacity is characterized by the very low magnitudes of the eddy diffusivities. In this case, the pollutants situated in this

reduced vertical ribbon can travel very long distances without reaching the ground. Comparing the surface concentrations originated from the low and high pollutants point source, the above arguments can explain the smaller simulated surface concentrations associated to the high pollutants point source.

5. Conclusion

In this study, numerical simulations of the concentration of inert pollutants released from continuous point sources were accomplished to investigate the turbulent dispersion

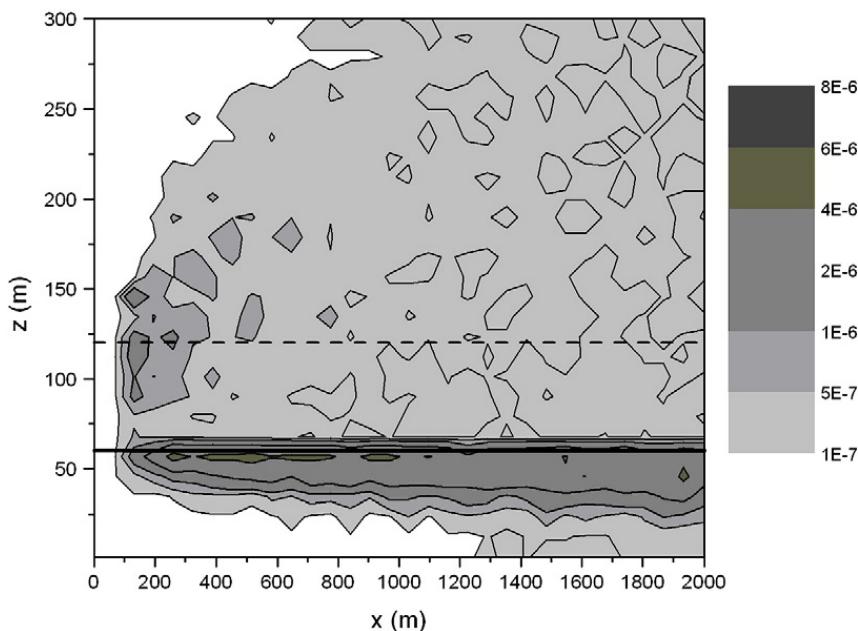


Fig. 14. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 120 m and stable boundary layer height of 60 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

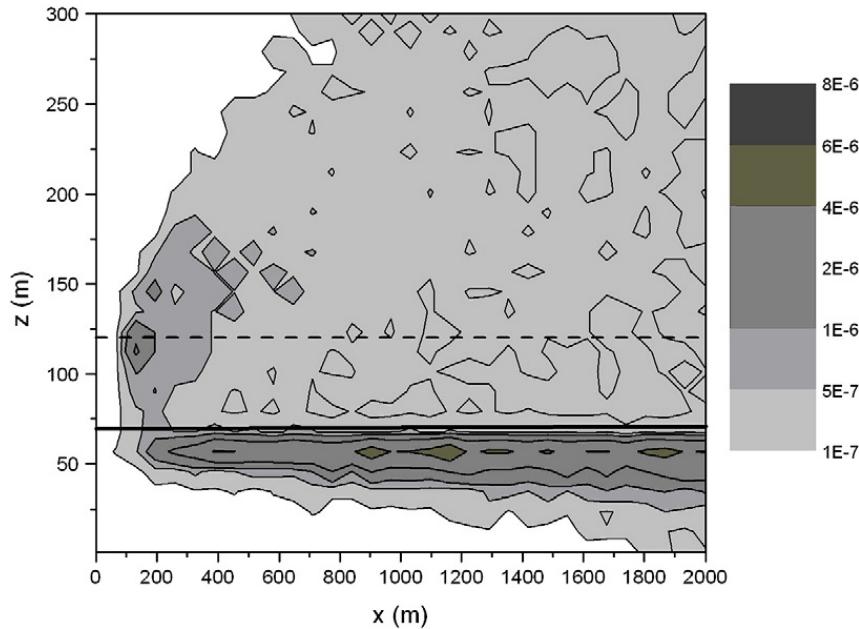


Fig. 15. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 120 m and stable boundary layer height of 70 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

pattern of passive scalars during the sunset. The analysis employs a dispersion model, based on the random displacement equation (Eq. 3) in which the stable and decaying convective eddy diffusivities, representing the turbulent mixing in the SBL and RL respectively, are derived from Taylor Statistical Diffusion Theory. The concentration simulations were obtained by evolving turbulence different times in the transition process that characterizes sunset. Furthermore, the simulations reproduce the cross-wind concentration field

of pollutants released from a continuous point source at 60 m and 120 m height. The simulations show that for both sources, during the initial process of the sunset transition, the strong mixing caused by the decaying convective energy-containing eddies in the RL causes an effective entrance of pollutants to the interior of the recently established SBL. For this initial stage of the sunset development, when the SBL presents a small depth, the stable turbulence generated by the surface wind shear influences nearly all the vertical

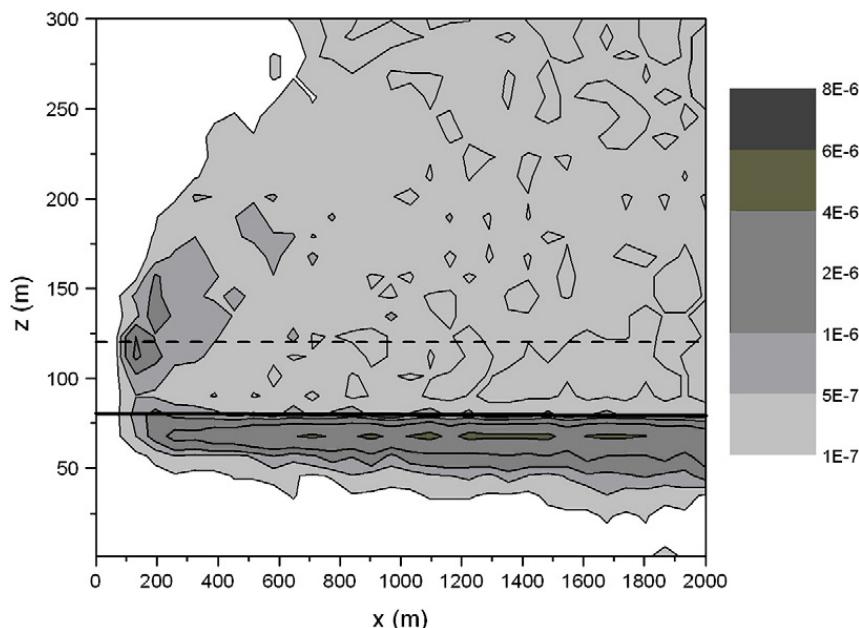


Fig. 16. Cross-wind concentration field (x - z plane). Source height of 120 m and stable boundary layer height of 80 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height. Concentration in g m^{-2} .

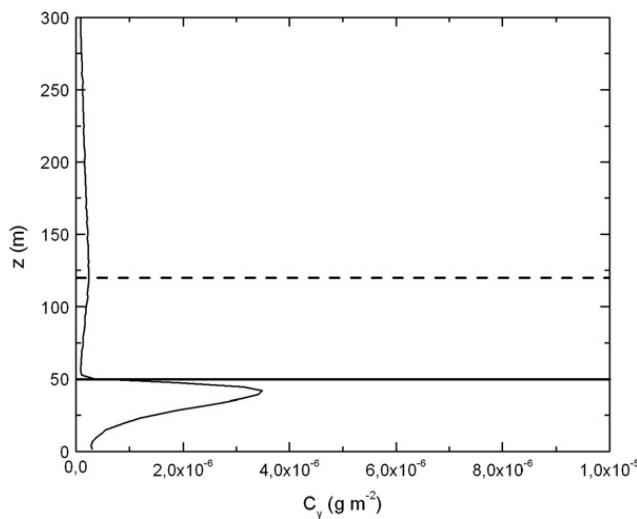


Fig. 17. Cross-wind concentration profile in $x=1000$ m. Source height of 120 m and stable boundary layer height of 50 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

extension of the SBL and transports the pollutants rapidly to the surface. Therefore, the present analysis shows that for this initial time of the transition, the combination between residual convective and stable eddies acts efficiently to transport the pollutants in direction to the ground surface.

On the other hand for the later stages of the sunset, the height of the SBL depth engulfs the RL vertical environment reaching the point source height of 60 m. Thusly, for these evolution advanced times, the simulations show that the dispersion occurs in a large vertical extension that is dominated by a stable turbulence. In this thick SBL, the simulation results indicate that the height of the maximum concentration travels long distances from the pollutants emission point source. As a consequence of this lack of an effective turbulent mixing, acting over the whole vertical extension of the SBL, the pollutants do not reach the surface.

For the high point source height of 120 m the simulations show that for the advanced stages of the sunset transition

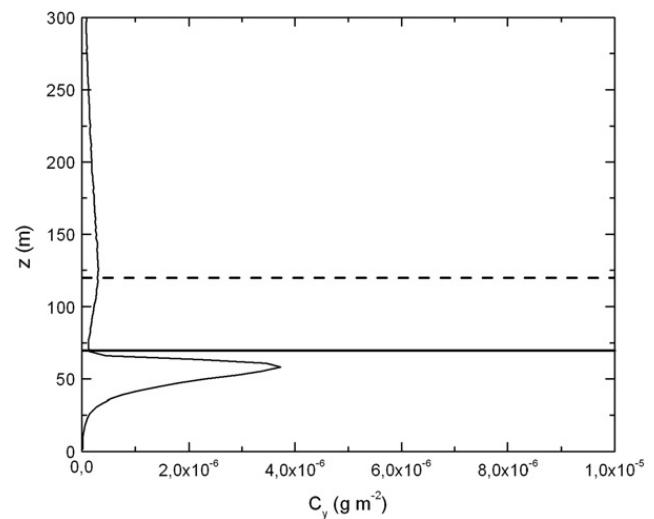


Fig. 19. Cross-wind concentration profile in $x=1000$ m. Source height of 120 m and stable boundary layer height of 70 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

period there is a proximity constraint between the height of the maximum concentration and the SBL top. Therefore, the growth of the SBL top raises the height of the maximum concentration. As a consequence of this spatial proximity constraint, the height of the maximum concentration, generated from the high emission source, follows the expansion of the SBL top. Hence, the simulations point out that the height of the maximum concentration of pollutants that entered into the SBL, by the action of the decaying convective eddies of the RL, is localized in a vertical level near the SBL height. The nearness between the SBL top and the vertical position of the height of the maximum concentration, as shown by the numerical simulations, is the factor responsible by the very small surface concentration originated from the high pollutant emission source.

The simulation results discussed here refer to a numerical modeling, which show that the presence of the decaying convective eddies in the RL play a fundamental role in the

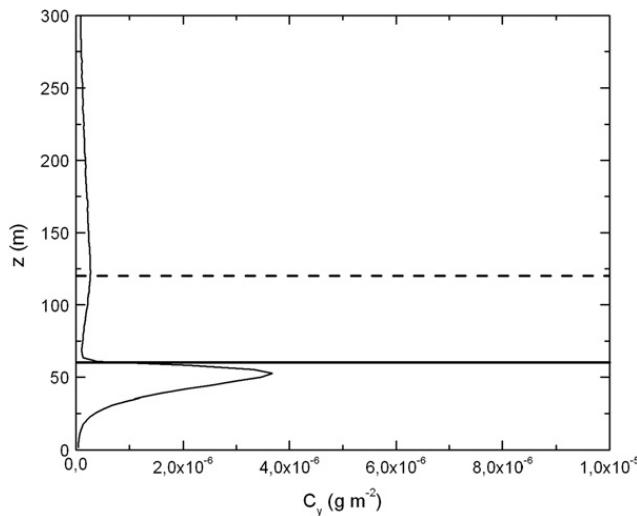


Fig. 18. Cross-wind concentration profile in $x=1000$ m. Source height of 120 m and stable boundary layer height of 60 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

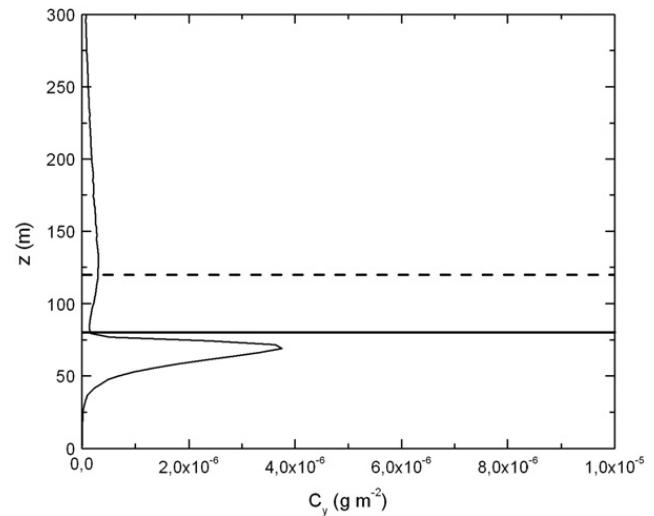


Fig. 20. Cross-wind concentration profile in $x=1000$ m. Source height of 120 m and stable boundary layer height of 80 m. The dashed line indicates the source height while the continuous line indicates the SBL height.

dispersion pattern of pollutants during the sunset transition period. A number of simplifications are assumed, which may not allow this description to completely apply to realistic cases. Anyhow, the dispersion general behavior expected during this particular transition phenomenon (sunset PBL) has been reproduced by these numerical simulations. However, it is important to highlight that further developments are necessary to obtain more details about this complex physical process. The present development will, therefore, provide a first approximation for the turbulent transport associated to the sunset dispersion phenomenon and it is expected that a similar diffusion behavior happens even when more realistic analyses are considered.

Acknowledgement

The authors acknowledge the financial support provided by CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) and CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior).

References

- Acevedo, O.C., Fitzjarrald, D.R., 2001. The early evening surface layer transition: temporal and spatial variability. *J. Atmos. Sci.* 58 (17), 2650–2667.
- Anfossi, D., Bacci, P., Longhetto, A., 1974. An application of Lidar technique to the study of nocturnal radiation inversion. *Atmos. Environ.* 8, 537–541.
- Anfossi, D., Bacci, P., Longhetto, A., 1976. Forecasting of vertical temperature profile in atmosphere during nocturnal radiation inversion from air temperature trend at screen height. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* 102, 173–180.
- Anfossi, D., Schayes, G., Degrazia, G.A., Goulart, A.G., 2004. Atmospheric turbulence decay during the solar total eclipse of 11 August 1999. *Bound.-Lay. Meteorol.* 111, 301–311.
- Arya, S., 1999. Air Pollution Meteorology and Dispersion. Oxford University Press, New York. 310pp.
- Beare, R.J., Edwards, J.M., Lapworth, A.J., 2006. Simulation of the observed evening transition and nocturnal boundary layer: large-eddy simulation. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* 132, 81–99.
- Caughey, S.J., Kaimal, J.C., 1977. Vertical heat flux in the convective boundary layer. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* 103, 811–815.
- Degrazia, G.A., Anfossi, D., Carvalho, J.C., Mangia, C., Tirabassi, T., 2000. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. *Atmos. Environ.* 34, 3575–3583.
- Desiato, F., Anfossi, D., Catelli, S.T., Ferrero, E., Tinarelli, G., 1998. The role of wind field, mixing height and horizontal diffusivity investigated through two Lagrangian particle models. *Atmos. Environ.* 32, 4157–4165.
- Garrat, J.R., 1992. The Atmospheric Boundary Layer. Cambridge University Press, p. 316.
- Goulart, A.G., Degrazia, G.A., Rizza, U., Anfossi, D., 2003. A theoretical model for the study of the convective turbulence decay and comparison with LES data. *Bound.-Lay. Meteorol.* 107, 143–155.
- Goulart, A.G., Vilhena, M., Degrazia, G., Flores, D., 2007. Vertical, lateral and longitudinal eddy diffusivities for a decaying turbulence in the convective boundary layer. *Ecol. Modell.* 204, 516–522.
- Grant, A.L.M., 1997. An observational study of the evening transition boundary-layer. *Q. J. R. Meteorol. Soc.* 123, 657–677.
- Grimsdell, A.W., Angevine, W.M., 2002. Observations of the afternoon transition of the convective boundary layer. *J. Appl. Meteorol.* 41, 3–11.
- Hunt, J.C.R., 1982. Diffusion in the stable boundary layer. In: Nieuwstadt, F.T.M., Dop, H.V. (Eds.), Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling. D. Reidel Publ. Co, Dordrecht, Boston, London, pp. 231–274.
- Kristensen, L., Lenschow, D., Kirkegaard, P., Courtney, M., 1989. The spectral velocity tensor for homogeneous boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.* 47, 149–193.
- Lapworth, A.J., 2003. Factors determining the decrease in surface wind speed following evening transition. *Quart. J. Roy. Meteorol. Soc.* 129, 1945–1968.
- Nieuwstadt, F.T.M., 1984. The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer. *J. Atmos. Sci.* 41, 2202–2216.
- Nieuwstadt, F.T.M., Brost, R.A., 1986. The decay of convective turbulence. *J. Atmos. Sci.* 43, 532–546.
- Pino, D., Jonker, H.J.J., Vilà-Guerau de Arellano, J., Dosio, A., 2006. Role of shear and the inversion strength during sunset turbulence over land: characteristic length scales. *Bound.-Lay. Meteorol.* 121 (3), 537–556.
- Rodean, H.C., 1996. Stochastic Lagrangian Models of Turbulent Diffusion. American Meteorological Society, Boston, p. 84.
- Sorbian, Z., 1997. Decay of Convective Revisited. *Boundary-Layer Meteorol.* 82, 501–515.
- Sorbian, Z., 2007. Numerical study of daily transitions in the atmospheric boundary layer. *Boundary-Layer Meteorol.* *Boundary-Layer Meteorol.* 123, 365–383.