

# Simulação numérica do transporte de um poluente inerte e passivo na CLP convectiva através de um modelo LES

*Edson P. Marques Filho, Amauri P. de Oliveira,  
Hugo A. Karam e Umberto Rizza*

## RESUMO

Neste trabalho é descrita a evolução temporal da estrutura tridimensional de um poluente inerte e passivo, emitido continuamente por uma fonte do tipo área na superfície. Estas, e outras propriedades dinâmicas e termodinâmicas da Camada Limite Planetária (CLP), são simuladas numericamente através do modelo LES (Large-Eddy Simulation Model) desenvolvido por Moeng. Os perfis verticais médios de concentração do poluente e dos respectivos fluxos verticais turbulentos são consistentes com os de uma Camada de Mistura, com gradientes verticais aproximadamente nulos e fluxos verticais turbulentos variando linearmente com a altura. Por outro lado, a distribuição vertical da variância de concentração do poluente não segue a Teoria da Similaridade da Camada de Mistura. O campo de velocidade vertical instantâneo apresentou uma distribuição espacial assimétrica, com o coeficiente de assimetria variando entre 0,4 junto à superfície a 1,62 junto ao topo. Este resultado confirma a ocorrência de movimentos verticais positivos mais intensos e localizados (“updrafts”) do que os movimentos verticais negativos (“downdrafts”). A distribuição espacial do poluente é determinada pela distribuição dos turbilhões de grande escala, principalmente próximo ao topo da CLP.

**Palavras chave:** LES, CLP convectiva, dispersão de poluentes inertes, modelos numéricos de CLP.

## ABSTRACT

This work describes the time evolution of three dimensional structure of an inert and passive atmospheric pollutant, continuously emitted by an area source located at surface. These and other dynamic and thermodynamic properties of PBL are simulated numerically by the large eddy simulation model (LES) proposed by Moeng. The vertical structure of mean pollutant concentration and the associated vertical turbulent fluxes are consistent with a Mixed Layer, with approximately zero vertical gradients and vertical fluxes varying linearly with height. The vertical distribution of pollutant concentration variance does not follow the Mixed Layer Similarity Theory. The instantaneous vertical wind field shows an asymmetric spatial distribution, with skewness varying from 0.4, near the surface, to 1.62 at the PBL top. This result indicates that the updrafts are more intense and localized than the downdrafts. The spatial distribution of pollutant is consistent with the wind field pattern associated with the large eddies, mainly near to the top.

**Key words:** LES, Convective PBL, dispersion of inert pollutants. PBL numerical models

## 1. INTRODUÇÃO

As primeiras aplicações deste tipo de modelo no estudo da dispersão de poluentes na CLP, foram realizadas por Deardorff (1972) e possibilitaram estabelecer escalas características de velocidade ( $w_*$ ) e de comprimento ( $z_*$ ) mais adequadas para descrever a estrutura vertical da CLP em condições convectivas. As simulações realizadas por Deardorff produziram um conjunto de dados que foram extensivamente utilizados nas estimativas dos parâmetros de dispersão de poluentes, especialmente no trabalho realizado por Lamb (1984). van Haren e Nieuwstadt (1989) simularam as características da dispersão de uma fonte linha na CLP convectiva, e seus resultados foram similares aos obtidos por Willis e Deardorff (1978) em experimentos de tanque. Cai (2000) estudou os efeitos de uma superfície heterogênea sobre a dispersão de plumas passivas emitidas em fontes elevadas na CLP convectiva urbana, e seus resultados mostraram que a dispersão é fortemente afetada pelo padrão desigual do fluxo de calor sensível na

superfície. Estes e outros trabalhos mostram que os modelos do tipo LES são ferramentas poderosas para investigar os padrões de dispersão de poluentes na CLP.

Neste estudo, será apresentada uma simulação numérica da evolução temporal da estrutura espacial de um poluente atmosférico utilizando o modelo LES proposto por Moeng. Nesta simulação o poluente atmosférico é considerado inerte, passivo e continuamente emitido por uma fonte do tipo área localizada na superfície. Apesar de hipotéticos, os resultados obtidos neste caso podem ser utilizados para ilustrar o comportamento de poluentes atmosféricos, tais como o monóxido de carbono, em uma região urbana localizada em uma área altamente ocupada por tráfego de veículos automotores como o caso de várias regiões na Cidade de São Paulo, ou mesmo outras metrópoles brasileiras.

Como será visto, os resultados obtidos com o modelo LES mostram detalhes do perfil vertical da concentração de poluente que não são produzidos por modelos convencionais de CLP (modelos de fechamento de 1ª ou 2ª ordem). Podendo até ser utilizado para suprir as lacunas observacionais dos poluentes atmosféricos em regiões urbanas.

As condições iniciais e de contorno utilizadas nesta simulação foram escolhidas de forma a produzir uma CLP onde predomine o regime de convecção livre. Esta condição foi escolhida de forma a caracterizar a evolução da CLP convectiva em dias de vento fraco. Esta condição é observada com bastante regularidade na região da Cidade de São Paulo, principalmente durante períodos de inverno, quando a ausência de vento dificulta a dispersão dos poluentes.

## **2. MODELO LES**

O modelo LES proposto por Moeng (1984) é composto de um conjunto de cinco equações prognósticas e uma equação diagnóstica. As prognósticas determinam a evolução temporal e espacial das componentes da velocidade do vento ( $\bar{u}$ ,  $\bar{v}$ ,  $\bar{w}$ ) e da temperatura potencial ( $\bar{\theta}$ ) na escala resolvida, e da energia cinética

turbulenta na escala de subgrade  $\left( e^* = 0,5 \delta_{ij} \overline{(u_i - \bar{u}_i)(u_j - \bar{u}_j)} \right)$ . A equação diagnóstica determina o campo espacial das flutuações de pressão na escala resolvida. Estas equações são obtidas aplicando-se um filtro, do tipo passa-baixa, às equações de conservação de momento, massa e energia, resultantes da aproximação de Boussinesq (Marques Filho et al., 2002).

Similarmente, quando o procedimento de filtragem é aplicado a equação de conservação de um constituinte atmosférico inerte e passivo, obtém-se uma equação prognóstica para a evolução temporal e espacial do poluente na escala resolvida:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} - \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} - \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{cu}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{cv}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{cw}}{\partial z} \quad (1)$$

onde  $\bar{\quad}$  representa a escala resolvida e  $\tau_{c_j}$  os fluxos turbulentos do poluente na escala de subgrade  $\left( \tau_{c_j} = \overline{(c - \bar{c})\bar{u}_j} + \overline{c(u_j - \bar{u}_j)} + \overline{(c - \bar{c})(u_j - \bar{u}_j)} \right)$ .

O modelo utilizado para representar os processos da escala de subgrade, supõem que  $\tau_{c_j}$  esta relacionado ao campo da escala resolvida, através de um coeficiente de difusividade turbulenta:

$$\tau_{c_j} = -K_H \left( \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) \quad (2)$$

onde  $K_H$  é o coeficiente de difusividade turbulenta de calor, obtido da seguinte forma:

$$K_H = \left[ 1 + \frac{2\delta}{\Delta s} \right] c_M \delta \sqrt{e^*} \quad (3)$$

onde  $c_M$  é constante e igual a 0,10. Em condições convectivas este limite é determinado pelo tamanho da grade do modelo, tal que  $\delta = \Delta s = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$ .

No modelo LES utilizado neste estudo, as equações do movimento na escala resolvida são resolvidas numericamente através de um método pseudo-espectral nas direções horizontais e de um esquema de diferenças finitas de segunda-ordem, centrado no espaço, na direção vertical. O avanço dos campos no tempo é

realizado com a aplicação do esquema numérico Adams-Bashforth (Moeng, 1984). O passo de tempo, durante a simulação variou entre 1,2 e 2,7 segundos, e foi determinado em função do número de Courant e da velocidade máxima.

Na simulação realizada, com a utilização de um Cray J90, foram considerados somente os campos tridimensionais gerados após os 1000 primeiros passos de integração (aproximadamente 0,8 h.), num total de seis realizações de 200 passos no tempo. Estes campos correspondem a uma condição de equilíbrio na CLP com  $z_i/L$  da ordem de  $-880$ , onde  $z_i$  é a altura da CLP e  $L$  o comprimento de Monin-Obukhov. Para simular 2000 passos no tempo (aproximadamente 1,5 h.), com uma grade de  $80 \times 80 \times 80$  pontos nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente, cobrindo um domínio numérico de  $5 \text{ km} \times 5 \text{ km} \times 2 \text{ km}$ , o Cray J90 levou cerca de 40 horas de CPU.

As condições de fronteiras laterais são assumidas periódicas. Na fronteira inferior, rígida, a velocidade vertical é nula e as formulações das similaridades de Monin-Obukhov e da Convecção Livre são empregadas para estimar os fluxos turbulentos na escala de subgrade. No topo da grade, assume-se condição de fronteira radiativa onde a velocidade vertical é nula, não há turbulência na escala de subgrade e os gradientes verticais das componentes horizontais de velocidade do vento, da temperatura potencial e do poluente são constantes.

As condições iniciais médias correspondem a uma Camada de Mistura com extensão vertical igual a 1000 m. e uma camada com características de atmosfera livre entre 1000 e 2000 m. As acelerações horizontais dos gradientes horizontais de pressão foram mantidas constantes e equivalentes ao de um vento geostrófico com módulo igual a  $1 \text{ ms}^{-1}$ . O fluxo vertical de calor sensível na superfície foi mantido constante e igual a  $240 \text{ Wm}^{-2}$ , durante toda simulação.

### 3. RESULTADOS

Os resultados apresentados nas Figuras (1) e (2) correspondem aos valores médios dos planos horizontais de cada realização e aos valores médios do conjunto das seis realizações.

Os momentos estatísticos de segunda e terceira ordem foram calculados a partir das flutuações turbulentas, obtidas subtraindo-se da variável na escala resolvida sua média no plano horizontal, e adimensionalizados pelas escalas características de velocidade ( $w_*$ ) e do poluente ( $c_*$ ). A distância da superfície ( $z$ ) foi normalizada pela altura da CLP ( $z_i$ ), definida como a altura do mínimo no perfil vertical do fluxo de calor sensível. Os símbolos  $\langle \rangle$  e  $\{ \}$  representam as médias no plano horizontal e do conjunto das realizações, respectivamente.

Na Figura (1) é apresentado o perfil vertical adimensional de concentração do poluente atmosférico. De acordo com as condições iniciais, é possível observar que houve uma diminuição da concentração durante o período de integração. O perfil de  $\langle \bar{c} \rangle$  apresenta um pequeno decréscimo com a altura por toda camada de mistura, sendo este decréscimo mais pronunciado junto ao topo da CLP. A ocorrência de tal gradiente próximo a  $z_i$ , é possivelmente gerado por influência dos processos de entranhamento (Wyngaard e Brost, 1984; Moeng e Wyngaard, 1984; Sorbjan, 1999), o que será discutido posteriormente.

O fluxo vertical adimensional do poluente inerte e passivo ( $\langle w'c' \rangle + \langle \tau_{cw} \rangle$ )/ $w_* c_*$  (Fig. 2) tem um perfil vertical linear e positivo por toda camada de mistura, alcançando um valor máximo próximo ao topo da CLP, em  $z \approx 0,8z_i$ , e decaindo para zero acima da camada de inversão. Isso faz com que o fluxo de poluente na CLP convectiva seja divergente ( $\partial \langle \bar{c} \rangle / \partial t < 0$ ).

Apesar dos processos de entranhamento diminuir a concentração junto ao topo (traz ar “limpo” da atmosfera livre acima para dentro da CLP), os processos de mistura da CLP convectiva são mais efetivos e auxiliam na manutenção do gradiente vertical de  $\langle \bar{c} \rangle$  nesta região. O fluxo turbulento de poluente devido ao entranhamento no topo da CLP, está relacionado ao gradiente do poluente no topo ( $\Delta \bar{c}$ ) e a taxa de entranhamento ( $w_e = \partial z_i / \partial t$ ) através da expressão:  $\langle \langle w'c' \rangle + \langle \tau_{cw} \rangle \rangle_i = -\langle \Delta \bar{c} \rangle w_e$ .

Na simulação realizada, a taxa de entranhamento obtida foi de  $\{w_e\} = (0,09 \pm 0,02) \text{ms}^{-1}$  e o gradiente do poluente junto ao topo foi  $\{\langle \Delta \bar{c} \rangle\} = -(6,95 \pm 0,18) \text{ppm}$ , o que resulta em um fluxo turbulento de poluente devido ao entranhamento da ordem de  $\{\langle (w'c') + \langle \tau_{cw} \rangle \rangle_i\} = (0,63 \pm 0,14) \text{ppm ms}^{-1}$ . O valor de  $\{\langle (w'c') + \langle \tau_{cw} \rangle \rangle_i\}$  obtido a partir dos perfis verticais foi de  $(0,53 \pm 0,07) \text{ppm ms}^{-1}$ , que concorda com o valor estimado pelo modelo de Camada de Mistura.

O espalhamento nos perfis verticais de  $\langle (w'c') + \langle \tau_{cw} \rangle \rangle / w \cdot c$ , pode indicar que os campos de poluente não atingiram o estado de equilíbrio durante o tempo de integração, sendo talvez necessário, considerar um período maior de simulação. Tal espalhamento também poderia estar relacionado à altura da CLP utilizada para normalizar o fluxo turbulento de poluente, uma vez que  $z_i$  é determinada pela altura do mínimo no perfil vertical do fluxo de calor sensível.

A variância adimensional das flutuações da concentração de poluente na escala resolvida  $\{\langle c'^2 \rangle\} / c^2$  (Fig. 3a) mantêm-se aproximadamente constante até  $z \approx 0,2z_i$ , em razão do pequeno gradiente vertical do poluente nessa região. Acima desta, apresenta um crescimento linear alcançando um máximo junto ao topo da CLP e decaindo acima deste. A ocorrência deste máximo está relacionada a grande variação de  $\langle \bar{c} \rangle$  na região de entranhamento (Deardorff, 1974).

O perfil vertical do parâmetro de assimetria  $\langle w'^3 \rangle / \langle w'^2 \rangle^{3/2}$  (Fig. 3b) indica que a turbulência na CLP convectiva simulada é positivamente assimétrica. Em  $z \approx 0,1z_i$ , o valor estimado de  $\{\langle w'^3 \rangle / \langle w'^2 \rangle^{3/2}\} \approx 0,4$ , igual ao proposto por Hunt et al. (1980) a partir de observações da Camada Limite Superficial. Acima de  $z \approx 0,1z_i$ , ocorre um aumento de  $\{\langle w'^3 \rangle / \langle w'^2 \rangle^{3/2}\}$ , alcançando um máximo de 1,62 em  $z \approx 0,9z_i$ . Este resultado também esta de acordo

com os apresentados por Schmidt e Schumann (1989) para condições similares.

Observando o campo instantâneo da componente vertical de velocidade do vento no instante final de integração (Figura 4a), é possível identificar uma térmica bem definida (região entre  $0 < x < 3000\text{m}$ ) inserida em uma ampla região de movimento descendente menos intenso. Essa térmica, penetra a camada de inversão trazendo ar seco e “limpo” da cada estável acima para dentro da CLP convectiva (entranhamento). Por conseqüência, observa-se uma diminuição do campo instantâneo do poluente próximo à  $z_i$ , principalmente na região entre  $1500\text{m} < x < 3000\text{m}$  (Fig. 4b).

#### 4. CONCLUSÕES

Neste estudo foi utilizado o modelo de simulação direta dos grandes turbilhões, proposto por Moeng (1984), para simular a evolução espacial e temporal de um poluente inerte e passivo, emitido continuamente por uma fonte área localizada em superfície horizontalmente homogênea. As condições iniciais impostas a esta simulação foram escolhidas de modo a gerar uma CLP convectiva onde o regime de convecção livre ocupa a maior parte do CLP, ou seja, condições de convecção térmica com baixa velocidade do vento.

De acordo com os resultados apresentados, o modelo LES foi capaz de reproduzir as principais características da estrutura vertical da CLP convectiva com baixo cisalhamento do vento ( $-z_i/L \approx 880$ ).

O perfil vertical de concentração do poluente é típico de uma camada bem misturada. O fluxo vertical de poluente variou linearmente com a altura, apesar do espalhamento nas realizações individuais.

A variância das flutuações do poluente na escala resolvida, apresentou valores elevados próximo ao topo da CLP, decorrentes do elevado gradiente vertical de concentração de poluente nessa região.

O parâmetro de assimetria indica uma assimetria positiva na distribuição de velocidade vertical da CLP convectiva. A distribuição instantânea do poluente reflete esta assimetria, onde flutuações negativas de concentração do poluente estão fortemente correlacionadas com as flutuações negativas de velocidade vertical, e vice-versa.

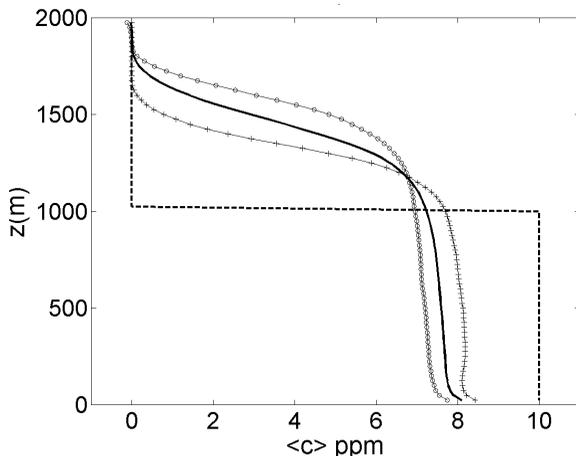
## **AGRADECIMENTOS**

O autor agradece o suporte financeiro recebido do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq (Proc. n° 140702/2000-8), e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, FAPESP (Proc. n° 98/15402-5). Ao Laboratório de Computação Científica Avançada Aplicada da Universidade de São Paulo (LCCA-USP) por disponibilizar o supercomputador Cray J90, essencial para a realização das simulações.

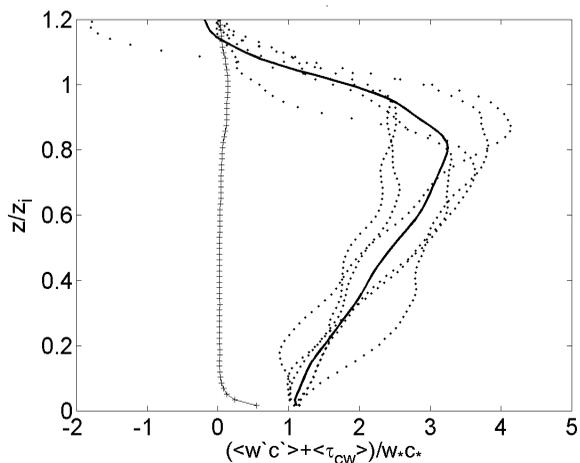
## **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- Cai, X.-M. 2000. Dispersion of a passive plume in an idealized urban convective boundary layer: A large-eddy simulation. *Atmospheric Environment*, 34: 61-72.
- Deardorff, J. W. 1972. Numerical investigation of neutral and unstable planetary boundary layers. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 29: 91-115.
- Deardorff, J. W. 1974. Three-dimensional numerical study of turbulence in an entraining mixed layer. *Boundary Layer Meteorology*, 7: 199-226.
- Van Haren, L. and Nieuwstadt, F. T. M. 1989. The behavior of passive and buoyant plumes in a convective boundary layer, as simulated with a large-eddy model. *Journal Applied Meteorology*, 28: 818-832.

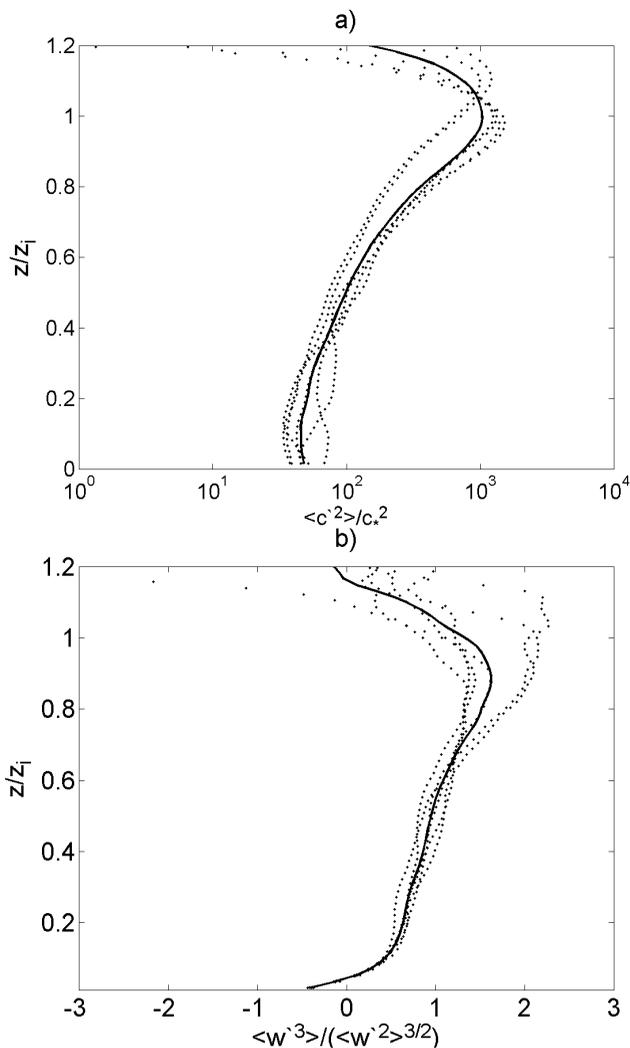
- Hunt, J. C. R., Kaimal, J. C. and Gaynor, J. E., 1988: Eddy structure in the convective boundary layer – new measurements and new concepts. *Quart. J. R. Meteorological Society*, 114, 827-858.
- Lamb, R. G. 1984. Diffusion in the convective boundary layer. In: Nieuwstadt, F. T. M.; van Dop, H. Ed. *Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling*. 1.ed. Reidel:Dordrecht, 159-229.
- Marques Filho, E. P., Oliveira, A P., Karam, H. A and Rizza, U, 2002. An investigation of pollutant dispersion in a highly convective boundary layer using large eddy simulation. Submitted the *Meteorology and Atmospheric Physics*.
- Moeng, C.-H. 1984. A large-eddy simulation model for the study of planetary boundary-layer turbulence. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41: 2052-2062.
- Moeng, C.-H. and Wyngaard, J. C. 1984. Statistics of conservative scalars in the convective boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41: 3161-3169.
- Schmidt, H. and Schumann, U. 1989. Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. *Journal Fluid Mechanics*, 200: 511-562.
- Sorbjan, Z. 1999. Similarity of scalar fields in the convective boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 56: 2212-2221.
- Willis, G. E. and Deardorff, J. W. 1978. A laboratory study of dispersion from an elevated source in a convective mixed layer. *Atmospheric Environment*, 12: 1305-1313.
- Wyngaard, J. C. and Brost, R. A. 1984. Top-down and bottom-up diffusion of a scalar in the convective boundary layer. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 41: 102-112.



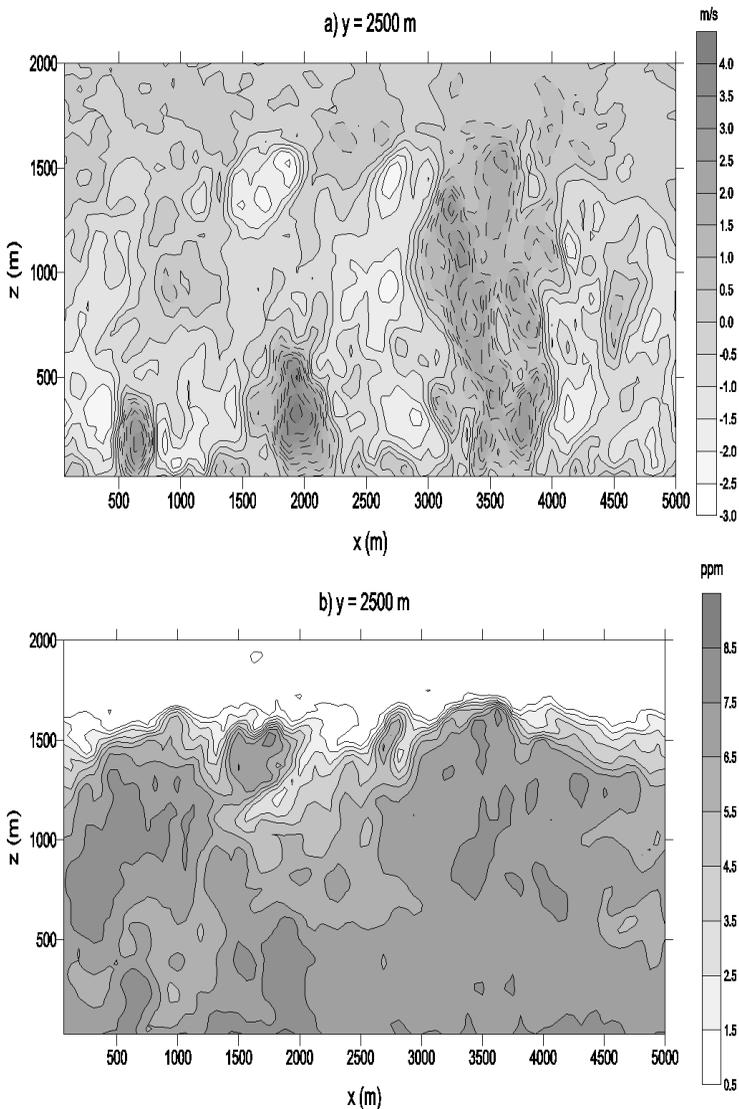
**Fig. 1.** Concentração média do poluente  $\langle \bar{c} \rangle$ . Os perfis verticais representam: (---) condições iniciais; (-+-) realização inicial em  $t = 0,8 \text{ h.}$ ; (-o-) realização final em  $t = 1,5 \text{ h.}$ ; (-) média do conjunto das realizações.



**Fig. 2.** Fluxo vertical turbulento do poluente  $(\langle w'c' \rangle + \langle \tau_{cw} \rangle) / w.c.$ . Os perfis verticais representam: (... ) conjunto de realizações; (-) média de conjunto das realizações; (-+-) fluxo turbulento do poluente na escala de subgrade.



**Fig. 3.** Perfis verticais: a) variância das flutuações de concentração do poluente  $\langle c'^2 \rangle / c^2$ ; b) parâmetro de assimetria  $\langle w'^3 \rangle / \langle w'^2 \rangle^{3/2}$ . Os perfis verticais representam: (...) conjunto de realizações; (—) média de conjunto das realizações.



**Fig. 4.** Corte vertical instantâneo da (a) componente vertical de velocidade do vento ( $m/s$ ) e da (b) concentração do poluente ( $ppm$ ). Em (a) as linhas tracejadas indicam regiões com velocidade vertical positiva. Resultados obtidos em  $t = 1,5$  h.

EDSON P. MARQUES FILHO  
emarques@model.iag.usp.br

AMAURI P. DE OLIVEIRA

HUGO A. KARAM

Grupo de Micrometeorologia, Dpt<sup>o</sup>. de Ciências Atmosféricas  
Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas - USP  
Rua do Matão, 1226 – CEP 05508.900 – São Paulo, SP, Brasil

UMBERTO RIZZA

Istituto per lo Studio dell'Inquinamento Atmosferico e  
l'Agrometeorologia

CNR/ISIATA

Str. Prov. Lecce – Monteroni Km 1200

Polo Scientifico dell'Università

73100 Lecce - Itália