

# MODELAGEM DA DISPERSÃO ATMOSFÉRICA A PARTIR DA TEORIA K: COMPARAÇÃO ENTRE DIFUSIVIDADES

**Candice Muller**  
Engenheira Eletrônica  
candice.muller@ig.com.br

**Prof. Dr. Angela Beatrice Dewes Moura**  
Prof. e pesquisadora do ICET – Feevale  
angelab@feevale.br

## Resumo

A preocupação e a atenção dispensada pela sociedade com relação ao monitoramento da qualidade do ar vem crescendo consideravelmente. Isto gera a necessidade da elaboração e validação de novos modelos para simulações do nível de concentração de poluentes na atmosfera. Entre estes modelos, têm destaque os modelos eulerianos baseados na teoria do transporte do gradiente, ou Teoria K. A eficiência destes modelos está diretamente relacionada a uma adequada parametrização do coeficiente de dispersão,  $k$ , o qual descreve o comportamento da difusão de contaminantes na atmosfera (turbulência envolvida, ventos, variações de temperatura, condições de estabilidade...). Este trabalho tem por objetivo analisar e comparar alguns coeficientes de dispersão, a fim de avaliar a sua aplicabilidade na equação da concentração. Será mostrada a comparação entre coeficientes adequados a camadas limite atmosférica estável, CLE, a camadas limite atmosférica convectiva, CLC, e um coeficiente geral, válido para todas as condições de estabilidade.

**Palavras chave:** coeficiente de dispersão, Teoria K, Camada Limite Estável, Camada Limite Convectiva.

## Abstract

The concern and the attention excused for the society with relation to the air quality monitoring has growing considerable. This leads to the necessity of the elaboration and validation of new models that allow simulation of the concentration level of pollutants in the atmosphere. Between these models, can be detached eulerian models based in the gradient transport theory, or K Theory. The efficiency of these models is directly related with a good parameterization of the dispersion coefficient, which describes the behavior of the atmospheric pollutants diffusion (that are: turbulence, winds, temperature variations, stability conditions). This work has the objective to analyze and to compare some dispersion coefficients, in order to evaluate its applicability in the concentration equation. It will be shown the comparison between adequate coefficients to atmospheric stable boundary layers, SBL, and to the

atmospheric convective boundary layers, CBL, and a more general coefficient for all the stability conditions.

**Key words:** dispersion coefficient, K Theory , Stable Boudary Layer, Convective Boundary Layer .

## **Introdução**

Com o avanço tecnológico e o conseqüente aumento da cadeia produtiva e o crescimento desenfreado das cidades e da população, a sociedade começou a tomar consciência da necessidade do controle da qualidade do ar. Diariamente, poluentes atmosféricos danosos à saúde humana, são lançados no ar, principalmente por motores automotivos e chaminés industriais, sem um controle efetivo destas emissões, em grande parte pela dificuldade de um monitoramento destas fontes e parte ainda pelo descaso com as questões ambientais.

O elevado custo no monitoramento ambiental inviabiliza os estudos experimentais da dispersão dos poluentes, tornando necessário o desenvolvimento constante de técnicas matemáticas de simulação dos mesmos. Aliado a isso a necessidade de prever rapidamente o efeito de abandonos acidentais, a fim de estabelecer as medidas preventivas e corretivas necessárias é outro fato que impulsiona as pesquisas para desenvolver novos modelos matemáticos de dispersão de pluma, cada vez mais rápidos e precisos. Estes modelos buscam definir a concentração do poluente na atmosfera. A intensidade da turbulência presente na atmosfera, e as condições meteorológicas definem como será o processo de dispersão de uma pluma de contaminantes a partir de uma fonte.

Existem vários modelos de difusão atmosférica, dentre os quais podemos citar o modelo do transporte turbulento do gradiente (Teoria K), as teorias estatísticas e o modelo Gaussiano. Todos eles buscam definir o comportamento do coeficiente de dispersão ' $k$ ' a ser aplicado nas simulações computacionais de concentração de poluente.

Neste trabalho serão descritas, analisadas e comparadas algumas destas técnicas para definição de  $k$ , a fim de avaliar a sua aplicabilidade. Da mesma forma é descrita a camada limite planetária; o modelo da Teoria K; os coeficientes de difusão da teoria estatística para uma Camada Limite Estável – CLE, para uma Camada Limite Convectiva – CLC, e um coeficiente de difusão para todas as condições de estabilidade. Na seqüência é mostrado a comparação entre os mesmos.

## **A Camada Limite Planetária**

A camada limite planetária (CLP) é a região da atmosfera situada mais próxima à terra, onde os poluentes gasosos e particulados são dispersos pelo vento médio (responsável pelo transporte global) e pela turbulência (responsável pela difusão). Ela é a única camada que é influenciada pela presença da superfície terrestre. O arraste, a evaporação e transpiração, a transferência de calor, a emissão de poluentes e modificações do escoamento induzidas pelo terreno são sentidas nesta camada, e devem ser levadas em conta no modelamento da dispersão.

A altura da CLP varia de centenas de metros a poucos quilômetros, dependendo das modificações ocorridas na superfície terrestre, dos níveis de insolação diários, da hora do dia, etc. Além disto a CLP pode ser classificada como estável, neutra ou instável de acordo com taxa de variação da temperatura potencial ao longo da sua altura.

Pasquill (1974) classificou a atmosfera, dividindo a estabilidade em seis classes, de A a F, sendo que a classe A corresponde a classe extremamente instável, F extremamente estável, enquanto que D corresponde a condições neutras.

Camada Limite Neutra (CLN): Taxa de variação da temperatura potencial nula assim, a atmosfera não inibe nem intensifica a turbulência. Esta situação ocorre durante o período de transição do dia para a noite.

Camada Limite Convectiva (CLC): É gerada pelo aquecimento diurno da superfície terrestre, alcançando uma altura de 100 a 3000m a partir do solo. Na CLC, a taxa de variação da temperatura potencial é negativa, ou seja, a temperatura potencial diminui com a altura, gerando uma atmosfera instável, onde a turbulência<sup>1</sup> é intensificada.

Camada Limite Estável (CLE): é gerada pelo resfriamento noturno da superfície da terra, alcançando uma altura de 100 a 300m. Na CLE a taxa de variação da temperatura potencial é positiva, ou seja, a temperatura potencial aumenta com a altura, implicando numa atmosférica estável, onde a turbulência<sup>1</sup> é reduzida.

Vários modelos foram criados para descrever o transporte turbulento na atmosfera, entre eles a Teoria do Transporte de Gradiente, ou Teoria K.

## Os Modelos da Teoria K

A teoria do Transporte de Gradiente, ou Teoria K, tem como base a equação de difusão-advectação para descrever o campo de concentração média de contaminantes, onde os fluxos turbulentos (eq. 2) são assumidos como proporcionais ao gradiente médio  $c$ , e pode ser escrita como (Tirabassi, 1997):

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( Kx \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( Ky \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( Kz \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (Eq.1)$$

$$\overline{w'c'} = Kz \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (Eq.2)$$

Onde  $\bar{c}$  é a componente média da concentração,  $\overline{w'c'}$  é o fluxo turbulento de um contaminante passivo na direção vertical,  $u$ ,  $v$ ,  $w$  são as componentes do vento médio nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  e  $Kx$ ,  $Ky$  e  $Kz$  são coeficientes de difusão longitudinal, lateral e vertical respectivamente.

Estes fluxos turbulentos são obtidos através da derivação da equação do transporte de gradiente, surgindo assim, termos incógnitos de segunda ordem com  $\overline{w'c'}$  na equação da continuidade. Além disto, como o modelo se torna muito dependente da difusividade  $k$ , são chamados de modelos  $k$ . Sendo a difusividade  $Kz$  assumidamente conhecida, o valor médio de  $c$  torna-se a única incógnita da equação, por isso este método é considerado de primeira ordem.

A flexibilidade do modelo está relacionada ao fato do coeficiente  $k$  poder ser especificado como uma função dos processos que envolvem o transporte de contaminantes na atmosfera, como a rugosidade da superfície, da estabilidade da

camada, entre outros. Vários tipos de coeficientes de dispersão ( $k$ ) já foram propostos, e seu desempenho é determinado pelo tipo de parâmetros utilizados na sua dedução.

Existem algumas restrições quanto ao uso deste modelo. Corrsin (1974) apud Lyons e Scott (1990), estabeleceu que as escalas de tempo e comprimento da ação do transporte deveriam ser suficientemente uniformes e pequenas comparadas com as escalas de tempo e comprimento da variação das componentes médias dos gradientes de uma propriedade sujeita a tal transporte. Posteriormente ele notou que, a partir de similaridades básicas da camada limite neutralmente estratificada, tanto em seu laboratório quanto na atmosfera, não seria de surpreender se as mesmas condições não fossem violadas na atmosfera também.

Além disso, a seção transversal da pluma afetada por turbilhões maiores não pode ser descrita pela relação da transferência de gradiente, mas para uma atmosfera estável, onde os turbilhões são pequenos, a relação de transferência de gradiente pode ser utilizada.

A vantagem do modelo K é que condições reais, com variação tridimensional dos campos do vento e difusividade, podem ser simuladas e que simplificações podem ser realizadas, desprezando um ou mais termos.

A teoria K é válida para pequenas variações da concentração ao longo da distância, não descrevendo com precisão o comportamento de uma pluma perto da fonte quando os gradientes são grandes. Ela é usualmente utilizada em todas as condições de estabilidade, variando somente o coeficiente de dispersão, ou coeficiente  $k$ . A seguir são apresentados os coeficientes de dispersão para a CLE, para a CLC e um mais geral que abrange todas as condições de estabilidade.

### **Coefficiente de Difusão da Teoria Estatística para a CLE**

A teoria estatística da difusão de Taylor diz que a difusão turbulenta varia para regiões próximas e distantes da fonte. Ela considera que as partículas próximas à fonte retêm memória de seu meio turbulento inicial e para longos tempos de viagem, esta memória vai sendo perdida com isso, as partículas seguem somente as propriedades da turbulência local. Distante da fonte, o desvio padrão da pluma na vertical é consistente com a variação no tempo, como é dada pela teoria do transporte de gradiente ou teoria K.

A teoria K clássica é normalmente utilizada para grandes tempos de viagem da pluma, ou seja grandes distâncias da fonte. A introdução da difusividade como função do tempo de viagem leva a uma descrição mais abrangente da difusão, agora válida para campos próximos, intermediários e distantes da fonte.

Buscando determinar a equação do coeficiente de difusão  $k$  para a CLE, Degrazia e Moraes (1992) levaram em consideração o comportamento assintótico da equação de  $k$  dependente do tempo para grandes tempos de viagem da difusão, quando os coeficientes de transporte perderam sua memória inicial.

Estes autores concluíram ainda que a difusão para grandes tempos é dependente do comportamento do espectro turbulento das velocidades na camada limite, próximo da origem (fonte), assim como da estabilidade e da altura acima do solo onde o contaminante é abandonado.

Analisando todos os aspectos citados acima, eles chegaram a seguinte equação para  $k$ , a qual pode ser empregada para cálculos de concentração na CLE:

$$\frac{k}{u^* h} = \frac{0.33 (1 - z/h)^{\frac{\alpha_1}{2}} z/h}{1 + 3.7 (z/h) (h/L)} \quad (Eq. 3)$$

Onde  $\mu^*$  é a tensão superficial,  $h$  é a altura da CLE,  $z$  é a altura acima do solo,  $\Lambda$  é o comprimento de Monin-Obukhov local e  $\alpha$  é a constante empírica na determinação do comprimento de Moni-Obukhov.

Partindo do modelo de difusão da equação (3), estudou-se o processo de transporte turbulento em dois estágios da evolução temporal: transporte turbulento para o início da noite e transporte turbulento para tempos mais avançados da noite.

Para simular o caso de transporte turbulento para o início da noite foram utilizados os clássicos dados coletados em Minnesota (Moura, 1995), quando processos evolutivos estacionários ainda estavam presentes, sendo  $\alpha_1 = 2$  e  $\alpha_2 = 3$ .

Para simular o transporte turbulento para tempos mais avançados da noite foram utilizados os dados coletados em Cabauw (Moura 1995), quando a CLE já havia atingido condições mais estacionárias, com  $\alpha_1 = 3/2$  e  $\alpha_2 = 1$ . As medidas de Cabauw foram realizadas aproximadamente três horas após o por do sol, evitando-se assim o período de transição.

Os parâmetros abaixo foram utilizados para traçar os perfis descritos de Cabauw e Minnesota, descritos acima:

$$\begin{aligned} \Lambda &= 116\text{m} \\ h &= 400\text{m} \\ \mu^* &= 0,31\text{m/s} \end{aligned}$$

## **Coefficiente de Difusão da Teoria Estatística para a CLC**

Empregando a teoria da difusão estatística de Taylor e, levando em consideração os mesmos aspectos descritos acima, para a determinação do coeficiente de difusão para a CLE, Degrazia et al. (1997) derivaram uma expressão para o coeficiente de difusão turbulento válido para a CLC:

$$k_1 = \left[ 0.22 \left( \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left( 1 - \frac{z}{z_i} \right)^{1/3} \left( 1 - \exp\left( \frac{-4z}{z_i} \right) - 0.0003 \exp\left( \frac{8z}{z_i} \right) \right) \right] w_* z_i \quad (Eq. 4)$$

Ou ainda da forma:

$$k_2 = 0.15 \psi_\varepsilon^{1/3} \left[ 1 - \exp\left( \frac{-4z}{z_i} \right) - 0.0003 \exp\left( \frac{8z}{z_i} \right) \right]^{4/3} w_* z_i \quad (Eq. 5)$$

Onde  $w_*$  é a escala de velocidade,  $z_i$  é a altura da CLC,  $z$  é uma altura arbitrária e  $\psi_\varepsilon$  é a taxa de dissipação molecular adimensionalizada para uma estratificação convectiva.

A *Figura 1* apresenta os perfis dos coeficientes de difusão convectivos  $k_1$  e  $k_2$ , baseados nas equações 4 e 5, respectivamente.

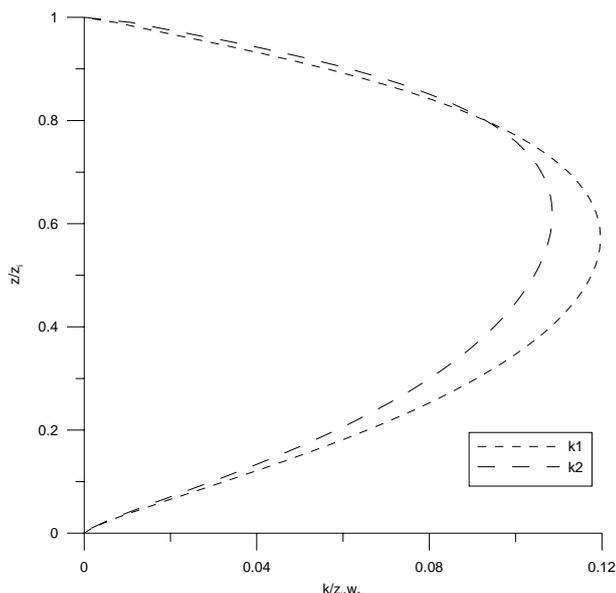


Figura 1 - Perfil médio para o coeficiente de difusão na CLC

Para estas simulações foram utilizados os parâmetros citados abaixo:

$$z_i = 1000\text{m}$$

$$\psi_\varepsilon = 0.65$$

$$z = 0 \text{ a } 1000\text{m}$$

### Coefficiente de difusão para todas as condições de estabilidade

Baseada na teoria clássica de difusão estatística e nas propriedades espectrais observadas dos turbilhões que contém a energia principal do fluxo, Monticelli (1999), desenvolveu um novo conjunto de parametrizações da turbulência para ser usado em modelos de transporte de contaminantes na CLP, válido para todas as condições de estabilidade. A equação 6 apresenta o coeficiente de difusão turbulento:

$$k_i = 0.14\sqrt{c_i}z \left\{ \left( \frac{-\bar{L} z_i}{z_i - \bar{L}} \right)^{1/2} \frac{(z/z_i)^{1/3} (\Psi_\varepsilon)^{1/3} w_*}{[(f_m^*)_i^c]^{4/3}} + \frac{(\Phi_\varepsilon)^{1/3} u_*}{[(f_m^*)_i^{n+es}]^{4/3}} \right\} \quad (Eq. 6)$$

Onde  $\bar{L}$  é o comprimento de Monin-Obukhov,  $z_i$  é a altura da CLP com estratificação convectiva,  $\psi_\varepsilon$  é a taxa de dissipação molecular adimensionalizada para uma estratificação convectiva,  $w_*$  é a escala de velocidade convectiva,  $\phi_\varepsilon$  é a taxa de dissipação molecular adimensionalizada para uma estratificação neutra ou estável,  $(f_m^*)_i^c$  é a frequência associada ao máximo do espectro convectivo e  $(f_m^*)_i^{n+es}$  é a frequência associada ao máximo do espectro neutro ou estável.

Esta parametrização fornece valores contínuos na CLP em todas as elevações, para todas as condições de estabilidade: estável, neutra ou convectiva.

A Figura 2 apresenta o perfil médio do coeficiente de difusão para todas as condições de estabilidade.

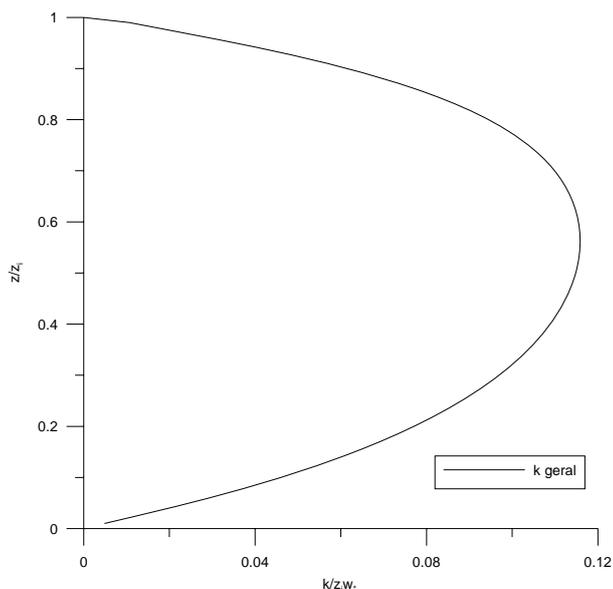


Figura 2 – Perfil médio do coeficiente de difusão para todas as condições de estabilidade

### Análise dos resultados

Para o desenvolvimento do trabalho, foram realizadas simulações computacionais com o auxílio de softwares de programação, baseadas nos dados apresentados nas *Tabelas 1 e 2*.

	$h$ (m)	$L$ (m)	$\mu^*$ (m/s)	$\alpha_1$	$\alpha_2$
Cabawn	400	116	0,31	3/2	1
Minnessota	400	116	0,31	2	3

Tabela 1 – Dados utilizados nas simulações dos coeficientes de dispersão na CLE

	$\alpha$	$\gamma$	$\beta$	$\kappa$
Geral estável	5/3	1	1	0,4
Geral convectivo	1	1	5/3	0,4

Tabela 2 – Dados utilizados nas simulações dos coeficientes de dispersão na CLC e para todas as condições de estabilidade

A *Figura 3* traz uma comparação entre o perfil médio de  $k$  para Minnesota e para Cabauw. Observa-se nesta figura que a camada limite planetária superficial de Minnesota e a de Cabauw apresentam a mesma intensidade de turbulência vertical, enquanto que para regiões mais elevadas, o caráter mais neutro da camada limite de Minnesota (pelo fato de seus dados terem sido coletados no início da noite, onde ainda estavam presentes os processos evolutivos estacionários) exibe uma maior intensidade turbulenta, ou seja, um maior valor de  $k$ . Ainda podemos observar que para os dois experimentos o  $k$  possui o mesmo perfil: aumenta rapidamente até uma altura, onde atinge seu valor máximo e, a partir desta altura começa a decair mais lentamente.

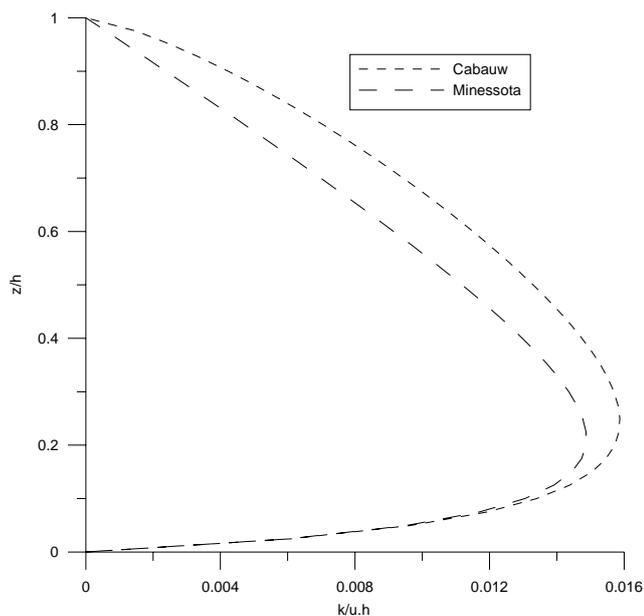


Figura 3 – Comparação entre os perfis médios dos coeficientes de difusão na CLE

A *Figura 4* mostra a comparação entre o perfil médio de  $k$  para a CLE (eq. 3) utilizando dados de Minnesota e Cabauw, com o modelo obtido na eq. 6, que é válido para todas as condições de estabilidade. Podemos notar na *Figura 4* que ambos os modelos possuem o mesmo comportamento, ou seja, para todas as simulações o valor de  $k$  aumenta rapidamente até uma determinada altura, a partir da qual começa a decair mais lentamente. Nota-se ainda que há uma diferença maior na grandeza dos valores dos  $k$ 's de Cabauw e Minnesota em relação a grandeza do  $k$  geral porém, como estamos tratando de valores na ordem de  $10^{-2}$ , esta diferença torna-se desprezível.

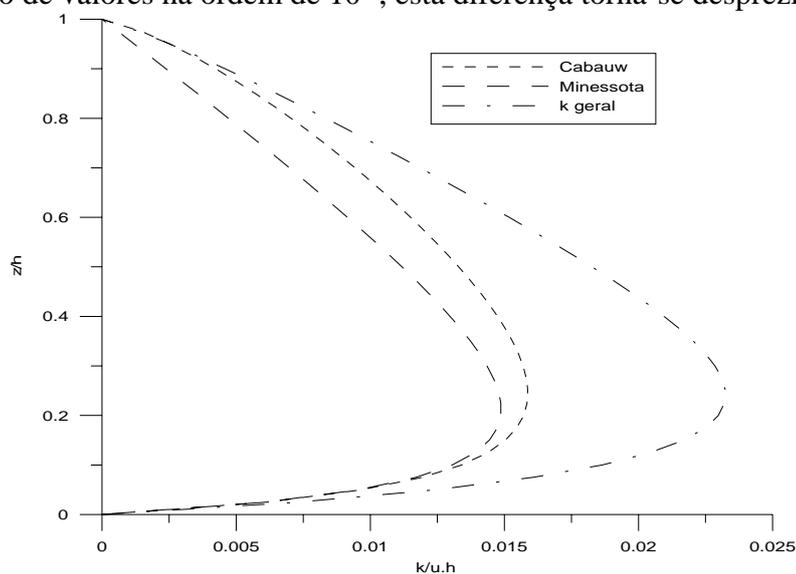


Figura 4 - Comparação entre os perfis médios dos coeficientes de difusão na CLE com o perfil do coeficiente de difusão para todas as condições de estabilidade

A comparação entre o modelo obtido para todas as condições de estabilidade (eq. 6) com o modelo obtido para a CLC (eq. 4 e 5) é vista na *Figura 5*. Para o caso convectivo, o  $k$  geral apresentou um resultado muito próximo ao obtido pelas equações definidas para a CLC. Tanto o perfil da curva quanto a grandeza dos valores validam o modelo do  $k$  geral para esta camada.

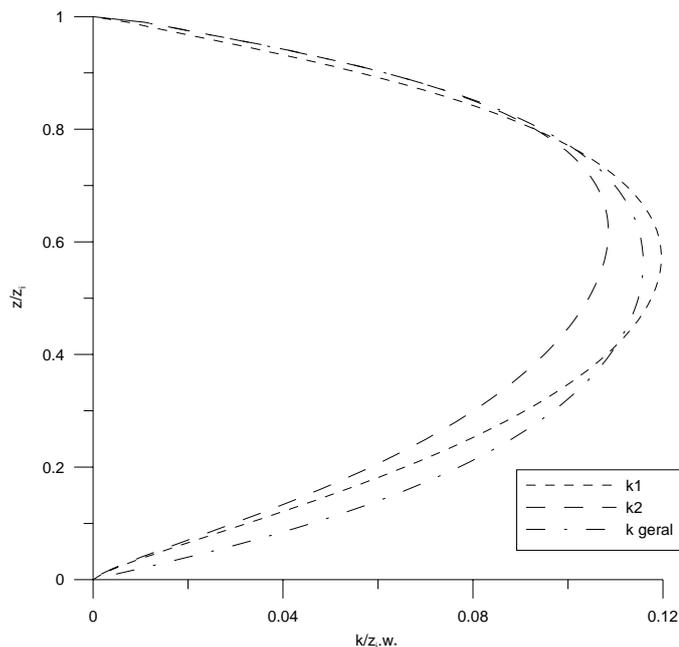


Figura 5 - Comparação entre os perfis médios dos coeficientes de difusão na CLC com o perfil do coeficiente de difusão para todas as condições de estabilidade

## Conclusões

Para descrever o comportamento de uma pluma de contaminantes na atmosfera de forma que os valores sejam confiáveis e próximos à realidade são necessários modelos que descrevam o comportamento da atmosfera (suas turbulências, ventos, variações de temperatura...) o mais próximo à realidade possível. Por isso, pesquisadores estão sempre na busca de modelar novos coeficientes de dispersão, que retratem cada vez mais estas variações da atmosfera. Nosso trabalho foi estudar alguns destes modelos de coeficientes de dispersão e analisar seus comportamentos. Ao final, pode-se concluir que os coeficientes de dispersão aplicáveis a CLE, a CLC e a todas as condições de estabilidade apresentam um perfil que descreve de forma coerente a atmosfera em questão, podendo ser aplicados nas equações de cálculo da concentração, onde apresentaram resultados próximos a realidade.

Além disto foi mostrado que os modelos  $k$ , com uma correta parametrização de coeficientes de dispersão são uma poderosa ferramenta para o cálculo de concentrações de uma pluma de contaminantes.

## Referências

LYONS, T. J.; SCOTT, W. D. **Principles of Air Pollution Meteorology**. New York: Belhaven Press, 1990. 224p.

DEGRAZIA, G. A., MORAES, O L. L.. A Model for Eddy Diffusivity in a Stable Boundary Layer. **Boundary-Layer Meteorol.** 58, 205-214, 1992.

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

MONTICELLI, C. O. **Parametrização da Turbulência na Camada Limite Planetária Sob Todas Condições de Estabilidade**. Porto Alegre: UFRGS, 1999. Dissertação (Mestrado) – Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1999.

MOURA, A B. D.. **Solução Analítica para Dispersão Vertical Turbulenta em uma Camada Limite Estável**. Porto Alegre: UFRGS, 1995. Dissertação (Mestrado) – Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 1995.

MOURA, A B. D.. **Modelos Multidimensionais Analíticos de Dispersão de Contaminantes na Atmosfera: Coeficientes de Difusão Dependentes da Distância da Fonte**. Porto Alegre: UFRGS, 1999, 56 p. Tese (Doutorado)– Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 1999.

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

TIRABASSI, T.. Solutions of the advection-diffusion equations, **Proc. Air Pollution V, International Conference on Air Pollution Modelling, Monitoring and Management** (eds. Power H., Tirabassi T., Brebbia C. A.), Boston, Comp. Mec. Public. 1997