

# MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS EM REGIÕES URBANAS DE RELEVO COMPLEXO BASEADA NAS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

## Henri J. Abboud

Departamento de Informática, Centro Tecnológico – UFES, Av. Fernando Ferrari, s/n, 29.060-970 – Vitória – ES  
[hjabboud@yahoo.com](mailto:hjabboud@yahoo.com)

## Alexsander Barros Silveira

Departamento de Engenharia Ambiental, Centro Tecnológico – UFES, Av. Fernando Ferrari, s/n, 29.060-970 – Vitória – ES  
[alexandersil@ig.com.br](mailto:alexandersil@ig.com.br)

## Jane Méri Santos

Departamento de Engenharia Ambiental, Centro Tecnológico – UFES, Av. Fernando Ferrari, s/n, 29.060-970 – Vitória – ES  
[janemeri@npd.ufes.br](mailto:janemeri@npd.ufes.br)

## Maxsuel M. Rocha Pereira

Departamento de Engenharia Ambiental, Centro Tecnológico – UFES, Av. Fernando Ferrari, s/n, 29.060-970 – Vitória – ES  
[maxsuelmrp@ig.com.br](mailto:maxsuelmrp@ig.com.br)

## Neyval C. Reis Jr.

Departamento de Engenharia Ambiental, Centro Tecnológico – UFES, Av. Fernando Ferrari, s/n, 29.060-970 – Vitória – ES  
[neyval@inf.ufes.br](mailto:neyval@inf.ufes.br)

*Resumo. A modelagem da dispersão de poluentes em regiões de relevo complexo e não homogêneo é bastante importante para estudos de poluição do ar. Todavia a complexidade do relevo causa grandes dificuldades para modelos matemáticos de dispersão de contaminantes na atmosfera, uma vez que o relevo altera profundamente a estrutura do escoamento e a dispersão de poluentes na região. Assim, modelos simplificados baseados em uma abordagem Gaussiana tem sua aplicabilidade bastante restringida nestas situações, uma vez que estes são desenvolvidos com base em hipóteses simplificadoras bastante restritivas. Conseqüentemente, a utilização de metodologias que utilizam, de forma acoplada, modelos meteorológicos para previsão dos campos de ventos e as equações de conservação e transporte de espécies químicas na atmosfera tornam-se bastante importantes nestas situações. Este trabalho apresenta um modelo de dispersão de poluentes na atmosfera para regiões de relevo complexo, com base em um campo de ventos obtido através de um modelo de diagnóstico baseados na conservação de massa e na solução das equações de conservação de massa de espécie química, utilizando o método de volumes finitos. Para fornecer os níveis de desempenho requeridos pelas simulações o algoritmo computacional é baseado na utilização de processamento paralelo, especialmente desenvolvido para a utilização em clusters de estações de trabalho. O modelo é testado em um problema de escala real, na Região da Grande Vitória - ES (Brasil), onde o campo de ventos e a concentração de poluentes sobre uma região urbana e sua variação durante o ciclo diário são analisados. Os resultados obtidos são comparados com dados experimentais obtidos por 8 estações de monitoramento, e mostram um considerável ganho de acurácia em relação à modelos convencionais.*

*Palavras chave:* dispersão de poluentes, atmosfera, relevo complexo, processamento paralelo

## 1. Introdução

A modelagem da dispersão de poluentes em regiões de relevo complexo e não homogêneo é bastante importante para estudos de poluição. Todavia a complexidade do relevo causa grandes dificuldades para modelos matemáticos de dispersão de contaminantes na atmosfera, uma vez que o relevo altera profundamente a estrutura do escoamento e a dispersão de poluentes na região. Assim, modelos simplificados baseados em uma abordagem Gaussiana tem sua aplicabilidade bastante restringida nestas situações, uma vez que estes são desenvolvidos com base em hipóteses simplificadoras bastante restritivas (Brown et al., 1993), tais como campo de ventos uniforme e constante com o tempo e relevo plano. Conseqüentemente, a utilização de metodologias que utilizam, de forma acoplada, modelos meteorológicos para previsão dos campos de ventos e as equações de conservação e transporte de espécies químicas na atmosfera tornam-se bastante importantes nestas situações (Carvalho et al., 2002).

Um dos aspectos chave para a modelagem de tais problemas é a ordem de grandeza da escalas envolvidas, uma vez que os problemas de interesse geralmente envolvem regiões de dezenas de quilômetros de extensão, porém as características do relevo e das fontes de emissão de poluentes requerem resolução do modelo da ordem de dezenas de metros. Assim, modelos de dispersão de poluentes na atmosfera requerem um elevado esforço computacional para simular problemas em escala real, uma vez que malhas computacionais devem envolver um número de pontos nodais da

ordem de  $10^5 \sim 10^4$ , para simular grandes domínios com resolução espacial suficiente (Anagnostopoulos & Bergeles, 1998).

Grande parte do esforço computacional necessário para efetuar as simulações é despendido na determinação do campo de ventos sobre a região, devido à complexidade das equações matemática envolvidas. Devido à simplicidade e relativamente boa acuidade, modelos de diagnóstico têm sido freqüentemente empregados em conjunto com as equações de transporte de poluentes na atmosfera em trabalhos de pesquisa sobre poluição do ar em regiões de relevo complexo, entre outros Prabha & Mursch-Radlgruber (1999), Subhlok & Steenkiste (2000). Todavia o esforço computacional requerido para aplicações práticas ainda é proibitivo para um grande número de situações, uma vez estudos de escala real envolvem a simulação de cenários meteorológicos de hora em hora durante períodos que podem se estender até 1~3 anos.

A utilização de sistemas de processamento paralelo tem se mostrado como um importante recurso para fornecer os níveis de desempenho requeridos por aplicações de grande escala dentro de estudos envolvendo métodos numéricos. Todavia, apesar da importância do processamento paralelo para fornecer os níveis de desempenho requeridos, o alto custo de supercomputadores paralelos muitas vezes representa um obstáculo a sua utilização em larga escala, principalmente no âmbito da pesquisa. Atualmente, clusters de computadores pessoais têm se popularizado como alternativas para o processamento de alto desempenho devido ao seu baixo custo, se comparados à supercomputadores. Apesar de oferecer a possibilidade de grande desempenho, a utilização de tais sistemas requer o uso de novos paradigmas de programação, usualmente exigindo a completa reestruturação dos algoritmos de solução porventura existentes.

Assim, este trabalho tem como objetivo desenvolver um modelo de dispersão de poluentes na atmosfera para regiões de relevo complexo, com base em um campo de ventos obtido através de um modelo de diagnóstico baseados na conservação de massa e na solução das equações de conservação de massa de espécie química, utilizando o método de volumes finitos baseado na utilização de processamento paralelo, especialmente desenvolvido para a utilização em clusters de estações de trabalho. Para analisar a acurácia do modelo e sua aplicabilidade a situações reais foi selecionado o estudo de caso da dispersão de NOx na região metropolitana da Grande Vitória, no Espírito Santo – Brasil.

## 2. Equações governantes

Conforme descrito anteriormente, o modelo de dispersão de poluentes na atmosfera apresentado neste trabalho é baseado na solução da equação de conservação de massa de uma espécie química, que governa o transporte de massa de um contaminante na atmosfera:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ K_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right] + S \quad (1)$$

onde  $C$  é a concentração de um contaminante na atmosfera [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ],  $u$ ,  $v$  e  $w$  representam os componentes de velocidade [ $\text{m}/\text{s}$ ] nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ .  $K_{xx}$ ,  $K_{yy}$  e  $K_{zz}$  são os coeficientes de difusão turbulenta na atmosfera [ $\text{m}^2/\text{s}$ ] e  $S$  é o termo de fonte ou sumidouro do contaminante na atmosfera [ $\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$ ], que pode representar taxas de reação química, remoção ou emissão para a atmosfera.

Para resolver a equação acima é necessário conhecer o campo de ventos e a intensidade dos coeficientes de difusão turbulenta na região em estudo. Neste trabalho, uma abordagem baseada em modelos de conservação de massa utilizando dados meteorológicos (Montero e Sanin, 2001) foi utilizada para a determinação do campo de velocidades, e está descrita na seção 2.1. A determinação dos coeficientes de difusão turbulenta na região em estudo foi baseada na utilização de correlações empíricas para a atmosfera, e está descrita na seção 2.2.

### 2.1. Campo de ventos

O primeiro passo para a modelagem dos campos de vento em uma determinada região é conhecer a intensidade e direção do vento em alguns pontos através de estações meteorológicas tipicamente instaladas a 10 m do solo. Assim, é possível definir uma região de estudo  $\Omega$ , onde o vetor velocidade é conhecido em  $N$  pontos  $(\vec{V}_1, \vec{V}_2, \vec{V}_3, \dots, \vec{V}_N)$ . O objetivo desta técnica é construir o campo de ventos tridimensional com base em valores conhecidos e, simultaneamente, satisfazer a equação da continuidade. Portanto, para obter o campo de ventos, são necessárias as etapas de inicialização e de ajuste, conforme mostrado a seguir.

#### 2.1.1. Etapa de inicialização

Os  $N$  vetores de velocidade são transformados, através de interpolação/extrapolação, em um campo de ventos para a região  $\Omega$   $(\vec{V}_1, \vec{V}_2, \vec{V}_3, \dots, \vec{V}_N) \xrightarrow{A} \vec{V}^0(x, y, z)$ , onde o campo  $\vec{V}^0(x, y, z)$  é normalmente chamado de “campo inicial ou

observado” e não satisfaz, necessariamente, o principio da conservação de massa. Este procedimento é executado em duas etapas: (i) interpolação na direção horizontal utilizando a Eq. (2) (Jiang et al, 2001), construindo o vetores velocidades na altura de referência (em geral 10 m) para todo o domínio, (ii) construção do perfil vertical de velocidades. A interpolação horizontal é efetuada com base em:

$$\vec{V}^0(x, y, h_{ref}) = \frac{\sum_{n=1}^N \vec{V}_n / r_n^2}{\sum_{n=1}^N 1/r_n^2} \quad (2)$$

onde  $r_n$  representa a distância entre cada estação  $n$  e o ponto  $(x, y, h_{ref})$  do domínio de estudo e  $h_{ref}$  representa a altura de referência em relação ao solo. Raramente as estações meteorológicas são capazes de medir os componentes verticais da velocidade que são, portanto, inicializados como nulos. Os perfis verticais do vento podem ser calculados utilizando a “lei de potência” (Sherman, 1978):

$$\vec{V}^0(x, y, z) = \vec{V}^0(x, y, h_{ref}) \left( \frac{z}{h_{ref}} \right)^p \quad (3)$$

onde  $\vec{V}^0(x, y, h_{ref})$  é a velocidade do vento interpolada usando Eq. 2,  $z$  é a coordenada vertical e o expoente  $p$  é determinado em função da classe de estabilidade da atmosfera (Hanna, 1981), conforme Tab (1) que é discutida na seção 2.1.3. Esta função é válida para os primeiros 10% da camada limite planetária (camada superficial), onde os fluxos turbulentos são considerados aproximadamente constantes, acima da Camada Superficial a velocidade do vento é considerada constante.

### 2.1.2. Etapa de ajuste (Conservação de massa)

O campo  $\vec{V}^0(x, y, z)$  é transformado em um “campo final ou reconstruído”  $\vec{V}(x, y, z)$ , que satisfaça o principio da conservação de massa,  $\vec{V}^0(x, y, z) \rightarrow \vec{V}(x, y, z)$ . O campo de ventos final deve satisfazer a equação da continuidade que considerando escoamento incompressível, torna-se:

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (4)$$

É importante notar que o número de soluções possíveis é infinito, assim, o campo reconstruído depende dos procedimentos adotados nas etapas de inicialização e ajuste. Pode-se obter o campo de ventos final, através da técnica variacional descrita originalmente por Sasaki (1958) e (1970), e utilizada por Sherman (1978), Ratto (1996b) e Montero e Sanin (2001). O procedimento proposto por Sasaki consiste em encontrar um campo de velocidades  $\vec{V}(x, y, z)$  com componentes  $u$ ,  $v$  e  $w$  que atenda a Eq. (4) e que se aproxime ao campo original  $\vec{V}^0(x, y, z)$  com componentes  $u^0$ ,  $v^0$  e  $w^0$ . Portanto, é possível escrever o problema de ajuste como um problema de mínimos quadrados na forma:

$$E(u, v, w) = \int_{\Omega} \left[ \alpha_1^2 (u - u^0)^2 + \alpha_1^2 (v - v^0)^2 + \alpha_2^2 (w - w^0)^2 \right] dV \quad (5)$$

onde  $\alpha_i$  são os módulos de precisão de Gauss. A técnica de multiplicadores de Lagrange é utilizada para minimizar a expressão acima sujeita a Eq. (4). O valor mínimo de  $E(u, v, w)$  é obtido para:

$$u = u^0 + \frac{1}{2\alpha_1^2} \frac{\partial \lambda}{\partial x} \quad v = v^0 + \frac{1}{2\alpha_1^2} \frac{\partial \lambda}{\partial y} \quad w = w^0 + \frac{1}{2\alpha_2^2} \frac{\partial \lambda}{\partial z} \quad (6)$$

onde  $\lambda = \lambda(x, y, z)$  é o multiplicador de Lagrange, que pode ser interpretado fisicamente como uma perturbação do velocidade. Se os parâmetros  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  são considerados constantes ao longo de todo domínio, pode-se reescrever a Eq. (4) utilizando as Eqs. (5) e (6), como:

$$\frac{\partial^2 \lambda}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \lambda}{\partial y^2} + \frac{\alpha_1^2}{\alpha_2^2} \frac{\partial^2 \lambda}{\partial z^2} = -2\alpha_1^2 \left( \frac{\partial u^0}{\partial x} + \frac{\partial v^0}{\partial y} + \frac{\partial w^0}{\partial z} \right) \quad (7)$$

A Eq. (7) representa uma equação diferencial parcial elíptica para  $\lambda$  com duas condições de contorno admissíveis (Sherman, 1978):

$$\lambda = 0 \quad \frac{\partial \lambda}{\partial x_n} = 0 \tag{8}$$

onde  $x_n$  representa a coordenada na direção normal à fronteira. Quando a condição de  $\lambda = 0$  é utilizada, as derivadas normais são em geral não nulas e existe um ajuste de  $u$ ,  $v$  e  $w$  não nulo. Este ajuste implica em massa fluindo através de uma fronteira do domínio. Assim, a condição de contorno de  $\lambda = 0$  é apropriada para fronteiras abertas ou permeáveis do domínio.

Por outro lado, a condição de derivada nula implica em ajuste nulo para as velocidades tangenciais no contorno, visto que as derivadas tangenciais serão nulas. Se as velocidades normais observadas em uma fronteira são nulas, as velocidades ajustadas também serão nulas. Portanto, esta condição é ideal para regiões de fronteiras fechadas ou impermeáveis.

Assim, considerando-se o domínio de estudo tridimensional, as condições de contorno apropriadas são dadas pela condição de derivada nula para a fronteira inferior que representa o solo e para a fronteira superior que representa o topo da camada limite atmosférica ou de inversão, através da qual assume-se um fluxo de massa nulo e  $\lambda = 0$  para as fronteiras laterais abertas.

### 2.1.3. Estabilidade atmosférica

$\alpha_1$  e  $\alpha_2$  representam os fatores de peso dos desvios, respectivamente, das componentes horizontais e da componente vertical da velocidade entre seus valores iniciais e corrigidos. Assim, se estes parâmetros são iguais, todas as correções efetuadas sobre o campo de ventos inicial terão ordem de grandeza semelhante. Todavia, as condições meteorológicas dependem da estratificação da densidade do ar na atmosfera que influenciam o deslocamento vertical das massas ar. A atmosfera é considerada estável quando suas condições de estratificação suprimem os movimentos verticais, instável quando facilitam os movimentos verticais e neutra quando não há influência significativa da estratificação nestes deslocamentos verticais. Portanto,  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  devem refletir as variações de estabilidade atmosférica.

Neste trabalho a classificação das condições de estabilidade atmosféricas é efetuada com base nas classes de estabilidade de Pasquill (1961), apud (Seinfeld e Pandis, 1998). A Tab. 2 apresenta as classes de estabilidade de Pasquill em função da velocidade do vento, a fim de incorporar a turbulência induzida mecanicamente e das condições de aquecimento da superfície da Terra a fim de incorporar a turbulência induzida pelo empuxo térmico.

Tabela 1. Valores do expoente  $p$  (Hanna., 1981) e da razão  $\alpha_1/\alpha_2$  (Ratto, 1996b) em função da estabilidade atmosférica.

Condição atmosférica	$p$				$\alpha_1/\alpha_2$	$a$	$b$
	$z_0=0.01m$	$z_0=0.10m$	$z_0=1.00m$	$z_0=3.00m$		$[z_0<0.1 / z_0\geq 0.1]$	$[z_0<0.1 / z_0\geq 0.1]$
A	0,05	0,08	0,17	0,27	1.4	-0,096	0,029
B	0,06	0,09	0,17	0,28	1.4	-0,037	0,029
C	0,06	0,11	0,20	0,31	1.4	-0,002 / - 0,011	0,018 / 0,0162
D	0,12	0,16	0,27	0,37	1.0	0	0
E	0,34	0,32	0,38	0,47	0.3	+0,004 / 0,0151	-0,018 / -0,0216
F	0,53	0,54	0,61	0,69	0.1	+0,035	-0,036

Tabela 2 – Classes de estabilidade de Pasquill (Seinfeld e Pandis, 1998).

Velocidade do vento a 10 m do solo (m/s)	Dia			Noite	
	Radiação solar [ $W/m^2$ ]			Cobertura de nuvens (cn)	
	$R>700$	$350\leq R\leq 700$	$R<350$	$cn\geq 4/8$	$cn\leq 3/8$
< 2	A	A – B	B	—	—
2 – 3	A – B	B	C	—	—
3 – 5	B	B – C	C	D	E
5 – 6	C	C – D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Onde: A: extremamente instável  
 B: moderadamente instável  
 C: fracamente instável  
 D: neutra  
 E: fracamente estável  
 F: moderadamente estável

Em condições estáveis, a correção dos componentes verticais de velocidade deve ser pequena devido à supressão dos movimentos verticais, requerendo  $\alpha_2 > \alpha_1$ . Por outro lado, em condições instáveis a correção dos componentes verticais de velocidade devem ser maiores, devido à instabilidade causada pela estratificação, requerendo  $\alpha_1 > \alpha_2$ . Neste trabalho, serão utilizados os valores empíricos sugeridos por Ratto (1996b), onde  $\alpha_1$  é igual a 1.0 e a razão  $\alpha_1/\alpha_2$  varia conforme apresentado na Tabela (1).

Assim, as condições atmosféricas influenciam o campo de ventos de duas formas: (i) através do expoente  $p$  utilizado para determinar o perfil vertical de velocidades na construção inicial do campo de velocidades, e (ii) através dos valores da razão  $\alpha_1/\alpha_2$ , que indicam a importância dos movimentos verticais nas correções de velocidade.

## 2.2. Coeficientes de difusão turbulenta na atmosfera

Nas últimas décadas, diversos pesquisadores se empenharam em investigar os perfis verticais de turbulência na atmosfera. Desta forma, diversas formulações empíricas foram desenvolvidas para expressar a variação vertical dos coeficientes de difusão turbulenta  $K_{xx}$ ,  $K_{yy}$  e  $K_{zz}$  em diferentes condições de estabilidade. As expressões utilizadas aqui foram desenvolvidas empiricamente com base em dados experimentais ou gerados computacionalmente, por outros autores. A seguir, são sumarizadas as expressões empregadas (uma descrição mais detalhada destas relações pode ser encontrada em Seinfeld e Pandis, 1998 e Hanna, 1981).

### 2.2.1. Coeficiente difusão turbulenta na direção vertical ( $K_{zz}$ )

Lamb et al. (1975) e Lamb and Duran (1977) (appud Seinfeld e Pandis, 1998), propuseram as expressões empíricas para o coeficiente de difusão turbulenta na direção vertical em condições instáveis, considerando as fontes de emissão próximas ou ao nível do solo, com base nos resultados de Simulações de Grandes Escalas (LES):

$$\frac{K_{zz}}{w_* z_i} = \begin{cases} 2.5 \left( k \frac{z}{z_i} \right)^{4/3} [1 - 15(z/L)]^{1/4} & 0 \leq \frac{z}{z_i} < 0.05 \\ 0.021 + 0.408 \left( \frac{z}{z_i} \right) + 1.351 \left( \frac{z}{z_i} \right)^2 \\ - 4.096 \left( \frac{z}{z_i} \right)^3 + 2.560 \left( \frac{z}{z_i} \right)^4 & 0.05 \leq \frac{z}{z_i} \leq 0.6 \\ 0.2 \exp \left[ 6 - 10 \left( \frac{z}{z_i} \right) \right] & 0.6 < \frac{z}{z_i} \leq 1.1 \\ 0.0013 & \frac{z}{z_i} > 1.1 \end{cases} \quad (9)$$

onde  $z_i$  é a altura da camada de inversão térmica e  $L$  é o comprimento de Monin-Obukhov, dado por:

$$L = \frac{-\rho c_p T_0 u_*}{kgq} \quad (10)$$

onde  $\rho$  é a densidade do ar,  $c_p$  é o calor específico a pressão constante,  $T_0$  é a temperatura da superfície do solo,  $k$  é a constante de Von-Karman,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $q$  é o fluxo de calor na superfície e  $u_*$  é a velocidade de fricção na atmosfera. Analogamente à classificação de estabilidade atmosférica através das classes de Pasquill, descrita na seção 2.1.3, o comprimento de Monin-Obukhov é um bom indicador das condições de estabilidade atmosférica, se o valor de  $L$  for positivo a atmosfera é considerada estável, se o valor de  $L$  for negativo a atmosfera é considerada instável. A atmosfera é considerada neutra quando  $|L| \rightarrow \infty$ . Todavia, o comprimento de Monin-Obukhov não é um parâmetro usualmente medido na atmosfera, devido às dificuldades associadas à medição dos parâmetros dos quais depende. Golder (1972) (appud Zannetti, 1990) propôs uma expressão empírica para correlacionar o valor de  $L$  com as classes de estabilidade de Pasquill:

$$L = a + b \log(z_0) \quad (11)$$

onde  $a$  e  $b$  são os coeficientes obtidos pelo ajuste da eq. 11 aos resultados obtidos por Myrup e Razieri (1976) (appud Seinfeld e Pandis, 1998), que são apresentados na figura 1. Neste trabalho, os valores de  $a$  e  $b$  são determinados através de ajuste da eq. 11 aos resultados obtidos por Myrup e Razieri (1976) utilizando 2 intervalos de rugosidades, isto é

[0,001 m <math>z\_0 < 0.1\text{ m}</math>] e [0,1 m <math>\leq z\_0 \leq 5,0\text{ m}</math>]. Este procedimento foi utilizado para aumentar a acuidade da representação de  $L$  para valores de rugosidade maiores do que 1 m, para os quais a eq. 11 apresenta desvios significativos. Os valores obtidos para as constantes  $a$  e  $b$  são apresentados na tabela 1.

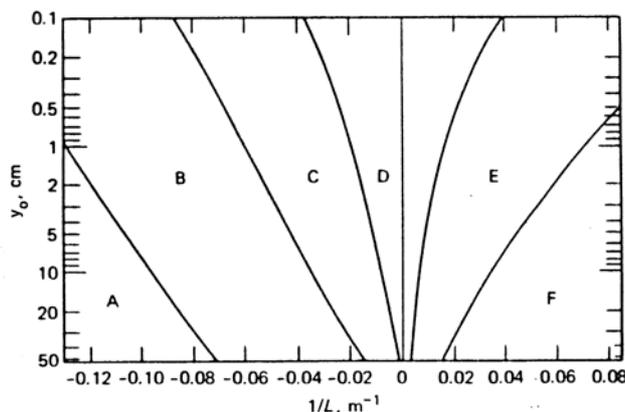


Figura 1 – Curvas de variação de  $L$  em função de  $z_0$  para as diferentes classes de estabilidade obtidas por Myrup e Razieri (1976) (appud Zaneti, 1990).

O valor de  $w_*$  na eq. 9 representa a velocidade de escala de convectiva, que por definição é dada por (Seinfeld e Pandis, 1998):

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

Para condições neutras de estabilidade, o coeficiente vertical de difusão turbulenta é baseado nas expressões empíricas propostas por Myrup and Ranzieri (1976) (appud Seinfeld e Pandis, 1998):

$$K_{zz} = \begin{cases} ku_* z & z/z_i < 0.1 \\ ku_* z (1.1 - z/z_i) & 0.1 \leq z/z_i \leq 1.1 \\ 0 & z/z_i > 1.1 \end{cases} \quad (13)$$

onde  $u_*$  é a velocidade de fricção na superfície do solo, que é calculado neste trabalho como (Benoit, 1977) (appud Seinfeld e Pandis, 1998):

$$\frac{u_*}{ku(z_{ref})} = \begin{cases} \left[ \ln \left( \frac{z_{ref}}{z_0} \right) + \frac{4.7}{L} (z_{ref} - z_0) \right]^{-1} & \text{condições estáveis} \\ \left[ \ln \left( \frac{z_{ref}}{z_0} \right) \right]^{-1} & \text{condição neutra} \\ \left\{ \ln \left( \frac{z_{ref}}{z_0} \right) + \ln \left[ \frac{(\eta_0^2 + 1)(\eta_0 + 1)^2}{(\eta_r^2 + 1)(\eta_r + 1)^2} \right] + 2 \left[ \tan^{-1}(\eta_r) - \tan^{-1}(\eta_0) \right] \right\}^{-1} & \text{condições instáveis} \end{cases} \quad (14)$$

onde  $u(z_{ref})$  é a velocidade do vento medida em uma altura de referência ( $z_{ref}$ ) e

$$\eta_r = \left( 1 - 15 \frac{z_{ref}}{L} \right)^{1/4} \quad \eta_0 = \left( 1 - 15 \frac{z_0}{L} \right)^{1/4} \quad (15)$$

Para condições estáveis de estabilidade, o coeficiente vertical de difusão turbulenta é baseado nas expressões propostas por Businger e Arya (1974) (appud Seinfeld e Pandis, 1998):

$$K_{zz} = \frac{ku_* z}{0.74 + 4.7(z/L)} \exp \left( - \frac{8fz}{u_*} \right), \quad \text{onde } f = 2\Omega \sin \beta \quad (16)$$

onde  $\Omega$  é a velocidade angular de rotação da terra e  $\beta$  é a latitude.

### 2.2.2. Coeficientes difusão turbulenta nas direções horizontais ( $K_{yy}$ e $K_{xx}$ )

Os coeficientes horizontais de difusão turbulenta ( $K_{yy}$  e  $K_{xx}$ ) utilizados neste trabalho são baseados nas expressões sugeridas por Nieuwstadt e van Ulden (1978) (apud Hanna, 1981), onde os valores de  $K_{yy}$  e  $K_{xx}$  são dados como:

$$K_{yy} = \frac{ku_*z}{\Phi(z/L)} \quad \text{onde } \Phi(z/L) = \begin{cases} 0,74 \left(1 - 9 \frac{z}{L}\right)^{-1/2} & L \leq 0 \\ 0,74 + 4,7 \frac{z}{L} & L > 0 \end{cases} \quad (17)$$

sendo que  $K_{xx} = K_{yy}$ .

## 3. Algoritmo de solução

### 3.1. Método numérico

As Eqs. (1) e (7) foram resolvidas numericamente através da técnica de volumes finitos. O esquema de diferenças centradas é utilizado para discretizar as derivadas nas faces dos volumes de controle para a equação de correção do campo de ventos (Eq. 7) e o esquema *power-law* (Patankar, 1980) foi utilizado para discretizar a equação de conservação de massa da espécie química na atmosfera. Foi utilizada uma malha ortogonal uniforme nas direções  $x$  e  $y$ , e não uniforme na direção  $z$  (concentrando volumes próximos à superfície do solo). Devido ao uso de malha ortogonal, o relevo foi tratado através de regiões bloqueadas (Patankar, 1980).

A solução numérica da Eq. (1) requer o tratamento dos termos transientes, assim, um esquema de integração no tempo é necessário. O esquema Crank-Nicholson foi utilizado para acompanhar a variação temporal dos termos na Eq.(1), que é um método implícito de segunda ordem de acurácia. Apesar de ser incondicionalmente estável, o esquema Crank-Nicholson pode apresentar oscilações fisicamente não realistas (Ferziger e Peric, 1999), fato que pode ser atribuído ao surgimento de coeficientes negativos nas equações discretizadas. As oscilações podem ser evitadas mantendo-se o critério para o tamanho do intervalo ( $\Delta t$ ):  $\Delta t < \rho(\Delta x_i)^2 / \Gamma_i$ , onde  $\Delta x_i$  é o tamanho do menor do intervalo de discretização no espacial na direção  $i$  e  $\Gamma_i$  é o coeficiente de difusão na direção  $i$ .

O método SOR/Gauss-Seidel com alternância nos sentidos das varreduras nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  foi usado na solução do sistema linear de equações.

### 3.2. Estratégia de paralelização

O algoritmo foi desenvolvido especificamente para o uso em plataformas de processamento com memória distribuída, especialmente clusters de estações de trabalho. Em sistemas de memória compartilhada, o paralelismo é principalmente dirigido à execução de um conjunto de operações idêntico sobre a mesma estrutura de dados (paralelização dos *do-loops*), por outro lado, o paralelismo em sistemas de memória distribuída é dirigido à divisão das estruturas de dados (matrizes e vetores) em blocos, designando cada bloco a um processador. Portanto, o mesmo código computacional é executado por todos os processadores, porém as operações são efetuadas sobre diferentes regiões do domínio, isto é, cada processador é encarregado de resolver o problema em uma região do domínio computacional.

A Fig. (2) mostra a representação esquemática do domínio computacional para a simulação do campo de ventos sobre uma região de relevo complexo, Fig. 2a. Através da divisão do domínio computacional em 16 sub-domínios, é possível dividir as tarefas de processamento entre 16 diferentes processadores (Fig. 2b). Entretanto, para computar o valor das variáveis em cada volume de controle, é necessário conhecer o valor de variáveis próximas às interfaces entre sub-domínios, assim, um processador requer informação armazenada na memória de outro processador. Isto exige que os processadores se comuniquem em intervalos de tempo regulares, o que pode reduzir significativamente a velocidade da computação.

O procedimento de computação denominado decomposição de domínio envolve três passos principais: (1) divisão do domínio computacional; (2) execução das operações em cada processador, sobre seu próprio conjunto de dados; (3) comunicação dos dados entre os processadores. A chave para um processamento eficiente é manter a comunicação num nível mínimo e garantir uma divisão da carga de trabalho entre os processadores. Após a divisão do domínio em blocos, as operações sobre cada bloco são efetuadas em paralelo por cada processador para condições de contorno que podem ser físicas ou internas, devido à divisão em subdomínios. As condições de contorno físicas são tratadas da maneira convencional, enquanto que as condições de contorno internas requerem dados dos processadores que armazenam os subdomínios vizinhos.

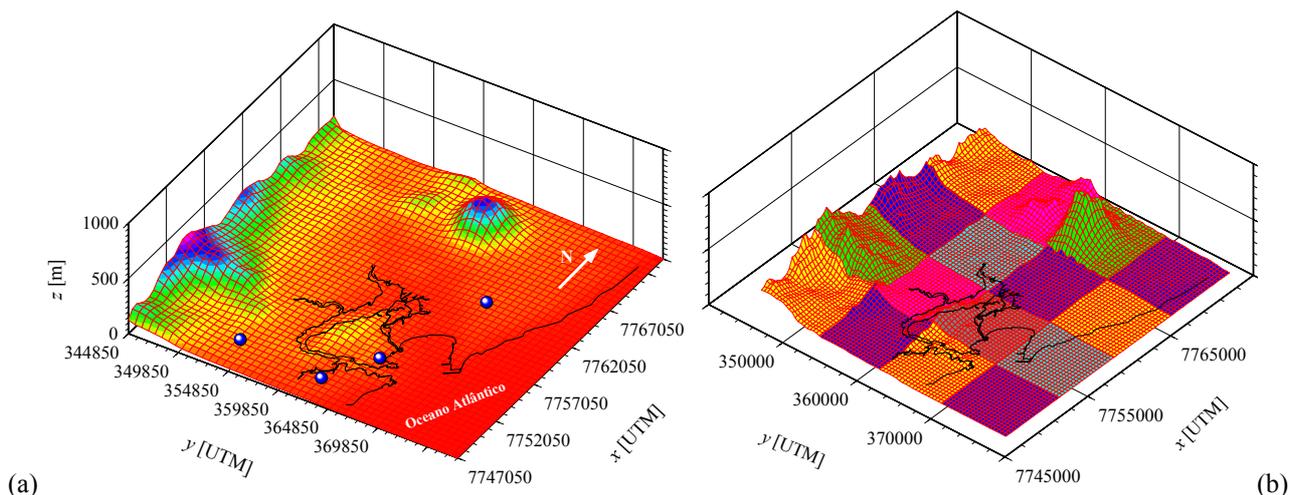


Figura 2 – Representação da divisão do domínio computacional em 16 sub-domínios. (a) Região da Grande Vitória – ES e (b) divisão da região em sub-domínios.

Quando os dados relativos as variáveis de cada vizinho são recebidos por um processador, inicia-se a execução de uma iteração sobre seu conjunto de dados, usando um algoritmo seqüencial. Tão logo o processador complete as instruções, os novos valores das variáveis nos pontos do contorno são enviados para os blocos vizinhos e o processador aguarda os valores das variáveis dos blocos vizinhos para computar uma nova iteração. A troca de informações entre subdomínios foi implementada através da biblioteca MPI (Message Passing Interface) que permite a portabilidade do código computacional para plataformas desde clusters até supercomputadores maciçamente paralelos. Uma descrição detalhada desta estratégia de paralelização pode ser encontrada em Abboud et al. (2003).

A Fig. (3) mostra a seqüência de operações executada por cada processador em seu próprio sub-domínio: tarefas associadas à leitura dos arquivos de relevo e dados meteorológicos de cada estação; interpolação inicial do campo de ventos; cálculo dos coeficientes das equações discretizadas (Eq. 7) e iterações SOR. Após cada iteração SOR, os novos valores de  $\lambda$  nos volumes de controle na região de interface são comunicados para os vizinhos. Simultaneamente, os vizinhos enviam seus valores para atualizar as informações de contorno. Este procedimento é repetido até que todos os sub-domínios atinjam a convergência. Após a solução da equação para  $\lambda$ , os valores de velocidades são corrigidos (Eq. 6) e a equação de transporte de contaminantes na atmosfera (Eq.1) é resolvida, passando pelas etapas de cálculo dos coeficientes da equação discretizada e solução do sistema linear de equações gerado (iterações SOR + comunicação entre processadores) até atingir a convergência.

É importante notar que cada cenário meteorológico obtido das estações de monitoramento representa as condições médias de 1 hora (intensidade de radiação, direção e velocidade do vento). Assim, o tamanho do intervalo de tempo para avanço dos cenários meteorológicos (representado na Fig. 3 como  $\Delta t$ ) é igual a 1 hora. Todavia, o tamanho do intervalo de tempo para avanço no cálculo da concentração pode ser menor, uma vez que este é ditado pela acurácia necessária na evolução temporal do fenômeno em estudo e critérios de estabilidade numérica. Portanto, no algoritmo apresentado neste trabalho, o tamanho do intervalo de tempo para avanço dos cenários meteorológicos ( $\Delta t$ ) é diferente do tamanho do intervalo de tempo para avanço no cálculo da concentração (representado na Fig. 3 como  $\Delta tc$ ). Neste trabalho, o valor de  $\Delta tc$  utilizado é sempre um múltiplo de  $\Delta t$ .

#### 4. Resultados e análise da acurácia do método

Para analisar a acurácia do modelo e sua aplicabilidade a situações reais foi selecionado o estudo de caso da dispersão de NOx na região metropolitana da Grande Vitória, no Espírito Santo – Brasil. Esta região foi selecionada devido ao relevo relativamente complexo e a existência de dados experimentais (dados meteorológicos e de concentração de NOx) e fontes de emissão de poluentes na região. Esta seção está dividida em 2 partes principais. A seção 4.1 apresenta uma breve descrição da região em estudo, suas características de topografia e meteorologia, fontes de emissão e os dados de concentração utilizados para avaliação da acurácia do modelo. A seção 4.2 apresenta os resultados obtidos pelo modelo para a simulação dos cenários meteorológicos selecionados.

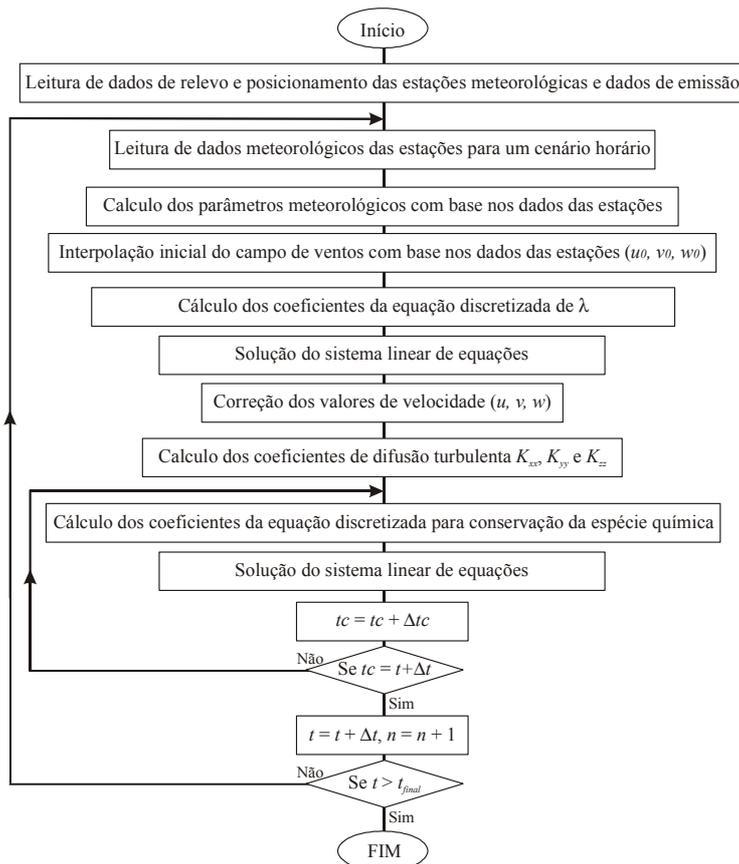


Figura 3 – Fluxograma das operações básicas envolvidas no algoritmo de solução.

#### 4.1. Região da Grande Vitória

A Região da Grande Vitória – ES (RGV) é uma região metropolitana localizada aproximadamente na 20° S e 40° O, compreendendo as maiores 5 cidades do estado do Espírito Santo (Vitória, Vila Velha, Serra, Cariacica e Viana). A fig. 3a mostra o relevo da região simulada, utilizando coordenadas UTM [m], onde a mais alta elevação corresponde a aproximadamente 500 m. Outra característica importante da região é a proximidade com o mar, introduzindo maior complexidade ao problema (devido a presença de brisas marinhas). A região em estudo corresponde a uma área de 891 km<sup>2</sup> (27km × 33km). Existem 3 significativas elevações de relevo na região: (i) uma na região NO do domínio de estudo, que corresponde à região mais elevada e íngreme da topografia, (ii) outra região na fronteira O do domínio de estudo, (iii) e a região de menor elevação diretamente no centro da ilha de Vitória.

Os pontos azuis na fig.2a indicam o posicionamento das 4 estações meteorológicas da região. Estas funcionam continuamente, fornecendo médias horárias de módulo e direção dos ventos, desvio padrão da direção do vento, temperatura e insolação, que permitem caracterizar as condições de estabilidade atmosférica da região. A fig. 4 apresenta uma representação esquemática da região de estudo e do domínio computacional, onde são indicados os pontos de monitoramento meteorológico e de concentração de contaminantes. As estações de monitoramento 1, 3, 6 e 8 forneceram os dados meteorológicos para a elaboração dos cenários meteorológicos, para simular a dispersão de NOx na região de estudo. As estações 1, 2, 3, 4 e 6 foram utilizadas para obter dados de concentração nos períodos de estudo. Os pontos vermelhos indicam o posicionamento das fontes de emissão de NOx na região, sendo que quando estes são representados como linhas contínuas estão indicando segmentos de ruas, avenidas e/ou rodovias, que representam pontos de emissão devido a presença de fontes móveis (veículos automotores).

Neste trabalho foram consideradas as fontes de emissão fixas e móveis contidas no inventário de fontes apresentado por Queiroz et al. (1997). O inventário inclui as 57 principais fontes fixas de emissão de NOx e 323 segmentos das principais ruas e avenidas da RGV. As principais fontes fixas são região estão concentradas na Ponta de Tubarão (indicada na fig.4), uma região de alta concentração industrial, enquanto as fontes moveis estão distribuídas ao longo de toda região, porém com predomínio nas regiões de maior concentração urbana (proximidades das estações 1, 5 e 7). Os 323 segmentos das principais ruas e avenidas da RGV são incluídos no modelo como uma série de fontes pontuais. Queiroz et al. (1997) também reporta dados de variação horária do fluxo de veículos nas ruas e avenidas em estudo. Assim, as emissões das fontes fixas são consideradas contínuas, enquanto que as emissões das fontes móveis são consideradas em seu ciclo diário, com valores máximos entre 17:00 e 19:00 horas e valores mínimos durante as madrugadas.

É importante notar que o monitoramento dos níveis de concentração e dos dados meteorológicos foi iniciado no ano de 2000. Portanto, o inventário de emissões possui um defasagem de 3 anos em relação aos dados de concentração. Para superar esta limitação considerou-se que o tráfego de veículos, e conseqüentemente, as taxas de emissão das fontes móveis são proporcionais à frota de veículos na região. Uma vez que o crescimento da frota veicular na RGV é aproximadamente de 11% ao ano (conforme dados do DETRAN local), os valores de emissão foram corrigidos para o ano de 2000 com base nesta taxa de crescimento médio. Por outro lado, não houve significativa variação nos dados relacionados às fontes fixas, uma vez que não houve a instalação de nenhuma nova fonte significativa na região, ou alteração das fontes principais.

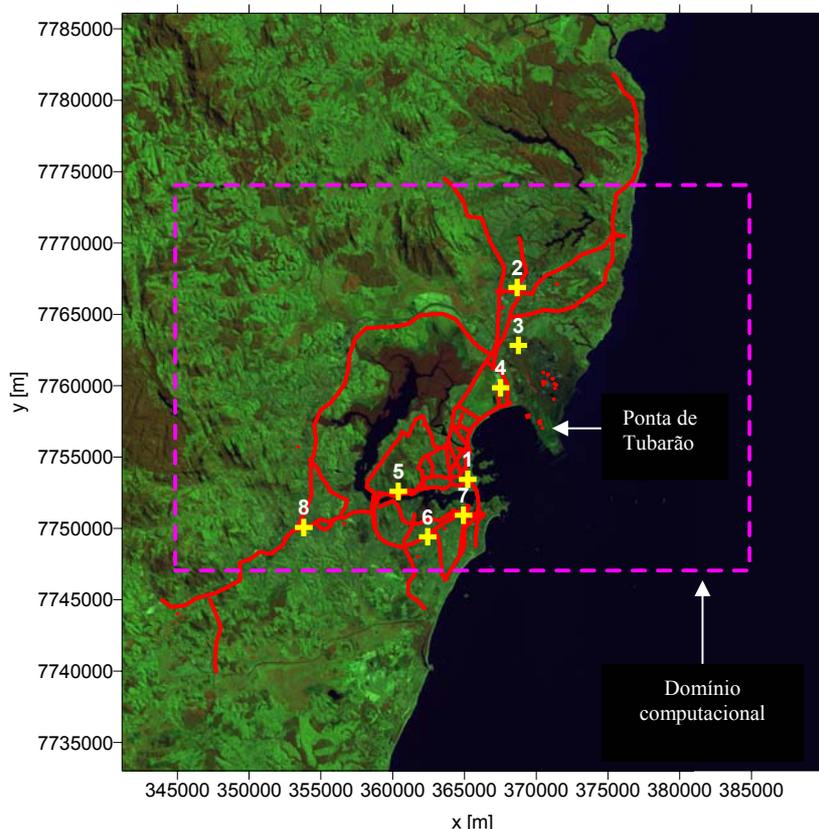


Figura 4 – Região da Grande Vitória com indicações do posicionamento das estações de monitoramento (+), fontes fixas e móveis (•) e das dimensões e configuração do domínio computacional (---).

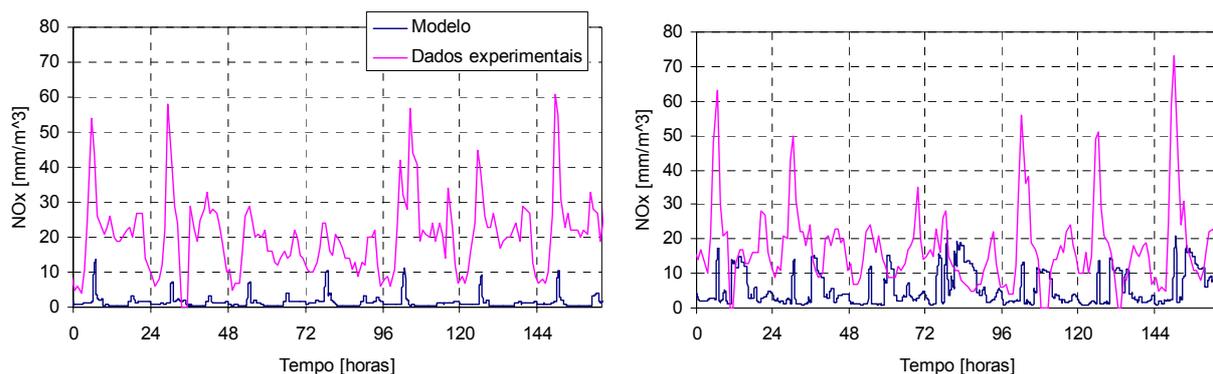
#### 4.2. Resultados obtidos

As simulações foram efetuadas com dimensões do domínio computacional utilizado de 27000 m × 33000 m × 1500 m ( $x \times y \times z$ ), com uma malha computacional de 100×100×30. As simulações foram efetuadas em um cluster de 64 nós de processamento, cada um equipado com 1 processador Athlon XP 1800. Os cenários meteorológicos selecionados incluem uma semana de dados no período de 18/10/2000 a 25/10/2000, que consumiram aproximadamente 4 horas de processamento. Este período foi selecionado de maneira aleatória entre os dados meteorológicos disponíveis, porém tomando-se o cuidado para evitar dias com ocorrência de precipitação pluviométrica e com a passagem de frentes frias, que podem reduzir de maneira significativa a acurácia do modelo, uma vez que estes fenômenos não estão incluídos na modelagem matemática.

Devido à ausência de dados sobre a altura da camada de inversão na região em estudo, esta foi considerada constante e igual a 1500 m durante o período em estudo. A rugosidade superficial ( $z_0$ ) foi considerada igual a  $10^{-3}$  m para a superfície do mar e 2 m para a região urbana, conforme proposto por Seinfeld e Pandis (1998).

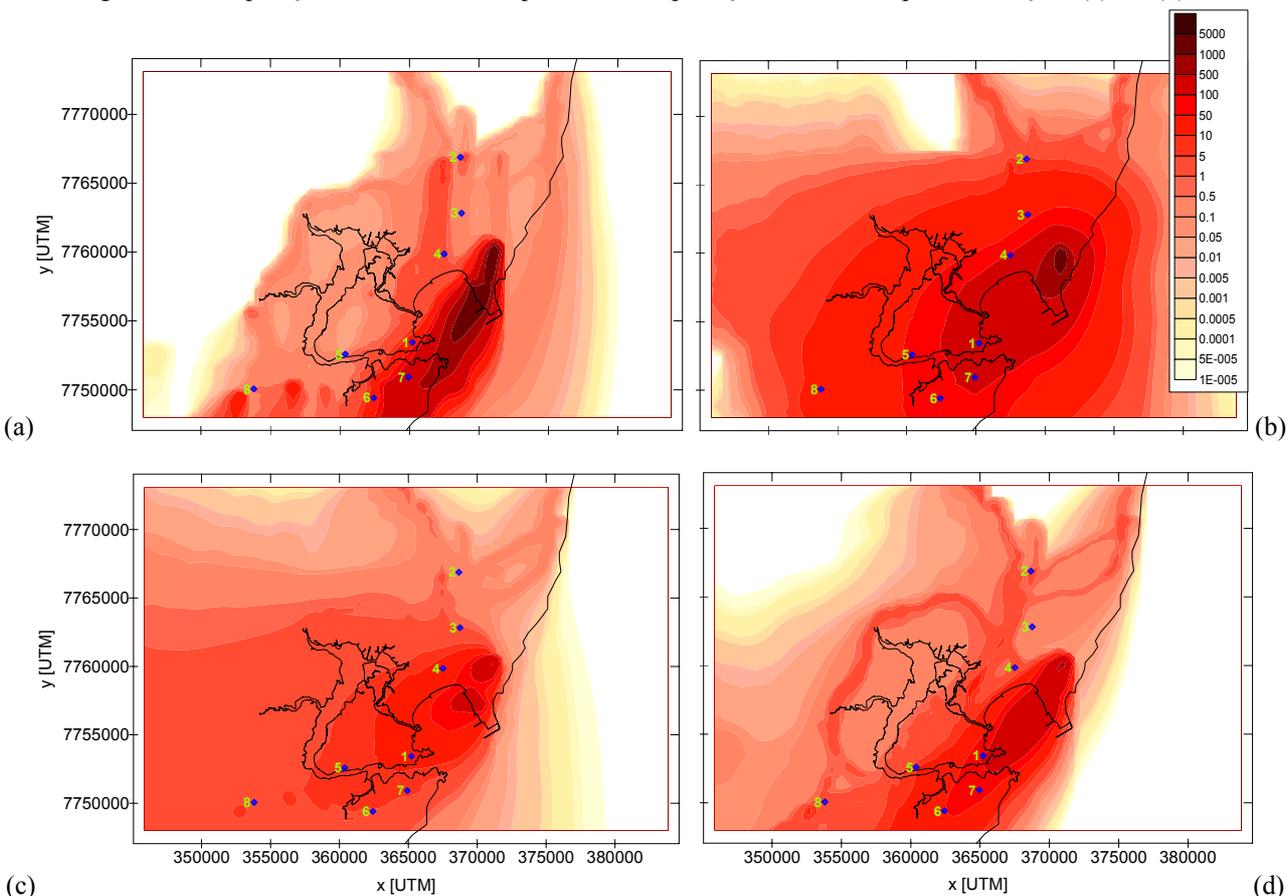
A figura 5 apresenta uma comparação entre os resultados experimentais e os resultados das previsões do modelo. Por limitações de espaço somente os resultados das estações 2 (fig.5a) e 4 (fig.5b) serão apresentados. Enquanto as estações 1 e 6 apresentaram um comportamento mais similar a estação 4 (previsões com melhor acurácia) a estação 3 apresentou comportamento similar a estação 2 (previsões com menor acurácia). Pode-se notar que o modelo é capaz de prever de maneira relativamente adequada a variação diária dos níveis de concentração, porém existem grandes erros na predição da magnitude na concentração nas estações. A fig. 6 apresenta a distribuição de concentrações ao nível do solo para um período de 24 horas em intervalos de 3 horas. Pode-se observar na fig. 6 que as estações 1 e 6 são mais fortemente influenciadas pela pluma de poluentes geradas pelas fontes fixas na Ponta de Tubarão devido a direção

predominante do ventos no período analisado. Por outro lado, as estações 2, 3 e 4 são mais afetadas pelas fontes móveis. Este comportamento pode indicar uma significativa inacurácia nas estimativas das fontes móveis na região.



(a) (b)

Figura 5 – Comparação entre os dados experimentais e previsões do modelo para as estações (a) 2 e (b) 4.



(a) (b) (c) (d)

Figura 6 – Evolução temporal do campo de concentração de poluentes ao nível do solo na Região da Grande Vitória para o dia 20/10/2000: (a) 00:30, (b) 06:30, (c) 12:30 e (d) 18:30.

Uma outra causa provável para a baixa acurácia obtida nas estações 2, 3 e 4 poderia estar relacionada a imperfeições na geração do campo de ventos. Estudos anteriores (Reis et al., 2002 e Abboud et al., 2003) apresentaram resultados satisfatórios para a predição do campo de ventos na RGV com base na utilização do modelo de diagnostico baseado em conservação da massa. Todavia estes autores reportam desvios médios para a direção do vento obtida numericamente de aproximadamente  $19^\circ$  em relação aos valores observados, para medições efetuadas em diversos pontos da região de estudo. Enquanto os valores de módulo de velocidade apresentam um desvio médio de 0,33 m/s. Estas discrepâncias podem afetar a acuidade das predições da dispersão de poluentes. Entretanto a magnitude desta influência deve ser investigada *a posteriori*.

Pode-se notar que na fig. 6 que a distribuição espacial de poluentes varia de maneira considerável durante o dia, não apenas pela variação da direção do vento, mas também pela variação da intensidade de emissão de fontes móveis e pela variação das condições de estabilidade atmosférica. É possível notar que a dispersão dos poluentes é significativamente

maior durante o dia, quando predominam as condições instáveis na atmosfera. Durante a noite, apesar da redução a emissão dos veículos automotores, os níveis máximos de concentração apontados pelo modelo são consideravelmente maiores.

O ciclo diário de aquecimento e resfriamento da superfície provoca modificações grandes na dispersão de poluentes. Um dos efeitos mais importantes deste ciclo é a variação da altura da camada de inversão durante o ciclo diário, limitando de maneira significativa a dispersão vertical de poluentes. Uma das simplificações utilizadas pelo modelo é a utilização de uma altura constante para a camada de inversão (1500 m). Assim, os valores de concentração obtidos podem estar subestimados devido a uma superestimação da dispersão vertical de poluentes na região, uma vez que a altura da camada de inversão pode variar de 2000 m durante o dia a 200 m ou menos durante a noite.

## 5. Conclusões e recomendações para trabalhos futuros

Um modelo de dispersão de poluentes na atmosfera baseado nas equações fundamentais de transporte foi apresentado neste trabalho. O modelo é empregado uma abordagem baseada na conservação de massa utilizando dados meteorológicos para a determinação do campo de velocidades e utiliza correlações empíricas para a determinação dos coeficientes de difusão turbulenta para a atmosfera. Para analisar a acurácia do modelo e sua aplicabilidade a situações reais foi selecionado o estudo de caso da dispersão de NO<sub>x</sub> na região metropolitana da Grande Vitória, no Espírito Santo - Brasil.

Os resultados da comparação com dados experimentais indicam que o modelo é capaz de prever de maneira relativamente adequada a variação diária dos níveis de concentração, porém apresenta significativos erros na predição da magnitude na concentração nas estações. Três fatores podem ser apontados como prováveis causadores das falhas de predição: (i) inacurácia nas estimativas das fontes móveis na região, (ii) imperfeições na geração do campo de ventos e (iii) a utilização de uma altura constante para a camada de inversão, superestimando a dispersão vertical de poluentes na região. O modelo apresenta um avanço em relação aos modelos simplificados, como os modelos de pluma gaussiana. Todavia, os resultados apresentados aqui são preliminares, muito trabalho de pesquisa ainda deve ser efetuado para conseguir melhor acurácia das predições, principalmente nos tópicos apresentados acima.

## 6. Referências

- Abboud, H. J., Reis, N. C. Jr., Silveira, A. B., Santos, J. M., "Reconstrução do campo de vento Tridimensional em regiões de topografia complexa usando clusters de computadores", XXIV CILAMCE, Ouro Preto, 2003.
- Anagnostopoulos, J. S., Bergeles, G., "A numerical model for wind field and pollutant concentration calculations over complex terrain Application to Athens, Greece", *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, Volume 73, Issue 3, 4 March 1998, Pages 285-306
- Brown, M. J., Arya, S. P., Snyder, W.H., 1993. Vertical dispersion from surface and elevated release. An investigation of a non-Gaussian plume model. *Journal of Applied Meteorology* 32, 1263 –1280.
- Carvalho, J.C., Anfossi, D., Trini Castelli, S., Degrazia, G.A., "Application of a model system for the study of transport and diffusion in complex terrain to the TRACT experiment", *Atmospheric Environment* 36 (2002) 1147 –1161.
- Ferziger, J. H., Peric, M., "Computational Methods for Fluid Dynamics", Springer-Verlag, Berlin, 1999.
- Hanna, S. R., "Applications in Air Pollution Modelling", em "Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling" editado por F. T. M. Nieuwstadt e H. van Dop, Atmospheric Sciences Library, 1981.
- Jiang, D., Liu, H., Wang, W., 2001, "Test a modified surface wind interpolation scheme for complex terrain in a stable atmosphere", *Atmospheric Environment*, 35, pp. 4877-4885.
- Montero, G., Sanín, N., 2001, "3-D modelling of wind field adjustment using finite differences in a terrain conformal coordinate system", *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 89, pp.471-488.
- Patankar, V. S., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation, USA.
- Prabha, T.V., Mursch-Radlgruber, E., "Investigation of air pollution distribution in Linz: case studies to evaluate a K-type diffusion model coupled with a mass-consistent wind model", *Atmospheric Environment*, Volume 33, Issues 24-25, October 1999, Pages 4067-4080
- Queiroz, R. S. e Santolim, L. C. D. Rede Otimizada para o Monitoramento da Qualidade do Ar da Grande Vitória – ES. Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 1997.
- Ratto, C.F., 1996b, "An overview of mass-consistent models", In "Modelling Atmospheric Flow Fields", Ed. by C.F. Ratto & D.P. Lalas, World Scientific Publishing, pp. 379-401.
- Reis, N. C. Jr., Silva, A., Santos, J.M., Chacaltana, J.T.A., "Reconstrução do Campo de Ventos Tridimensional sobre Regiões de Topografia Complexa", Encontro Nacional Ciência Térmicas 2002, Caxambu, 2002.
- Seinfeld, J. H., Pandis, S. N., "Atmospheric Chemistry and Physics", John Wiley and Sons Inc., New York, 1998.
- Sherman, C.A., 1978, "A mass-consistent model for wind fields over complex terrain", *J. Appl. Meteorol.*, 17, pp. 312-319.
- Subhlok, J., Steenkiste, P., "Airshed pollution modelling in HPF stile environment", *Journal of Parallel and Distributed Computing*, 60, pp. 690-715, 2000.
- Zan'netti, P., "Air pollution Modeling", Computational Mechanics Publications, Southampton, 1990.