



# Simulação tridimensional da dispersão de poluentes considerando o termo de assimetria e diferentes coeficientes de difusão

Three-dimensional simulation of pollutant dispersion considering the asymmetry term and different eddy diffusivities

V. C. Silveira<sup>1\*</sup>; D. Buske<sup>1</sup>; R. S. Quadros<sup>1</sup>; J. C. Carvalho<sup>1</sup>; G. A. Gonçalves<sup>1</sup>; G. J. Weymar<sup>1</sup>

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

\*viliamcardoso2@gmail.com

(Recebido em 01 de abril de 2023; aceito em 16 de agosto de 2023)

O objetivo desse trabalho é avaliar a dispersão de poluentes na atmosfera, considerando a equação de advecção-difusão transiente tridimensional. O modelo, incluindo a difusão longitudinal e o fechamento não local da turbulência, é resolvido utilizando técnicas de transformadas integrais. Para a obtenção dos resultados e avaliação do modelo foram utilizados dados do experimento difusivo IIT Delhi para condições de vento fraco e duas parametrizações distintas para os coeficientes de difusão. O modelo simulou de forma satisfatória a concentração de poluentes quando comparado com os dados experimentais. O modelo apresentou melhor desempenho com os coeficientes de difusão que possuem maior informação da turbulência e considerado o termo de fechamento não local da turbulência.

Palavras-chave: dispersão de poluentes, fechamento não local, equação de advecção-difusão.

The aim of this work is to evaluate the pollutants dispersion in the atmosphere, considering the three-dimensional transient advection-diffusion equation. The model, including longitudinal diffusion and non-local turbulence closure, is solved using integral transform techniques. To obtain the results and evaluate the model, were used data from the IIT Delhi diffusion experiment to low wind conditions and two different parameterizations to the eddy diffusivities. The model simulated in a good way the pollutants concentration when compared with the experimental data. The model presented better performance with the eddy diffusivities that have more turbulence information and considering the turbulence non-local closure term.

Keywords: pollutant dispersion, non-local closure, advection-diffusion equation.

## 1. INTRODUÇÃO

A poluição atmosférica é um fenômeno recorrente no nosso dia a dia, seja ela ocasionada por efeitos naturais (por exemplo, emissão de gás metano) ou antropogênicos (por exemplo, pela queima de combustíveis fósseis). Os poluentes emitidos em um determinado local podem causar diversos problemas ao meio ambiente e atingir regiões distantes de onde foram emitidos, por isso a importância de estudar o comportamento dos poluentes nas mais diversas situações que podem ocorrer na atmosfera. A atividade antropogênica traz inúmeros problemas com a emissão de gases, gerando um desequilíbrio ecológico. Os gases e poeiras esquecidos na atmosfera provocam problemas nas proximidades das fontes, reduzindo a qualidade do ar em regiões urbanas, causam chuva ácida a médias e longas distâncias e buracos na camada de ozônio em escala global.

Os movimentos atmosféricos são classificados de acordo com suas dimensões horizontais em três amplas categorias: macroescala (escala horizontal da ordem de 1000 km), mesoescala (escala horizontal da ordem de 100 km) e microescala (escala horizontal da ordem de 10 km ou menos) [1].

Existem dois modelos matemáticos para simular numericamente a concentração de poluentes na atmosfera: Lagrangiano e Euleriano. O modelo Lagrangiano segue a velocidade instantânea do fluido, e o Euleriano é fixo em relação a Terra [2]. O esquema principal dos modelos Eulerianos de dispersão é a solução da equação de advecção-difusão, que é expressa através da

parametrização dos fluxos turbulentos. Sob condições específicas consegue-se expressões para o campo de concentração que sejam funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão de pluma.

Encontram-se vários trabalhos disponíveis na literatura que focam no estudo da dinâmica da camada limite planetária (CLP), em que são considerados diversos modelos para fechamento das equações dos fluxos turbulentos, por exemplo: modelos de primeira ordem ou teoria K, segunda ordem ou superior.

A hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) é uma das maneiras mais utilizadas para resolver o problema de fechamento da equação advecção-difusão que assume que o fluxo turbulento da concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média. Entretanto, a hipótese de transporte por gradiente não é válida na parte superior da camada limite convectiva (CLC), pois nessa região se tem a presença de um fluxo contragradiente [3]. Observou-se que na parte superior da CLC o fluxo de temperatura potencial é ao contrário do gradiente de perfil de temperatura potencial do meio [4]. O gradiente de temperatura potencial do meio e o fluxo trocam de sinal em diferentes níveis, que afeta o fechamento da turbulência de primeira ordem, pois não leva em conta o caráter não homogêneo da turbulência da CLC.

Considerando o fechamento não local da turbulência, pode ser levada em conta a assimetria no processo da dispersão de poluentes na atmosfera. Com isso, pode ser utilizada uma equação genérica para a difusão turbulenta considerando-se que o fluxo mais a sua derivada são proporcionais ao gradiente médio fazendo com que apareça um termo adicional na equação que é associado ao termo de contragradiente [5, 6].

Diversos estudos já foram desenvolvidos para estudar a dispersão de poluentes na atmosfera considerando a equação da advecção-difusão em diversas condições de estabilidade atmosférica e utilizando a técnica GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) [7, 8]. A inovação desse trabalho é considerar a equação da difusão na sua forma mais completa, considerando um modelo tridimensional e o termo de fechamento não local da turbulência.

## 2. MATERIAL E MÉTODOS

A advecção e difusão atmosférica podem ser modeladas aplicando-se a equação de conservação de massa [9], ou seja:

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

onde  $\bar{c}$  ( $\bar{c} = \bar{c}(x, y, z, t)$ ) denota a concentração média de um contaminante passivo,  $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$  e  $\bar{w}$  são as componentes cartesianas do vento médio (m/s) e  $\overline{u'c'}$ ,  $\overline{v'c'}$  e  $\overline{w'c'}$  representam respectivamente o fluxo turbulento do contaminante ( $g/sm^2$ ) nas direções longitudinal, lateral e vertical.

A equação (1) apresenta quatro incógnitas (os fluxos turbulentos e a concentração) e por isso não pode ser resolvida diretamente levando-nos ao chamado problema de fechamento da turbulência [10]. Uma das maneiras mais utilizada para solucionar o problema de fechamento da equação de difusão (1) é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K ou fechamento de primeira ordem) que assume que o fluxo turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média [9]. Com base nisso, obtém-se a seguinte equação de advecção-difusão [11]:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \quad (2)$$

A hipótese de transporte por gradiente é inconsistente com as características da difusão turbulenta na parte superior da camada de mistura, em casos convectivos em que ocorrem fluxos de material contragradiente [3]. Para descrever e caracterizar a difusão nesta região, Deardoff

(1966) [4] e Deardoff (1972) [12] propuseram modificar a aplicação usual do fluxo-gradiente na aproximação da teoria K da seguinte forma:

$$\overline{w'c'} = -K_z \left( \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \gamma \right) \quad (3)$$

na qual  $\gamma$  representa o termo de contragradiente e é uma constante.

Muitos esquemas e parametrizações para o termo de contragradiente têm sido desenvolvidos, sendo que neste trabalho utilizamos as parametrizações propostas por Van Dop e Verver [6] que são baseadas no trabalho de Wyngaard e Weil [5]. O problema de fechamento da turbulência na equação de difusão foi modificado considerando-se uma equação genérica para a difusão turbulenta de forma que o fluxo vertical turbulento de concentração mais a sua derivada é proporcional ao gradiente médio.

$$\frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} = -\frac{1}{\beta} \left[ K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \tau \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial t} + \overline{w'c'} \right] \quad (4)$$

Utilizando o teorema de Cauchy-Euler podemos escrever a equação de advecção-difusão tridimensional, dependente do tempo, que considera o fechamento não local da turbulência:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \\ &- \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \beta \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \\ &- \tau \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial t} \left( \tau \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) \right) \end{aligned} \quad (5)$$

sendo que  $K_x$ ,  $K_y$  e  $K_z$  representam os coeficientes de difusão nas direções longitudinal, lateral e vertical, respectivamente. Como o domínio é finito, a equação (5) está sujeita as seguintes condições de contorno:

$$K_x \frac{\partial \bar{c}(L_x, y, z, t)}{\partial x} = K_y \frac{\partial \bar{c}(x, 0, z, t)}{\partial y} = K_y \frac{\partial \bar{c}(x, L_y, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (5a)$$

$$K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, 0, t)}{\partial z} = K_z \frac{\partial \bar{c}(x, y, h, t)}{\partial z} = 0 \quad (5b)$$

e à condição de fonte

$$\bar{u} \bar{c}(0, y, z, t) = Q \delta(y - y_0) \delta(z - H_s) \quad (5c)$$

sendo  $Q$  a intensidade da fonte ( $g/s$ ),  $h$  a altura da camada limite planetária ( $m$ ),  $H_s$  a altura da fonte ( $m$ ),  $L_x$  e  $L_y$  os limites para longe da fonte no eixo  $x$  e  $y$ , respectivamente em ( $m$ ) e  $\delta$  é a função delta de Dirac.

As componentes médias  $\bar{u}$  e  $\bar{v}$  do vento são dadas, respectivamente, por  $\bar{u} = V \sin(\theta)$  e  $\bar{v} = V \cos(\theta)$ , em que  $V$  é a velocidade do vento e  $\theta$  é a direção do vento.

Aplicando a técnica da transformada de Laplace na equação (5), na variável  $t$ , obtemos o seguinte problema estacionário:

$$\begin{aligned}
& \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \\
&= K_x \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + K_x' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + K_y \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} - \beta r \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - (\beta r)' \bar{C} - \beta \bar{u} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z \partial x} - (\beta \bar{u})' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \\
&- \beta \bar{v} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z \partial y} - (\beta \bar{v})' \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - \beta \bar{w} \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} - (\beta \bar{w})' \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \beta K_x \frac{\partial^3 \bar{C}}{\partial z \partial x^2} + (\beta K_x)' \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} \\
&+ \beta K_x' \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z \partial x} + (\beta K_x')' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \beta K_y \frac{\partial^3 \bar{C}}{\partial z \partial y^2} + (\beta K_y)' \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + K_z' \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \\
&- \tau r^2 \bar{C} - \tau \bar{u} r \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - \tau \bar{v} r \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - \tau \bar{w} r \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \tau r K_x \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \tau r K_x' \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \\
&+ \tau r K_y \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} - r \bar{C}. \tag{6}
\end{aligned}$$

Aplicando a técnica da transformada integral na variável  $y$ , expande-se a concentração de poluentes como Buske et al. (2012)[13]:

$$\bar{C}(x, y, z, r) = \sum_{n=0}^N \frac{\bar{c}_n(x, z, r) \zeta_n(y)}{N_n^{\frac{1}{2}}}, \tag{7}$$

sendo  $N_n$  dado por  $N_n = \int_0^{L_y} \zeta_n^2(y) dy$ , considerando  $\bar{c}_n = \bar{c}_n(x, z, r)$ , substituindo a equação (7) na equação (6) e tomando momentos, ou seja, aplicando o operador integral  $\frac{1}{N_n^{\frac{1}{2}}} \int_0^{L_y} (\cdot) \zeta_n(y) dy$ , pode-se escrever a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
& \alpha_{n,m} \bar{u} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} + \gamma_{n,m} \bar{v} \bar{c}_n + \alpha_{n,m} \bar{w} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} \\
&= \alpha_{n,m} K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} + \alpha_{n,m} K_x' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \alpha_{n,m} \lambda_n^2 K_y \bar{c}_n - \alpha_{n,m} \beta r \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \alpha_{n,m} (\beta r)' \bar{c}_n \\
&- \alpha_{n,m} \beta \bar{u} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} - \alpha_{n,m} (\beta \bar{u})' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \gamma_{n,m} \beta \bar{v} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \gamma_{n,m} (\beta \bar{v})' \bar{c}_n \\
&- \alpha_{n,m} \beta \bar{w} \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} - \alpha_{n,m} (\beta \bar{w})' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} + \alpha_{n,m} \beta K_x \frac{\partial^3 \bar{c}_n}{\partial z \partial x^2} + \alpha_{n,m} (\beta K_x)' \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} \\
&+ \alpha_{n,m} \beta K_x' \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z \partial x} + \alpha_{n,m} (\beta K_x')' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \alpha_{n,m} \lambda_n^2 \beta K_y \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \alpha_{n,m} \lambda_n^2 (\beta K_y)' \bar{c}_n \\
&+ \alpha_{n,m} K_z \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial z^2} + \alpha_{n,m} K_z' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \alpha_{n,m} \tau r^2 \bar{c}_n - \alpha_{n,m} \tau \bar{u} r \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \gamma_{n,m} \tau \bar{v} r \bar{c}_n \\
&- \alpha_{n,m} \tau \bar{w} r \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} + \alpha_{n,m} \tau r K_x \frac{\partial^2 \bar{c}_n}{\partial x^2} + \alpha_{n,m} \tau r K_x' \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} - \alpha_{n,m} \lambda_n^2 \tau r K_y \bar{c}_n \\
&- \alpha_{n,m} r \bar{c}_n \tag{8}
\end{aligned}$$

Para resolver o problema dado pela equação (8) a metodologia utilizada em Buske et al. (2012) [13] é empregada.

## 2.1 Parametrizações da turbulência

Neste trabalho iremos utilizar duas parametrizações da turbulência para condições atmosféricas instáveis, conforme descrito abaixo.

**Parametrização 1:** Degrazia et al. (2001) [14] e Degrazia et al. (2002) [15] propuseram as seguintes formulações para os coeficientes de difusão, levando em conta o efeito de memória da pluma de poluentes:

$$K_{\alpha} = \frac{0,583w_*hc_i\psi^{2/3}(z/h)^{4/3}X^* \left[ 0,55(z/h)^{2/3} + 1,03c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_i^{2/3}X^* \right]}{\left[ 0,55(z/h)^{2/3}(f_m^*)_i^{1/3} + 2,06c_i^{1/2}\psi^{1/3}(f_m^*)_iX^* \right]^2} \quad (9)$$

em que  $\alpha$  refere-se as direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ ,  $w_*$  é a escala de velocidade convectiva,  $c_i$  é uma constante ( $c_u = 0,3$ ;  $c_{v,w} = 0,36$ ),  $\psi$  é a função de dissipação dada por Hojstrup (1982) [16]:

$$\psi^{1/3} = \left[ \left(1 - \frac{z}{h}\right)^2 \left(\frac{z}{-L}\right)^{-2/3} + 0,75 \right]^{1/2} \quad (10)$$

sendo  $z$  a altura acima da superfície do solo,  $L$  o comprimento de Monin-Obukhov,  $X^*$  a distância adimensional dada pela seguinte equação:

$$X^* = \frac{xw_*}{\bar{u}h} \quad (11)$$

A frequência normalizada do pico espectral  $[(f_m^*)_i]$  é dada por [17]:

$$(f_m^*)_i = \frac{z}{(\lambda_m)_i} \quad (12)$$

onde  $(\lambda_m)_i$  é o pico do comprimento de onda do espectro de velocidade turbulenta, com  $(\lambda_m)_u = (\lambda_m)_v = 1,5h$  e

$$(\lambda_m)_w = 1,8h \left[ 1 - \exp\left(-\frac{4z}{h}\right) - 0,0003 \exp\left(\frac{8z}{h}\right) \right] \quad (13)$$

A componente longitudinal é dada por  $(f_m^*)_u = 0,67$  [18]. A função dissipação usada aqui é o valor médio  $\psi = 0,4$  [19].

**Parametrização 2:** Sharan et al. (1996) [20], Sharan et al. (1996) [21] e Sharan et al. (2002) [22] propuseram as seguintes formulações para os coeficientes de difusão:

$$K_x = K_y = 0,31 \left(\frac{w^*}{V}\right)^2 Vx \quad e \quad K_z = 0,16 \left(\frac{w^*}{V}\right)^2 Vx \quad (14)$$

sendo  $w^*$  a velocidade convectiva,  $V$  a velocidade do vento e  $x$  a distância da fonte na direção  $x$ .

## 2.2 Perfil do vento

O perfil da velocidade do vento será descrito por uma lei de potência [23]:

$$\frac{\bar{V}}{\bar{V}_1} = \left(\frac{z}{z_1}\right)^{\alpha} \quad (15)$$

no qual  $\bar{V}$  e  $\bar{V}_1$  são as velocidades médias horizontais do vento nas alturas  $z$  e  $z_1$  e  $\alpha$  é uma constante, cujo valor é  $\alpha = 0,1$  em condições instáveis.

### 2.3 Dados experimentais

Para validar o modelo sob condições atmosféricas instáveis, foram utilizados dados de vento fraco reportados no experimento IIT Delhi (Índia) [20-22].

Foram obtidas concentrações ao nível do solo do poluente hexafluoreto de enxofre ( $SF_6$ ). O poluente foi liberado sem empuxo de uma altura de 1 m, sendo que as concentrações foram observadas próximo do solo (0,5 m). O período de amostragem do  $SF_6$  é de 30 min a uma taxa de 30 a 50 ml/min. As variáveis meteorológicas, vento e temperatura, foram obtidas em 4 alturas (2, 4, 15 e 30 m) de uma torre micrometeorológica de 30 m. Os amostradores foram colocados em arcos de 50 e 100 m de raio. No total foram realizados 8 experimentos, sendo que foram medidos os seguintes parâmetros micrometeorológicos: velocidade do vento ( $V$ ), direção do vento ( $\theta$ ), velocidade convectiva ( $w_*$ ), velocidade de fricção ( $u_*$ ), comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ) e altura da camada limite atmosférica ( $h$ ). A Tabela 1 mostra os dados meteorológicos do experimento IIT Delhi [20, 21, 22].

Tabela 1: Parâmetros meteorológicos observados no experimento IIT Delhi.

Teste	$V(ms^{-1})$	$\theta(^{\circ})$	$w_*(ms^{-1})$	$u_*(ms^{-1})$	$L(m)$	$h(m)$
1	1,36	343	2,37	0,34	-32,78	1570
2	0,74	291	2,26	0,21	-8,70	1240
6	1,40	286	2,04	0,34	-33,25	1070
7	1,54	284	2,28	0,37	-33,54	1240
8	0,89	301	1,09	0,25	-56,63	943
11	1,07	320	1,83	0,25	-19,53	1070
12	1,55	334	2,32	0,35	-25,64	1325
13	1,08	331	1,72	0,21	-8,11	1070

### 2.1 Índices estatísticos

Os índices estatísticos são usados para avaliar o desempenho do modelo em representar os dados observados. Avalia-se, respectivamente, os índices estatísticos, desvio quadrático médio normalizado (NMSE), coeficiente de correlação (COR), fator de dois (FAT2), fração de inclinação (FB) e desvio fracional padrão (FS) [24].

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foi investigado o problema da dispersão de poluentes considerando o termo de contragradiente ( $S_k = 0,6$ ). Para tanto, foram utilizados os dados micrometeorológicos do experimento IIT Delhi e as parametrizações da turbulência propostas por Degrazia [14, 15] e Sharan [20-22].

A Tabela 2 mostra a avaliação estatística e as Figuras 1 e 2 mostram os diagramas de espalhamento das concentrações observadas e previstas.

Tabela 2: Desempenho estatístico do modelo para o experimento IIT Delhi, não considerando ( $S_k = 0$ ) e considerando ( $S_k = 0,6$ ) o termo da assimetria.

Simulação	NMSE	COR	FAT2	FB	FS
3D-GILTT com $S_k = 0,0$ - Equação 9 [14, 15]	0,28	0,88	0,88	-0,17	-0,44
3D-GILTT com $S_k = 0,6$ - Equação 9 [14, 15]	0,18	0,84	0,94	0,18	0,18
3D-GILTT com $S_k = 0,0$ - Equação 14 [20, 21, 22]	0,41	0,69	0,75	0,00	-0,29
3D-GILTT com $S_k = 0,6$ - Equação 14 [20, 21, 22]	0,36	0,65	0,63	0,21	0,25
GILTTG com $S_k = 0,0$ - Buske et al. (2012) [13]	0,32	0,70	0,81	0,06	-0,13
GILTTG com $S_k = 0,6$ - Buske et al. (2012) [13]	0,28	0,69	0,75	-0,08	-0,09

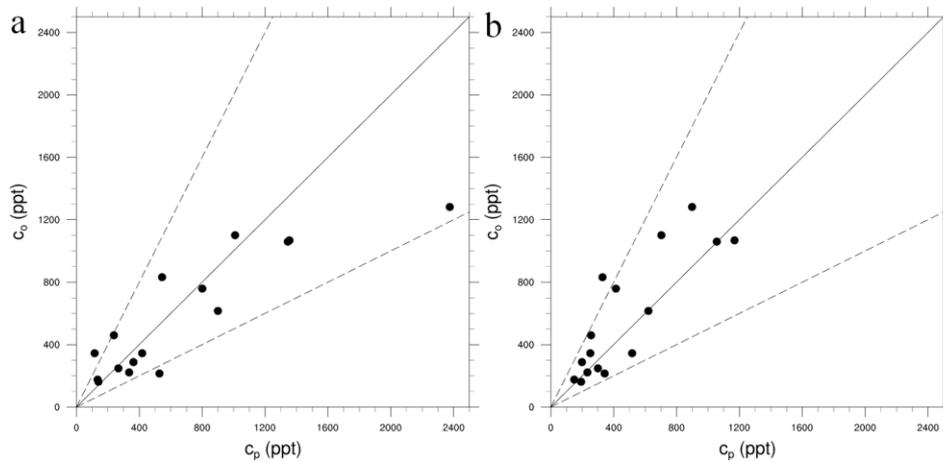


Figura 1: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento IIT Delhi e coeficientes de difusão propostos por Degrazia: (a)  $S_k = 0$ , (b)  $S_k = 0,6$ .

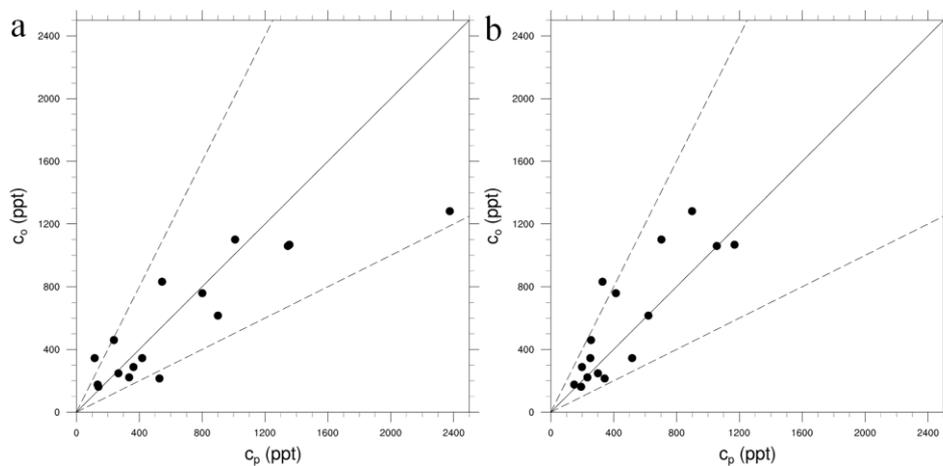


Figura 2: Diagrama de espalhamento das concentrações observadas ( $c_o$ ) e previstas ( $c_p$ ) pelo método 3D-GILTT para o experimento IIT Delhi e coeficientes de difusão propostos por Sharan: (a)  $S_k = 0$ , (b)  $S_k = 0,6$ .

Quando o termo de assimetria é considerado no modelo, melhores resultados foram obtidos quando comparados com os dados experimentais, ou seja, o erro nas simulações é menor. Os melhores resultados foram obtidos considerando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia, ou seja, esses coeficientes levam em conta mais informações a respeito da turbulência, sendo os coeficientes propostos por Sharan uma forma mais simplificada.

Quando comparamos os resultados do presente modelo, com o modelo GILTTG [13], considerando os coeficientes de difusão propostos por Degrazia, em geral há uma melhora nos resultados. Encontramos piores resultados quando comparamos os resultados do presente modelo com o modelo GILTTG, consideramos coeficientes de difusão propostos por Sharan.

#### 4. CONCLUSÃO

A concentração de poluentes é simulada de forma satisfatória considerando o fechamento não local da turbulência, independente da parametrização utilizada para os coeficientes de difusão.

A solução apresentada é a mais completa já obtida pelo método GILTT. Na solução são incorporados o termo de contragradiente e a difusão longitudinal, além de ser um modelo

dependente do tempo. Os resultados foram obtidos considerando  $S_k = 0,6$ . Como trabalhos futuros, pretende-se testar outros valores para o termo de assimetria.

## 5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a CAPES pelo apoio financeiro para realização desse trabalho.

## 6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Arya SP. Air pollution meteorology and dispersion. 1. ed. New York (US): Oxford University Press; 1999.
2. Anfossi D. Dispersão lagrangeana na camada limite planetária. 1. ed. Porto Alegre (RS): UFRGS; 2005.
3. Deardoff JW, Willis GE. A parameterization of diffusion into the mixed layer. *J Appl Met.* 1975 Dec;14(8):1451-8. doi: 10.1175/1520-0450(1975)014<1451:APODIT>2.0.CO;2
4. Deardoff, JW. The counter-gradient heat flux in the lower atmosphere and in the laboratory. *J Atmos Sci.* 1966 Sep;23(5):503-6. doi: 10.1175/1520-0469(1966)023<0503:TCGHFI>2.0.CO;2
5. Wyngaard JC, Weil JC. Transport asymmetry in skewed turbulence. *Phys Flu. A: Flu Dyn.* 1991 Jun;3(1):155-62. doi: 10.1063/1.857874
6. Van Dop H, Verver G. Countergradient transport revisited. *J Atmos Sci.* 2001 Aug;58(15):2240-7. doi: 10.1175/1520-0469(2001)058<2240:CTR>2.0.CO;2
7. Buske D, Vilhena MT, Tirabassi T, Bodmann B. Air pollution steady-state advection-diffusion equation: the general three-dimensional solution. *J Env Prot.* 2012 Sep;3(9A):1124-34. doi: 10.4236/jep.2012.329131
8. Vilhena MT, Buske D, Degrazia GA, Quadros RS. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. *Physica A: Stat Mech Appl.* 2012 Apr;391(8):2576-84. doi: 10.1016/j.physa.2011.11.001
9. Seinfeld JH, Pandis SN. Atmospheric chemistry and physics of air pollution. 1. ed. New York (US): John Wiley & Sons; 1997.
10. Stull RB. An introduction to Boundary Layer Meteorology. 1. ed. Dordrecht (NL): Kluwer Academic Publishers; 1988.
11. Blackadar AK. Turbulence and diffusion in the atmosphere: Lectures in environmental sciences. 2. ed. Heidelberg (DE): Springer-Verlag; 1997.
12. Deardoff JW. Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. *J Atmos Sci.* 1972 Jan;29(1):91-115. doi: 10.1175/1520-0469(1972)029<0091:NIONAU>2.0.CO;2
13. Buske D, Vilhena MT, Tirabassi T, Quadros RS, Bodmann B. A closed form solution for pollutant dispersion in atmosphere considering nonlocal closure of the turbulent diffusion. *WIT Trans Ecol Envir.* 2012 Dec;157(1):59-69. doi: 10.2495/AIR120061
14. Degrazia GA, Moreira DM, Vilhena MT. Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. *J Appl Met.* 2001 Jul;40(7):1233-40. doi: 10.1175/1520-0450(2001)040<1233:DOAEDD>2.0.CO;2
15. Degrazia GA, Moreira DM, Campos CRJ, Carvalho JC, Vilhena MT. Comparison between an integral and algebraic formulation for the eddy diffusivity using the Copenhagen experimental dataset. *Il Nuov Cim.* 2002 Mar;25C(2):207-18.
16. Hojstrup J. Velocity spectra in the unstable planetary boundary layer. *J Atmos Sci.* 1982 Oct;39(10):2239-48. doi: 10.1175/1520-0469(1982)039<2239:VSITUP>2.0.CO;2
17. Degrazia G, Anfossi D, Carvalho J, Mangia C, Tirabassi T, Velho HC. Turbulence parameterisation for PBL dispersion models in all stability conditions. *Atmos Envir.* 2000 Jun;34(21):3575-83. doi: 10.1016/S1352-2310(00)00116-3
18. Olesen HR, Larsen SE, Hojstrup J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. *Bound.-Lay Met.* 1984 Jul;29(1):285-312. doi: 10.1007/BF00119794
19. Caughey SJ. Observed characteristics of the atmospheric boundary layer. *Atmos Turb Air Pol Mod.* 1982 Sep;1(1):107-58. doi: 10.1007/978-94-010-9112-1\_4
20. Sharan M, Singh MP, Yadav AK. Mathematical model for atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. *Atmos Envir.* 1996 Apr;30(7):1137-45. doi: 10.1016/1352-2310(95)00368-1

21. Sharan M, Singh MP, Yadav AK, Agarwal P, Nigam S. A mathematical model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions. *Atmos Environ.* 1996 Apr;30(8):1209-1220. doi: 10.1016/1352-2310(95)00442-4
22. Sharan M, Yadav AK, Modani M. Simulation of short-range diffusion experiment in low-wind convective conditions. *Atmos Environ.* 2002 Apr;36(11):1901-1906. doi: 10.1016/S1352-2310(02)00162-0
23. Panofsky HA, Dutton JA. *Atmospheric Turbulence*. 1. ed. New York (NY): John Wiley & Sons; 1984.
24. Hanna SR. Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods. *Atmos Environ.* 1989 May;23(6):1385-1398. doi: 10.1016/0004-6981(89)90161-3