

Simulação da dispersão de poluentes em condições de forte convecção atmosférica

Davidson M. Moreira¹, Paulo R. Sonnemann²,
Fernanda M. Valentini², Wellington L. Castro²

Resumo

Levando-se em consideração o atual conhecimento da estrutura e características da Camada Limite Convectiva (CLC), uma simples formulação semi-empírica para o parâmetro de dispersão e coeficiente de difusão para serem usados em modelos de dispersão atmosférica foi derivada. Consiste em uma expressão para o parâmetro de dispersão e coeficiente de difusão dependentes da distância da fonte para uma turbulência não homogênea em condições extremamente instáveis. A teoria de similaridade de Yaglom é usada para estimar estas expressões. Além disso, este coeficiente de difusão vertical foi introduzido em um modelo de poluição do ar, validado com os dados experimentais de "Prairie Grass" e comparado com o modelo Gaussiano. Os resultados desta parametrização concordam com as medidas de "Prairie Grass" e também com os Gaussianos. O presente estudo sugere que a inclusão do efeito de memória na teoria de similaridade de Yaglom, importante para regiões próximas de uma fonte pontual em condições extremamente instáveis, melhora a descrição do processo de transporte turbulento de contaminantes atmosféricos.

Palavras-chave: Teoria de similaridade, poluição do ar, coeficiente de difusão.

Abstract

Accounting for the current knowledge of the Convective Boundary Layer (CBL) structure and characteristics a simple semi-empirical formulation for the eddy diffusivity and dispersion parameter to be used in atmospheric dispersion models has been derived. That is, an expression for the dispersion parameter and eddy diffusivity depending on source distance for inhomogeneous turbulence in strongly unstable conditions is proposed. The Yaglom's similarity theory is used to estimate these quantities. In addition, this vertical eddy diffusivity was introduced in an air pollution model and validated with the data of Prairie Grass experiments and compared with a Gaussian model. The results of this parameterization are shown to agree with the measurements of Prairie

¹Universidade Luterana do Brasil, PPGEAM, Canoas, Brasil

²Bolsistas de Iniciação Científica

Grass and also with those Gaussian. Furthermore, the present study suggests that the inclusion of the memory effect in the Yaglom's similarity theory, important in near regions from a low continuous point source in strongly unstable conditions, improves the description of the turbulent transport process of atmospheric contaminants.

Key Words: Similarity theory, air pollution, eddy diffusivity.

1 Introdução

Nos problemas de dispersão atmosférica a escolha de uma parametrização turbulenta representa uma decisão fundamental para a modelagem do transporte de contaminantes. Do ponto de vista físico a parametrização da turbulência é uma aproximação da natureza no senso que estamos colocando em modelos matemáticos uma relação aproximada que em princípio pode ser usada como uma substituição para o verdadeiro termo desconhecido. A validade de cada modelo depende do modo como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados ao atual conhecimento da Camada Limite Planetária (CLP). Muitas das parametrizações da turbulência usadas em modelos avançados de dispersão são baseados em teorias de similaridade da CLP [1-4]: a parametrização da turbulência está diretamente relacionada aos parâmetros físicos básicos que descrevem o estado da turbulência da CLP.

A equação de difusão-advecção tem sido largamente aplicada em modelos de dispersão atmosféricos operacionais para prever a concentração média de contaminantes na CLP. Em princípio, desta equação é possível obter um modelo teórico de dispersão de uma fonte pontual contínua dadas as apropriadas condições iniciais e de contorno mais o conhecimento da velocidade do vento e fluxos turbulentos de concentração.

Muitas das pesquisas de dispersão turbulenta são relacionadas na especificação destes fluxos turbulentos que conduzem para a solução da equação de difusão-advecção: este procedimento, algumas vezes, é chamado como o fechamento do problema de difusão turbulenta.

O principal esquema para o fechamen-

to destas equações é relacionar o fluxo turbulento de concentração ao gradiente da concentração média por coeficientes de difusão, que são propriedades do escoamento turbulento mas não do fluido; isto é o fechamento de primeira ordem [5]. Ainda mais importante, os coeficientes de difusão podem variar no espaço e com o tempo de viagem dos contaminantes. Em sua teoria estatística de difusão, Taylor [6] mostrou que a difusão turbulenta é diferente em regiões próximas e distantes de uma fonte contínua. Na proximidade da fonte, partículas fluidas mantêm a memória de seu ambiente turbulento inicial. Para grandes tempos de viagem, esta memória é perdida, e as partículas seguem somente as propriedades da turbulência local [7].

A teoria de Yaglom [8] domina a dispersão vertical de uma liberação na camada superficial e é aplicável em condições muito instáveis ($-z_i/L > 10$) quando um extensivo regime de convecção livre existe ($-L < z < 0.1z$). Yaglom argumentou que neste regime, a taxa de produção da turbulência devido ao empuxo é a mais relevante variável a determinar a velocidade vertical média de uma pluma ou nuvem. O acelerado crescimento - o expoente 3/2 sobre X versus 1 para a teoria estatística - falha para o aumento de σ_w com a altura na camada de convecção livre. Devemos reconhecer que esta lei de crescimento representa somente comportamento de um pequeno tempo ou distância porque a pluma eventualmente se estenderá para dentro da camada de mistura onde σ_w varia mais lentamente com a altura z . Isto é, os efeitos de uma região de mistura finita e uma escala de comprimento que limita a turbulência (∞z_i) devem entrar.

Além disso, lembramos que esta teoria se aplica somente para fontes superficiais. Apesar destas restrições, a teoria fornece um resultado limite muito útil sobre a taxa de dispersão desde que a teoria estatística não pode legitimamente ser aplicada na camada superficial por causa da variação de σ_w com z [9]. Para a difusão vertical a partir de uma fonte superficial, o crescimento de convecção livre ($\sigma_z \sim t^{3/2}$) fita bem as observações de laboratório quando $X \leq 0.5$ [10].

O objetivo deste trabalho é obter uma simples formulação semi-empírica para o parâmetro de dispersão e coeficiente de difusão que são funções da distância da fonte em condições de forte convecção. Isto é baseado na velocidade turbulenta vertical, na escala de tempo integral Lagrangiana e na teoria de similaridade de Yaglom. Este coeficiente de difusão, derivado para condições fortemente instáveis, pode descrever a dispersão nas proximidades de uma fonte contínua baixa. Para investigar a influência da teoria de similaridade de Yaglom no processo de dispersão turbulenta, o coeficiente de difusão vertical função da distância da fonte em condições fortemente instáveis, é utilizado em um modelo de poluição do ar e confrontado com dados observacionais do experimento de dispersão atmosférica de Prairie Grass [11].

2 Parametrização da turbulência

Pasquill [12] sugere a seguinte relação sigma, que é consistente com a teoria estatística de difusão:

$$\sigma_z = \sigma_w t S_z(t/T_L) \quad (1)$$

onde σ_w é o desvio padrão da velocidade do vento vertical, S_z é uma função universal da difusão, t é o tempo e T_L é a escala Lagrangeana de tempo. A equação (1) tem sido a base de muitas análises prá-

ticas dos dados de difusão desde o trabalho de Draxler [13]. Pesquisadores da difusão tem frequentemente sugerido que uma aproximação como esta, iniciando com medidas diretas da turbulência próxima da fonte, é a maneira mais confiável de modelar a difusão [14].

A partir da teoria de similaridade de Yaglom o parâmetro de dispersão vertical pode ser expresso como:

$$\frac{\sigma_z}{z_i} = \frac{2}{3} c_1 X^{3/2} \propto t^{3/2} \quad (2)$$

onde $X = \frac{w_* x}{U z_i}$ pode ser imaginado como um tempo adimensional desde que é a razão do tempo de viagem (x/U) com a escala de tempo convectivo (z_i/w_*), x é a distância adimensional e c_1 é a constante de Yaglom.

Na camada superficial, a taxa de dissipação ε tem sido parametrizada em termos da variança de velocidade e alguma escala de comprimento apropriada. Hinze [15] e Tennekes [16], assumindo uma forma exponencial para a função autocorrelação Lagrangeana, sugeriu a seguinte relação entre ε e a escala de tempo integral Lagrangeana T_{L_w} :

$$\varepsilon = \frac{2\sigma_w^2}{C_0 T_{L_w}} \quad (3)$$

onde C_0 é uma constante numérica. Apesar de trabalhos teóricos e experimentais presentes na literatura, o valor de C_0 não é estabelecido e representa ainda uma matéria em aberto [4]. Hinze [15] encontrou que C_0 varia entre 3 e 10. A Eq.(3) mostra que a taxa de dissipação da turbulência é determinada pela dinâmica de grande escala. A energia é dissipada em uma taxa proporcional a energia disponível e, reciprocamente, ao tempo de evolução dos turbilhões energéticos (que é representado pela escala integral

Lagrangiana, T_L).

De acordo com Pasquill e Smith [17], o parâmetro de dispersão vertical quando o tempo de difusão t é de magnitude intermediária, isto é, grande o suficiente para σ_z tornar-se independente de seu valor inicial, mas não muito grande em relação a escala da turbulência, pode ser expresso por:

$$\sigma_z^2 \propto \epsilon t^3 \quad (4)$$

Este resultado mostra a natureza essencialmente acelerativa da difusão relativa, que ocorre enquanto as separações envolvidas são pequenas comparadas com a escala da turbulência.

Baseando-se nas equações (3) e (4) acima uma formulação para o parâmetro de dispersão vertical σ_z na camada superficial pode ser obtida:

$$\sigma_z^2 \propto \frac{2}{C_0} \left(\frac{\sigma_w^2}{T_L} \right) t^3 = A_0 \frac{2}{C_0} \left(\frac{\sigma_w^2}{T_L} \right) t^3 = A_0 \epsilon t^3 \quad (5)$$

onde A_0 é uma constante. Usando-se

$\mu = \frac{A_0}{C_0}$, a equação (5) pode ser escrita como:

$$\sigma_z^2 = 2\mu \left(\frac{\sigma_w^2}{T_L} \right) t^3 \quad (6)$$

então, o parâmetro de dispersão vertical torna-se:

$$\sigma_z = \sigma_w t \left(2\mu \frac{t}{T_L} \right)^{1/2} \quad (7)$$

Comparando-se a Eq. (7) com a Eq. (1) resulta na função S_z :

$$S_z = \left(2\mu \frac{t}{T_L} \right)^{1/2} \quad (8)$$

A evolução temporal do coeficiente de difusão K_α depende fundamentalmente da equação dependente do tempo de Batchelor [7]:

$$K_\alpha = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_\alpha^2}{dt} \quad (9)$$

com $a = x, y, z$. A Eq. (9) afirma que o coeficiente de difusão é a derivada temporal da variância espacial. Substituindo-se (6) em (9) resulta o seguinte coeficiente de difusão vertical:

$$K_z = 3\mu \left(\frac{\sigma_w^2}{T_{L_w}} \right) t^2 \quad (10)$$

As equações (7) e (10) são expressas em termos da variância da velocidade turbulenta vertical e da escala de tempo de decorrelação vertical. Neste trabalho estes parâmetros serão derivados da teoria de similaridade.

3. Variância da velocidade turbulenta e escala de tempo lagrangeana

Na camada superficial convectiva, a componente da velocidade turbulenta vertical σ_w tem sido representada como [18]:

$$\sigma_w = 1.3u_* [1 + 3(-z/L)]^{1/3} \quad (11)$$

onde z é a altura acima do solo. A expressão (11) forma uma conveniente interpolação entre os limites neutro e fortemente convectivo. A velocidade de atrito superficial u_* pode ser escrita como segue:

$$u_* = w_* \left(\frac{-kL}{z_i} \right)^{1/3} \quad (12)$$

onde $k=0.4$ é a constante de von Karman, z_i é a altura da camada limite instável e w_* é a escala de velocidade convectiva. Então, a equação (11) pode ser escrita como:

$$\sigma_w = 0.96w_* \left(\frac{-L}{z_i} \right)^{1/3} \left[1 + 3 \left(\frac{-z}{L} \right) \right]^{1/3} \quad (13)$$

Para a escala integral de tempo Lagrangeana foi utilizada uma expressão sugerida por Hanna [1]:

$$T_L = 0.59 \left(\frac{z}{\sigma_w} \right) \quad (14)$$

4. Parâmetro de dispersão vertical e coeficiente de difusão

A partir da teoria de similaridade, as expressões (13) e (14) foram introduzidas na equação (7) para obter-se o seguinte parâmetro de dispersão vertical:

$$\frac{\sigma_z}{z_i} = 1.75 \mu^{1/2} X^{3/2} \left[\left(\frac{-L}{z} \right) + 3 \right]^{1/2} \quad H_s \leq z \leq 0.1z_i \quad (15)$$

onde H_s é a altura da fonte. Para o parâmetro de dispersão vertical nós tomamos uma média na variável z :

$$\overline{\sigma_z} = \frac{1}{0.1z_i - H_s} \int_{H_s}^{0.1z_i} \sigma_z dz \quad (16)$$

Das Eqs. (9) e (15) o coeficiente de difusão vertical K_z foi calculado:

$$\frac{K_z}{w_* z_i} = 4.4 \mu X^2 \left[\left(\frac{-L}{z} \right) + 3 \right] \quad H_s \leq z \leq 0.1z_i \quad (17)$$

Desta forma, neste estudo nós introduzimos o coeficiente de difusão vertical (17) em um modelo de poluição do ar e a Eq. (16) em um modelo Gaussiano para simular a concentração integrada lateralmente de contaminantes liberados a partir de uma fonte baixa em condições fortemente instáveis. O valor da constante m foi estimada pela comparação da Eq. (15) (quando $L \rightarrow 0$) com as Eqs. (6 e 8) do trabalho de Nieuwstadt [19]. Desta comparação nós obtivemos um valor de 0.06 para a constante m .

5. Modelo de poluição do ar

Conforme Vilhena [20-22], para um sistema de coordenadas cartesiano em que a direção x coincide com a do vento médio, a equação de difusão-advecção no estado estacionário pode ser escrita como [5]:

$$U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (18)$$

onde \bar{c} representa a concentração média, U a velocidade média do vento na direção x e K_x , K_y e K_z são os coeficientes de difusão. A integração lateral da equação (18) (negligenciando a difusão longitudinal) conduz para a seguinte expressão:

$$U \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} \right) \quad (19)$$

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

$$K_z \frac{\partial \bar{c}^y}{\partial z} = 0 \quad \text{em } z = 0, z_i \quad (20)$$

$$U \bar{c}^y(0, z) = Q \delta(z - H_s) \quad \text{em } x = 0 \quad (21)$$

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

Levando-se em consideração a dependência do coeficiente K_z e o perfil de velocidade do vento U sobre a variável z , a altura z_i da CBL é discretizada em N sub-intervalos de modo que em cada intervalo $K_z(z)$ e $U(z)$ assumem um valor médio:

$$K_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(z) dz \quad (22)$$

$$U_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} U(z) dz \quad (23)$$

Para o coeficiente de difusão vertical dependente das variáveis x e z , inicialmente

te nós tomamos uma média em z :

$$K_n(x) = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} K_z(x, z) dz \quad (24)$$

O procedimento é muito similar para a variável x . O domínio na variável x é discretizado em sub-intervalos de comprimento Δx_i e em cada sub-intervalo é considerado o seguinte valor médio para o coeficiente de difusão:

$$K_{i,n} = \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \int_{x_i}^{x_{i+1}} K_n(x') dx' \quad (25)$$

Lembramos que $K_{i,n}$ assume um valor constante em $x_i \leq x \leq x_{i+1}$ e $z_n \leq z \leq z_{n+1}$.

Então, a solução do problema (19) é reduzido para a solução de N problemas do tipo:

$$U_n \frac{\partial \bar{c}_n^y}{\partial x} = K_{i,n} \frac{\partial^2 \bar{c}_n^y}{\partial z^2} \quad z_n \leq z \leq z_{n+1} \quad x_i \leq x \leq x_{i+1} \quad (26)$$

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

$$\bar{c}_n^y = \bar{c}_{n+1}^y \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (27)$$

$$K_n \frac{\partial \bar{c}_n^y}{\partial z} = K_{n+1} \frac{\partial \bar{c}_{n+1}^y}{\partial z} \quad n = 1, 2, \dots, (N-1) \quad (28)$$

Aplicando-se a transformada de Laplace na equação (26) resulta:

$$\frac{\partial^2 \bar{c}_n^y}{\partial z^2} - \frac{U_n s}{K_n} \bar{c}_n^y(s, z) = -\frac{U_n}{K_n} \bar{c}_n^y(0, z) \quad (29)$$

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

$$\bar{c}_n^y(s, z) = A_n e^{-R_n z} + B_n e^{R_n z} + \frac{Q}{2R_a} \left(e^{-R_n(z-H_s)} - e^{R_n(z-H_s)} \right) \quad (30)$$

onde

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

Finalmente, aplicando-se as condições de interface e contorno nós obtemos um sistema linear para as constantes de integração. De agora em diante a concentração é obtida invertendo-se numericamente a concentração transformada \bar{c}_n^y pelo esquema de quadratura Gaussiana [23]:

$$\bar{c}_n^y(x, z) = \sum_{j=1}^8 A_j \frac{P_j}{x} \left(A_n e^{-\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right) z} + B_n e^{\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right) z} \right) \quad (31)$$

$$\bar{c}_n^y(x, z) = \sum_{j=1}^8 A_j \frac{P_j}{x} \left(A_n e^{-\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right) z} + B_n e^{\left(\sqrt{\frac{P_j U_n}{x K_n}}\right) z} + \right. \quad (32)$$

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

A solução (31) é válida para camadas que não contêm a fonte contaminante. Por outro lado, a solução (32) pode ser usada para estimar o campo de concentração na camada que contém a fonte contínua. Estas soluções são válidas somente para $x > 0$, uma vez que o esquema de inversão de Laplace por quadratura não é permitido para $x = 0$. A_j e P_j são os pesos e raízes do esquema de quadratura Gaussiana e são tabulados no livro de Stroud e Secrest [24].

Neste ponto é importante mencionar que este procedimento conduz à solução para a concentração com uma dependência contínua em z e seccionalmente contínua em x devido à imposição da condição de continuidade de concentração e fluxo de concentração na interface z_n . Para obter uma solução com dependência contínua nas variáveis x e z , devemos aplicar, além das condições de contorno, as condições de interface e continuidade da concentração em x_i e z_n . A justificativa para a aproximação adotada deriva da

simplicidade resultante da imediata aplicação da formulação para concentração encontrada por Moreira [25], quando o coeficiente de difusão varia somente na variável z . Além disso, nenhum esforço computacional adicional é necessário para estimar a concentração quando o coeficiente de difusão depende de x e z . Estamos cientes que este procedimento é uma aproximação devido à descontinuidade de concentração na interface x_f , mas isto melhora os resultados como será mostrado posteriormente. É também relevante dizer que para ambas aproximações, o número de constantes de integração são iguais ao número de condições de contorno e interface, conseqüentemente as constantes de integração são unicamente determinadas.

6 Avaliação do modelo

A performance do presente modelo (Eqs. 31, 32, e 17) tem sido confrontada com dados experimentais de concentração usando SO_2 dos experimentos de dispersão realizados em O'Neill, Nebraska, 1956, descritos em Barad [11]. O poluente (SO_2) foi emitido sem empuxo a uma altura de 0.5 m e foi medido pelos amostradores a uma altura de 1.5 m em cinco distâncias (50, 100, 200, 400, 800 m). O sítio de Prairie Grass foi plano com um comprimento de rugosidade de 0.6 cm. Os resultados para vinte experimentos fortemente convectivos ($-z_i/L > 10$) são apresentados [16]. Para calcular u_* a equação (12) foi usada.

O perfil da velocidade do vento usado nas Eqs. (31) e (32) tem sido parameterizado segundo a teoria de similaridade de Monin-Obukhov e o modelo OML [26]:

$$U = \frac{u_*}{k} [\ln(z/z_0) - \Psi_m(z/L) + \Psi_m(z_0/L)] \quad \text{se } z \leq z_b \quad (33)$$

$$U = U(z_b) \quad \text{se } z > z_b \quad (34)$$

onde $z_b = \min[L, 0.1z_i]$, e Ψ_m é uma

função estabilidade dada por [27]:

$$\Psi_m = 2 \ln \left[\frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[\frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2} \quad (35)$$

com

$$A = (1 - 16z/L)^{1/4} \quad (36)$$

$k = 0.4$ é a constante de Von Karman,

u_* é a velocidade de atrito e z_0 o comprimento de rugosidade.

Como um teste para as aproximações (17), (31) e (32) e também para analisar a influência da teoria de Yaglom no transporte turbulento, as parameterizações (16) e (17) são usadas para simular as concen-

trações integradas lateralmente $\overline{c^y(x, z)}$ de Prairie Grass. A Figura 1 mostra o diagrama de espalhamento de concentração usando as aproximações (31) e (32) com o coeficiente de difusão vertical dado pela Eq. (17) e os resultados de um modelo Gaussiano calculado com a Eq. (16). A Figura 2 mostra uma comparação entre os valores de concentração adimensional observados e preditos como uma função da distância adimensional. Os resultados gerados pelos presentes modelos (Eqs. 17, 31 e 32; modelo Gaussiano com Eq. 16) são comparados com valores de concentração observados durante o experimento de Prairie Grass e, além disso, com os resultados de Nieuwstadt [19]. Esta comparação mostra que, diferente do modelo de Nieuwstadt, para pequenas distâncias de viagem a presente parameterização reproduz muito bem as concentrações observadas integradas lateralmente. Para distâncias maiores, o rápido declínio nas concentrações medidas pode ser explicado pela perda de material traçador nos experimentos de campo para a superfície ou outras causas.

Subseqüentemente, no conjunto de dados foi aplicado os seguintes índices estatísticos [28]:

NMSE (normalized mean square error) = $\frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}}$,

$$\begin{aligned}
 \text{FA2} &= \text{fraction of data (\%)} \text{ for } 0.5 \leq (C_p / C_o) \leq 2 \\
 \text{COR (correlation coefficient)} &= \frac{(\overline{C_o - C_p})(\overline{C_p - C_o}) / \sigma_o \sigma_p}{\overline{C_o - C_p} / 0.5(\overline{C_o + C_p})} \\
 \text{FB (fractional bias)} &= \frac{(\sigma_o - \sigma_p) / 0.5(\sigma_o + \sigma_p)}{\overline{C_o - C_p} / 0.5(\overline{C_o + C_p})} \\
 \text{FS (fractional standart deviations)} &= \frac{(\sigma_o - \sigma_p) / 0.5(\sigma_o + \sigma_p)}{\overline{C_o - C_p} / 0.5(\overline{C_o + C_p})}
 \end{aligned}$$

Onde os subscritos o e p referem-se as quantidades observadas e previstas, e uma barra acima indica uma média. Os resultados dos índices estatísticos são comparados com os obtidos a partir do modelo Gaussiano, e são mostrados na Tabela 1. Uma excelente concordância com os resultados do modelo Gaussiano foi obtida com a proposta aproximação que considera K_z variar com a distância da fonte conforme a teoria de Yaglom.

7 Conclusões

Um simples coeficiente de difusão semi-empírico dependente da distância da fonte para uma CLP instável que considera a teoria de Yaglom é proposta. Este coeficiente de difusão é baseado na teoria de similaridade de Yaglom. Este coeficiente é válido em regiões próximas de uma fonte contínua baixa em condições fortemente instáveis.

O presente modelo fornece um coeficiente de difusão vertical variando com a distância da fonte para turbulência não-homogênea em uma CBL e que foi introduzido em um modelo de poluição do ar e validado com os dados experimentais de Prairie Grass e finalmente comparado com um modelo Gaussiano. A análise estatística dos resultados mostra uma excelente concordância entre os resultados da aproximação proposta com os experimentais e também com os do modelo Gaussiano. A presente análise sugere que a inclusão da

teoria de Yaglom, melhora a descrição do processo de transporte turbulento de efluentes atmosféricos liberados por uma fonte contínua baixa em condições fortemente convectivas. Finalmente é relevante mencionar que o modelo proposto para coeficiente de difusão, expresso pela Eq. (17), dependente da distância da fonte é adequado para aplicações em modelos de difusão atmosféricos.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) and FAPERGS (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul) pelo parcial suporte financeiro deste trabalho.

Referências

- Hanna, S.R. (1982). *Applications in air pollution modeling*. Atmospheric turbulence and air pollution modeling. F.T.M. Nieuwstad and H. von Dop, Eds, D. Reidel Publishing, 275-310.
- Stull, R.B. (1988). *An Introduction to Boundary Layer Meteorology*. Kluwer Academic Publishers, Boston, 666 pp.
- Kaimal, J.C., & Finnigan, J.J. (1994). *Atmospheric Boundary Layer Flows*. Oxford University Press, Oxford, 289 pp.
- Rodean, H.C. (1994). *Notes on the langevin model for turbulent diffusion of "marked" particles*. Report UCRL-ID-115869, Lawrence Livermore National Laboratory, 122 pp.
- Arya, S.P. (1995). Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. *J. Appl. Meteor.*, 34, 1112-1122.
- Taylor, G.I. (1921). Diffusion by continuous movements. *Proc. London Math. Soc.*, 20, 196-212.
- Batchelor, G.K. (1949). Diffusion in a field of homogeneous turbulence, Eulerian analysis. *Aust. J. Sci. Res.*, 2, 437-450.

8. Yaglom, A.M. (1972). Turbulent diffusion in the surface layer of the atmosphere. *Izv. Atmos. Oceanic Phys.*, 8, 333-340.
9. Venkatran, A., & Wyngaard, J.C. (1988). *Lectures on Air Pollution Modeling*. Amer. Meteor. Society, Boston, 390 pp.
10. Willis, G.E., & Deardorff, J.W. (1976a). A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary layer. *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.*, 102, 427-445.
11. Barad, M.L. (1958). Project Prairie Grass: A Field Program in Diffusion. *Geophys. Res. Paper No. 59 (II) TR-58-235*, Air Force Cambridge Research Centre, USA.
12. Pasquill, F. (1971). Atmospheric dispersion of pollution. *J. Roy. Meteor. Soc.*, 97, 369-395.
13. Draxler, R.R. (1976). Determination of atmospheric diffusion parameters. *Atmos. Environ.*, 10, 99-105.
14. Hanna, S.R., Briggs, G.A., Deardorff, J., Egan, B.A., Gifford, F.A., & Pasquill, F. (1977). Meeting Review: AMS Workshop on Stability Classification Schemes and Sigma Curves – Summary of Recommendations. *Bull. Amer. Meteor. Soc.*, 58, 1305-1309.
15. Hinze, J.O. (1975). *Turbulence*. Mc Graw Hill, 790 pp.
16. Tennekes, H. (1982). *Similarity relation, scaling laws and spectral dynamics*. In: Nieuwstadt F.T.M. and Van Dop H. eds.. Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modeling. Reidel, Dordrecht, 37-68.
17. Pasquill, F., & Smith, F.B. (1983). *Atmospheric diffusion*. Ellis Howood Ltd., Chichester, 437 pp.
18. Panofsky, H.A., Tennekes, H., Lenschow, D.H., & Wyngaard, J.C. (1977). The characteristics of turbulent velocity components in the surface layer under convective conditions. *Bound. Layer Meteor.*, 11, 355-361.
19. Nieuwstadt, F.T.M., (1980). Application of mixed-layer similarity to the observed dispersion from a ground level source. *J. Appl. Meteor.*, 19, 157-162.
20. Vilhena, M.T., Rizza, U., Degrazia, G.A., Mangia, C., Moreira, D.M., & Tirabassi, T. (1998). An analytical air pollution model: development and evaluation. *Contr. Atmos. Phys.*, 71, n. 3, 315-320.
21. Moreira, D.M., Degrazia, G.A., & Vilhena, M.T. (1999). Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model. *II Nuovo Cimento*, 22, n. 5, 399-405.
22. Degrazia, G.A., Moreira, D.M, & Vilhena, M.T. (2001). Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for inhomogeneous turbulence. *Journal of Applied Meteorology*, 40, 257-264.
23. Heydarian, M., & Mullineaux, N. (1989). Solution of parabolic partial differential equations. *Appl. Math. Modelling*, 5, 448-449.
24. Stroud, A.H., & Secrest, D. (1966). *Gaussian Quadrature Formulas*. Englewood Cliffs, N.J., Prentice Hall, Inc.
25. Moreira, D.M. (2000). Modelo Euleriano semi-analítico de difusão turbulenta de contaminantes. Tese de Doutorado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil, 88 pp.
26. Berkowicz, R.R., Olesen, H.R., & Torp, U. (1986). The Danish Gaussian air pollution model (OML): Description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. *Air Pollution modeling and its application*, Edited by C. De Wispelare, F.A. Schiermeier and N.V. Gillani. Plenum Publishing Corporation, 453-480.
27. Paulsen, C.A. (1975). The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer. *J. Appl. Meteor.*, 9, 857-861.
28. Hanna, S.R. (1989). Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmos. Environ.*, 23, 1385-1395.

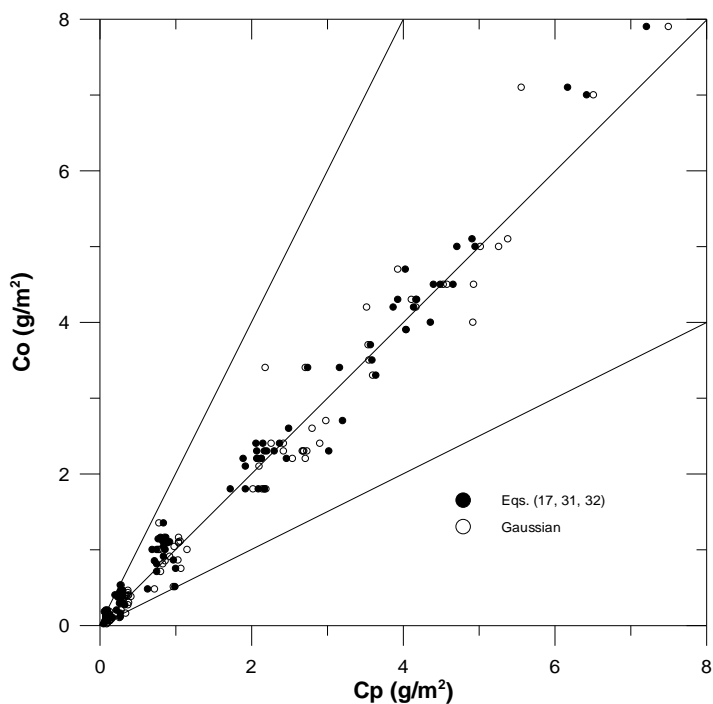


Figura 1 – Diagrama de espalhamento das concentrações observadas e previstas usando a aproximação (31) e (32) com o coeficiente de difusão vertical dado pela Eq. (17) e os resultados de um modelo Gaussiano usando a Eq. (16).

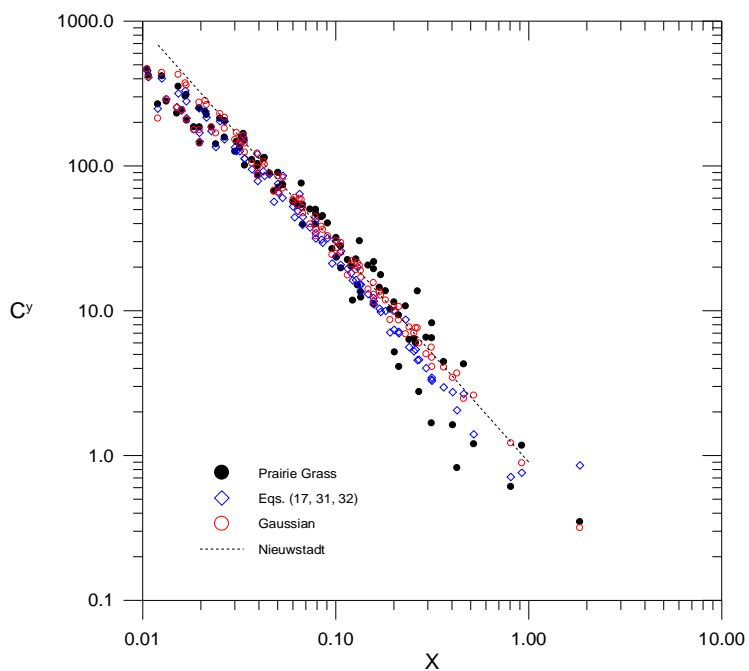


Figura 2 - Comparação entre valores de concentração integrada lateralmente adimensional observada e prevista C^y como uma função da distância adimensional X . Os resultados fornecidos pelo presente modelo (Eqs. 17, 31 e 32) e o modelo Gaussiano com a Eq. (16) são comparados com os valores de concentração observados durante o experimento de Prairie Grass e, também, com os resultados de Nieuwstadt (1980).

Tabela 1. Índices estatísticos para avaliar a performance do modelo.

Modelo	NMSE	FA2	COR	FB	FS
Eqs. (31, 32, 17)	0.02	0.96	0.99	0.05	0.04
Gaussiano com Eq. (16)	0.05	0.92	0.98	-0.05	0.00

