

IV.3 Modelo AERMOD

IV.3.1 Fundamentos

O AERMOD é um modelo de dispersão de base no algoritmo gaussiano, que incorpora alguns aspectos importantes:

- modelação do terreno sem descontinuidades terreno plano/elevado utilizando o conceito da linha de divisão;
- efeito da camada limite urbana para o período nocturno;
- efeito de estruturas no escoamento atmosférico(edifícios e extremidade da chaminé);
- consideração de uma não homogeneidade vertical na atmosfera;
- modelação da dispersão na CLC segundo o Modelo PDF.

Adicionalmente, o AERMOD apresenta uma grande flexibilidade na definição de fontes e receptores e de características de emissão.

Como não são modelados os aspectos da deposição húmida e seca e da reactividade de poluentes o AERMOD é utilizado preferencialmente para a modelação de poluentes conservativos. É incluído um algoritmo para lidar com mecanismos de remoção de poluentes através de decaimento exponencial.

O processamento do AERMOD consiste no cálculo, com base na definição de receptores, características das fontes, condições meteorológicas e de terreno, de concentrações em receptores para cada hora, realização de médias de concentrações e cálculo de máximos de concentrações considerando todo o período de dados. O cálculo de médias de concentrações e de máximos determina que o AERMOD possa ser utilizado para apoio à decisão de licenciamento, devido à possibilidade de cálculo de concentrações para os períodos especificados em legislação.

A execução do programa é realizada através do executável Aermod.exe.

IV.3.2 Dados necessários

IV.3.2.1 Ficheiros de dados

As condições meteorológicas são fornecidas pelos dois ficheiros produzidos pelo AERMET: ficheiro de parâmetros de camada limite, ficheiro de variáveis em vários níveis de altitude.

As condições de terreno, consistem em elevações de base para os receptores e fontes e de escalas de altura para cada receptor, e estão contidas em ficheiros originados pelo AERMAP. Estas informações também poderão ser incluídas no ficheiro de instruções e sem a intervenção do AERMAP se o utilizador tiver disponíveis os valores de elevação e de escalas de altura para receptores e fontes.

No caso de modelação em terreno plano são apenas necessários os ficheiros de dados meteorológicos.

IV.3.2.2 Ficheiro de instruções

Para a execução do AERMOD é necessário o fornecimento de algumas informações respeitantes a poluentes a modelar e períodos para a realização de médias de concentrações, opções de processamento, receptores, fontes, meteorologia e de tipos de ficheiros de dados a produzir pelo AERMOD. Estas informações são apresentadas em registos de *keywords* e agrupadas pela sua função segundo *pathways*:

- CO – opções de modelação;
- SO – informações relativas às fontes de poluentes;
- RE – informações relativas aos receptores;
- ME – informações relativas aos dados meteorológicos;
- OU – opções de saída de dados.

As informações incluídas no *pathway* CO são apresentadas no Quadro IV.10.

Quadro IV.10 : Informações contidas no *pathway* CO do AERMOD e *keywords* utilizadas na sua definição (U.S. EPA, 1998a).

Informações	Keywords
Informações a serem incluídas no cabeçalho do ficheiro de saída, em uma ou duas linhas (pode ser utilizado para identificação da execução do programa)	TITLEONE TITLETWO
Opções do gerais de modelação	MODELOPT
Períodos para o cálculo de médias de concentração:	AVERTIME
- Período em horas (1 a 24);	
- Mensais;	
- Todo o período de dados.	
Modelação da dispersão em meio urbano; especifica-se a população da zona urbana	URBANOPT
Identificação do poluente a modelar	POLLUTID
Parâmetros para a consideração de decaimento exponencial: meia-vida ou coeficiente de decaimento; coeficiente de decaimento = 0.693/meia-vida	HALFLIFE DCAYCOEF
Altura dos receptores acima do nível do solo; esta informação deve ser especificada para que o AERMOD possa considerar receptores elevados acima do solo	FLAGPOLE
Nomes de ficheiros para armazenar resultados intermédios e o número de dias de intervalo entre operações de cópia sucessivas	SAVEFILE
Indica o nome do ficheiro de resultados temporários para a inicialização do AERMOD	INITFILE
Realização (parâmetro RUN) ou não (parâmetro NOT) do cálculo de concentrações	RUNORNOT
Nome de ficheiro a produzir pelo o AERMOD para entrada no modelo AERMODEV*	EVENTFIL
Realização de análises multi-anos para o poluente PM-10	MULTYEAR
Realização de um ficheiro de resultados intermédios para a análise do funcionamento do programa	DEBUGOPT
Nome do ficheiro para escrita de mensagens	ERROFIL

* este modelo ainda não se encontra desenvolvido

As opções gerais de modelação, especificadas pela *keyword* MODELOPT, são indicadas pelos seguintes parâmetros:

- DFAULT – utilização das opções de processamento consideradas internamente no AERMOD:
 - contabilização do efeito da extremidade da chaminé na dispersão;
 - processamento de situações de calma e de valores em falta;
 - terreno elevado;

- utilização de um tempo de meia vida de 4 horas para o SO₂ no caso de modelação em meio urbano (especificação da keyword URBANOPT) e de modelação conservativa para outros poluentes;
- estimativas de concentrações superiores para edifícios cuja largura é maior que a altura em mais de 5 vezes.
- CONC – modelo calcula concentrações de poluente em receptores;
- FLAT – considera-se terreno plano;
- NOSTD – não é contabilizada a influência da extremidade da chaminé na dispersão;
- NOCHKD – não é realizada a verificação de dados para os ficheiros de dados meteorológicos não sequenciais;
- NOWARN – suprime o relato detalhado das mensagens de aviso no principal ficheiro originado pelo AERMOD;
- SCREEN – os cálculos do modelo representam valores para a linha central da pluma; esta opção destina-se a utilizar em avaliação preliminar de impactes numa interface em Windows que ainda não está desenvolvida, não sendo recomendável, segundo o Manual de Utilizador do AERMOD, a utilização desta opção para outros fins

Se não se tiver especificado a opção DFAULT e a opção NOSTD também não o efeito da extremidade da chaminé é contabilizado.

Qualquer poluente poderá ser indicado para a modelação, mas apenas poderá ser modelado um poluente por execução do AERMOD o que determina que não possam ser contabilizadas interações entre poluentes. O nome do poluente não tem influência no processamento excepto se se trata de SO₂, para o qual poderá ser utilizada a modelação utilizando decaimento exponencial, com um tempo de meia-vida de 4 horas quando se modela contabilizando a dispersão nocturna em meio urbano e as opções de processamento do parâmetro DFAULT na keyword MODELOPT, e PM₁₀ ou PM-10, para o qual poderão ser realizadas médias de concentrações num período de vários anos.

Dado que a execução do AERMOD pode ser muito intensiva em termos de tempo o utilizador poderá especificar a opção de serem guardados, com uma determinada frequência, resultados intermédios num ou dois ficheiros específicos de modo a que se ocorrer uma interrupção da execução do programa o AERMOD possa inicializar variáveis a partir dos resultados armazenados.

Tal como no caso do AERMAP e AERMET o utilizador pode especificar que o AERMOD execute avaliando apenas as informações do ficheiro de instruções e que não seja realizado processamento de dados.

Durante a execução do programa AERMOD podem ser originadas mensagens para o utilizador, quer devido a anomalias nos dados ou instruções de entrada, quer a acções realizadas pelo AERMOD de que o utilizador deve ter conhecimento. Estas mensagens são apresentadas detalhadamente no ficheiro especificado na keyword ERROFIL.

As informações relativas às fontes de poluente incluem a sua localização, tipo, parâmetros de emissão, informação relativa a edifícios que estejam próximo e que possam influenciar a dispersão e a opção de utilização de consideração de fontes em meio urbano. Apresenta-se no Quadro IV.11 as informações que podem ser especificadas no pathway SO.

Quadro IV.11 : Informações contidas no *pathway* SO do AERMOD e *keywords* utilizadas na sua definição (U.S. EPA, 1998a).

Informações	Keywords
Agrupamento de fontes para as quais deve ser considerado o efeito cumulativo de concentrações	SRCGROUP
Localização (coordenadas UTM ou definidas pelo utilizador), tipo de cada fonte	LOCATION
Parâmetros de emissão para cada fonte, conforme o tipo	SRCPARAM
Factores de emissão que variam: conforme a hora do dia, mês, estação, velocidade e estabilidade e por horas do dia e por estação	EMISFACT
Alteração da unidade em que serão apresentados os resultados no ficheiro de saída; é fornecido um factor que deverá ser multiplicado às unidades de taxa de emissão para se obter a unidade pretendida	EMISUNIT
Nome de ficheiro contendo características de emissão horárias para dias específicos e determinada fonte ou fontes	HOUREMIS
Alturas de edifícios em redor de cada fonte para direcções de 10 em 10° para um compasso completo, iniciadas na direcção 10° a oeste da direcção Norte	BUILDHGT
Larguras de edifícios em redor da fonte projectadas para as direcções de 10 em 10° para um compasso completo, iniciadas na direcção 10° a oeste da direcção Norte	BUILWID
Nome do ficheiro onde se encontram informações relativas ao <i>pathway</i> SO; o ficheiro para fontes produzido pelo AERMAP deverá ser especificado deste modo	INCLUDED

As fontes poderão ser dos mesmos tipos suportados pelo AERMAP (Secção IV.1.2).

Os parâmetros de emissão que devem ser especificados incluem a taxa de emissão de poluente e a altura de emissão. Para o caso de fontes pontuais deverão ser indicados ainda a temperatura dos gases emitidos, a velocidade de saída de gases e o diâmetro interno da chaminé. A especificação de taxa de emissão variável, segundo a hora do dia, mês ou estação do ano, estação do ano e hora do dia ou por categorias de velocidade do vento, é realizada por factores que serão multiplicados pela taxa de emissão, indicada na *keyword* SRCPARAM. No caso das categorias de vento são consideradas pelo AERMOD 6 categorias com limites superiores de 1.54, 3.09, 5.14, 8.23 e 10.8, para as primeiras 5 categorias, com os limites incluídos nas categorias, e a seguinte categoria incluindo todas as velocidades superiores a 10.8.

O ficheiro contendo emissões horárias para dias específicos, deverá conter taxas de emissão horárias e para fontes pontuais a temperatura e a velocidade de saída da chaminé. Os dias especificados deverão corresponder aos dias de dados meteorológicos fornecidos ao AERMOD.

No caso de ser utilizado um ficheiro externo contendo informações sobre fontes estas informações deverão estar dispostas de acordo com as regras de disposição das informações no ficheiro de instruções. Não é necessário que o ficheiro inclua todas as informações necessárias para o *pathway* SO, ou seja, algumas informações poderão estar contidas no ficheiro externo e outras no ficheiro de instruções. As fontes poluentes poderão ser agrupadas em grupos; dentro de cada grupo o AERMOD considera o efeito cumulativo da poluição das fontes.

As informações contidas no *pathway* RE incluem a definição da localização dos receptores, da elevação da sua base e da escala de altura para cada um. Os receptores podem ser discretos ou em redes, do modo definido para o AERMAP (Secção IV.1.2). Apresentam-se no Quadro IV.12 as informações que devem ser incluídas neste *pathway* e *keywords* associadas.

Quadro IV.12 : Informações contidas no *pathway* RE do AERMOD e *keywords* utilizadas na sua definição (U.S. EPA, 1998a).

Informações	Keywords
Definição de rede de receptores cartesiana	GRIDCART
Definição de rede de receptores polar	GRIDPOLR
Definição de receptor discretos cartesianos	DISCCART
Definição de receptor discretos polares	DISCPOLR
Definição de receptores cartesianos discretos agrupados em arcos	EVALCART
Nome do ficheiro contendo informações sobre receptores de um ficheiro externo	INCLUDED

Os receptores definidos com a keyword EVALCART só são considerados se for solicitada uma opção especial no *pathway* OU (EVALFILE), caso contrário o agrupamento não é considerado.

As informações de meteorologia contidas no *pathway* ME consistem nos nomes dos ficheiros de dados meteorológicos, na identificação das estações de medição em que os dados meteorológicos foram obtidos, na identificação do período para o qual os dados devem ser processados e na especificação de valores necessários ao processamento. Igualmente, poderá ser especificada uma correcção ao valor da direcção do vento, o que pode ser de utilidade se o utilizador tiver conhecimento da ocorrência de um erro sistemático nas medidas de direcção do vento. Apresentam-se no Quadro IV.13 o sumário das informações que são agrupadas no *pathway* ME, juntamente com as keywords utilizadas na sua definição.

Quadro IV.13 : Informações contidas no *pathway* ME do AERMOD e *keywords* utilizadas na sua definição (U.S. EPA, 1998a).

Informações	Keywords
Nome do ficheiro contendo os parâmetros de camada limite	SURFILE
Nome do ficheiro contendo dados para vários níveis de altitude, definindo perfis verticais de parâmetros	PROFFILE
Características da estação de medição de dados de superfície NWS: identificação, ano a que referem os dados, localização	SURFDATA
Características da estação de medição de dados de sondagem: identificação, ano a que referem os dados, localização	UAIRDATA
Características da estação de medição de dados locais: identificação, ano a que referem os dados, localização	SITEDATA
Elevação de base para o cálculo de perfil de temperatura potencial pelo AERMOD; deve corresponder à elevação de base da estação meteorológica principal	PROFBASE
Período de dados que são lidos pelo AERMOD	STARTEND
Período de dados processados pelo AERMOD	DAYRANGE
Alteração dos limites superiores das primeiras 5 categorias de vento para as quais se especificam factores de emissão para as fontes	WINDCATS
Especifica a alteração dos valores de direcção de vento num determinado ângulo	WDROTATE

Os resultados da modelação do AERMOD podem ser apresentados de modos diferentes no ficheiro produzido pelo programa: valores máximos por período de média e por receptor, valores máximos por período de média e para o conjunto de todos os receptores, valores de concentração para cada dia e para cada receptor.

Adicionalmente poderá ser especificada a produção de ficheiros específicos para determinados fins.

Apresenta-se no Quadro IV.14 as informações que podem ser incluídas no *pathway* OU.

Quadro IV.14 : Informações contidas no *pathway* OU do AERMOD e *keywords* utilizadas na sua definição (U.S. EPA, 1998a).

Informações	Keywords
Resultados contendo concentrações máximas por receptores e por período de média	RECTABLE
Resultados contendo concentrações máximas por período de média e para o conjunto de todos os receptores	MAXTABLE
Resultados contendo concentrações para cada dia e para cada receptor	DAYTABLE
Ficheiro com a ocorrência de violações a um determinado valor especificado pelo utilizador	MAXIFILE
Ficheiro com os valores de concentração não processados para cada receptor, com o objectivo de servir de base a um processamento posterior	POSTFILE
Ficheiro com valores máximos com colunas de coordenadas e de valores para cada receptor, com o objectivo de servir de base à realização de gráficos de contornos	PLOTFILE
Ficheiros não formatados de resultados não processados acima de um valor mínimo com uma estrutura especial para utilizar-se com a componente TOXXST do modelo TOXX	TOXXFILE
Ficheiro de resultados por escalão para a realização de gráficos de escalões	RANKFILE
Ficheiro contendo as concentrações máximas para cada arco de receptores (especificados com a keyword EVALCART no pathway RE) e para cada hora processada, destinado a estudos de avaliação do modelo	EVALFILE

* deve ser especificada primeiro a keyword MAXTABLE

As regras específicas para a organização das informações nos registos das *keywords* e no *pathways* podem ser encontradas no Manual de Utilizador do AERMET (U.S. EPA, 1998a).

IV.3.3 Processamento de dados

O programa AERMOD pode-se considerar dividido em duas partes. Numa primeira fase, a chamada interface meteorológica, calculam-se perfis verticais de direcção e velocidade do vento, temperatura, gradiente vertical de temperatura potencial, turbulência vertical (σ_w) e horizontal (σ_v), a partir dos dados fornecidos pelo preprocesador meteorológico AERMET. A segunda fase corresponde ao modelo de qualidade do ar propriamente dito.

O processamento de dados realizado em cada uma das fases é descrito de seguida.

IV.3.3.1 Interface Meteorológica

Para a modelação da qualidade do ar é necessário o cálculo de perfis de variáveis meteorológicas em altura, que são utilizados para a contabilização do carácter não homogéneo na vertical da Camada Limite. Neste procedimento das variáveis são obtidas para um conjunto de níveis especificados no AERMOD (Anexo V), com base nas medições disponíveis das variáveis e considerando uma determinada forma do perfil vertical dessas variáveis.

O valor da variável para o nível pretendido é obtido da forma descrita de seguida.

- o nível onde se pretende o valor da variável encontra-se entre dois níveis de medições:
 - 1 - calcula-se o valor no nível pretendido por interpolação linear entre os dois valores medidos;
 - 2 – calcula-se o valor do parâmetro no nível pretendido pela expressão de perfil esperado;
 - 3 – calcula-se o valor do parâmetro nos dois níveis de medição utilizando a expressão do perfil esperado, e interpola-se linearmente o valor da grandeza para o nível pretendido;
 - 4 – calcula-se a razão entre o valor obtido em 2 e o valor obtido em 3 e aplica-se ao valor obtido em 1.
- o nível pretendido encontra-se acima/abaixo do último/primeiro valor medido, respectivamente, é considerado o procedimento seguinte:
 - 1 – persiste-se o valor do último/primeiro nível de medição até ao nível pretendido;
 - 2 – calcula-se o valor do parâmetro no nível pretendido pela expressão do perfil esperado para essa grandeza;
 - 3 – o valor da grandeza no último/primeiro nível de medição é calculado com base na expressão para o perfil esperado;
 - 4 – aplica-se ao valor obtido em 1 a razão entre os valores obtidos em 2 e 3.

Para a aplicação deste procedimento é necessária a existência de pelo menos um nível de medição para cada parâmetro.

Para a realização dos cálculos considera-se que a Camada Limite é estável se $L > 0$ e convectiva se $L < 0$. Tal como considerado no AERMET a altura da Camada

Limite é considerada como sendo: a altura mecânica para a CLE, a altura máxima entre a altura mecânica e convectiva para a CLC.

Apresentam-se nas secções seguintes as expressões descritoras dos perfis esperados para os vários parâmetros.

IV.3.3.1.1 Perfil de velocidade e direcção do vento

Apresentam-se no Quadro IV.15 as equações descritoras do perfil vertical esperado para a velocidade e direcção do vento.

Quadro IV.15 : Equações de perfil esperado para a velocidade e direcção do vento.

Parâmetro	Camada Limite Conectiva	Camada Limite Estável
Velocidade do vento	$z < 7 z_0 :$ $u = u\{7z_0\} \left[\frac{z}{7z_0} \right] \quad (\text{IV.44}) \quad (\text{Cimorelli et al., 1998})$	
	$7 z_0 \leq z \leq z_i :$ $u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_o} \right) - \Psi_m \left\{ \frac{z}{L} \right\} + \Psi_m \left\{ \frac{z_0}{L} \right\} \right] \quad (\text{IV.45}) \quad (\text{Cimorelli et al., 1998})$	
	$z > z_i :$ $u = u\{z_i\}$	
	$\Psi_m \left\{ \frac{z}{L} \right\}$ obtido pela Equação IV.23 substituindo z_{ref} por z	$\Psi_m \left\{ \frac{z}{L} \right\} = -17 \left[1 - \exp \left(-0.29 \frac{z}{L} \right) \right]$ (IV.46) (Cimorelli et al., 1998)
	$\Psi_m \left\{ \frac{z_0}{L} \right\}$ obtido pela Equação IV.24	$\Psi_m \left\{ \frac{z_0}{L} \right\} = -17 \left[1 - \exp \left(-0.29 \frac{z_0}{L} \right) \right]$ (IV.47) (van Ulden e Holtslag, 1985)
Direcção do vento	Acima da medição mais alta: valor da medição mais alta Abaixo da medição mais baixa: valor da medição mais baixa Entre medições: valor obtido por interpolação	

Para situações em que se têm z/L pequenos ($\ll 1$) a equação IV.47 reduz-se à forma de $\Psi_m = -\beta_m z/L$, expressa na Equação IV.36, com $\beta_m = 4.93$. Para grandes z/L (> 1) e alturas superiores a 200 m o Ψ_m dado pela Equação IV.47 aproxima melhor as observações de vento que o mesmo parâmetro obtido pela Equação IV.36, segundo van Ulden e Holtslag (1985).

IV.3.3.1.2 Perfil do gradiente de temperatura potencial e da temperatura potencial

O perfil vertical de temperatura potencial é importante para a modelação da dispersão devido a ser utilizado para o cálculo da elevação da pluma. No AERMOD este é calculado com base no gradiente de temperatura potencial. Apresentam-se no Quadro IV.16 as expressões utilizadas para este efeito.

Quadro IV.16 : Expressões de perfil esperado para o gradiente vertical de temperatura potencial e para a temperatura potencial.

Grandeza	Camada Limite Convectiva	Camada Limite Estável
Gradiente de temperatura potencial	$z \leq z_i : \frac{d\theta}{dz} = 0.0$ (Cimonelli et al., 1998)	$z \leq z_{Tref} : \frac{d\theta}{dz} = \frac{\theta_{*p}}{k(z_{Tref})} \left[1 + \frac{5(z_{Tref})}{L} \right]$ (IV.48) (Cimorelli et al., 1998)
	$z_i < z \leq z_i + 500m :$	$z_{Tref} < z \leq 100m : \frac{d\theta}{dz} = \frac{\theta_{*p}}{kz} \left[1 + \frac{5z}{L} \right]$ (IV.49) (Cimorelli et al., 1998)
	$\frac{d\theta}{dz} = \text{valor calculado pelo AERMET}$	$z > 100m :$
	$z > z_i + 500m : \frac{d\theta}{dz} = 0.005 \text{ K/m}$ (Hanna e Chang, 1991)	$\frac{d\theta}{dz} = \frac{d\theta\{100m\}}{dz} \exp \left[-\frac{(z - 100m)}{0.44z_{i\theta}} \right]$ (IV.50) (Cimorelli et al., 1998)
	$\frac{d\theta}{dz} \text{ min} = 0.002\text{K/m}$ (Paine e Kendall, 1993)	$z_{i\theta} = \text{MAX}[z_{im} ; 100m]$ $\frac{d\theta}{dz} \text{ min} = 0.002\text{K/m}$ (Paine e Kendall, 1993)
Temperatura potencial	$z \leq z_{Tref} : \theta\{z + \Delta z\} = \theta\{z_{Tref}\} + \frac{d\theta}{dz} \Big _z \Delta z$ (IV.51) (Cimorelli et al., 1998)	
	$z > z_{Tref} : \theta\{z + \Delta z\} = \theta\{z\} + \frac{d\theta}{dz} \Big _z \Delta z$ (IV.52) (Cimorelli et al., 1998)	
	$\theta\{z_{Tref}\} = T_{ref} + \frac{gz_{MSL}}{C_p}$ (IV.53)	
	$\bar{z} = z + \frac{\Delta z}{2}$ (IV.54)	
	$z_{MSL} = z_{Tref} + z_{SB}$ (IV.55)	
	Δz tem valor negativo quando $z < z_{Tref}$ (Cimonelli et al., 1998)	

Os valores atribuídos ao gradiente de temperatura potencial para a CLC correspondem aos valores esperados na CLC, numa camada interfacial e na camada estável superior. O gradiente de temperatura potencial na camada interfacial é muito importante porque determina a capacidade da pluma sujeita a impulsão para entrar ou não nesta camada. O seu valor é o calculado pelo AERMET a partir da sondagem matinal em altitude, assumindo-se que o perfil de temperatura acima de z_i varia pouco durante o dia. Isto é válido apenas quando não existe subsidência significativa ou advecção de ar frio ou quente nesta camada (Cimorelli et al., 1998). A espessura de 500 m considerada para a camada interfacial foi escolhida de modo a permitir que uma camada suficiente da sondagem matinal pudesse ser utilizada no cálculo do gradiente.

Na CLE o parâmetro θ_{*p} é calculado pela Equação IV.51 com o $\frac{d\theta}{dz}$ do nível mais baixo entre z_0 e 100m, e a altura dessa medição. No caso de não existirem medições dentro desta gama de alturas θ_{*p} é considerado igual a θ_* obtido pela

substituição da Equação IV.20 na Equação IV.33. Os limites utilizados para as medições, z_0 e 100m, são utilizados para haver consistência com os limites impostos para o cálculo dos parâmetros L e u_* e de T_{ref} . Na Equação IV.50 o valor 0.44 no expoente é inferido por Cimonelli et al. (1998) a partir de experiências de Andre e Mahrt (1982).

O parâmetro $\overline{z_{SB}}$ é a altura média da fonte acima do nível médio do mar, considerando todas as fontes.

IV.3.3.1.3 Perfil de turbulência vertical

Na CLC a turbulência vertical, ou o desvio padrão da velocidade vertical (σ_{wT}) é considerada como sendo a soma de uma parte de origem convectiva (σ_{wc}) e de uma parte de origem mecânica (σ_{wm}) segundo a Equação IV.56 (Cimonelli et al., 1998).

$$\sigma_{wT}^2 = \sigma_{wc}^2 + \sigma_{wm}^2 \quad (\text{IV.56})$$

Desta forma é feita uma interpolação entre um limite mecânico de estabilidade neutral, quando $\sigma_{wT} \approx \sigma_{wm} \propto u_*$, e um limite muito convectivo, em que se tem $\sigma_{wT} \approx \sigma_{wc} \propto W_*$.

Por sua vez, σ_{wm} considera-se como sendo a soma de uma parte constituída pela turbulência mecânica na camada limite (σ_{wml}) e outra parte constituída pela turbulência mecânica acima da camada limite (σ_{wmr}). Este procedimento destina-se a satisfazer a condição de separação entre a turbulência acima de z_i e a turbulência na superfície e uma variação contínua da turbulência mecânica para z perto de z_i .

Para a CLE a turbulência vertical é apenas devido à parte de turbulência mecânica.

Apresentam-se no Quadro IV.17 as equações utilizadas no AERMOD para o perfil esperado das componentes de turbulência vertical.

Quadro IV.17: Expressões de perfil esperado para as componentes da turbulência vertical.

Parâmetro	Camada Limite Convectiva	Camada Limite Estável
σ_{wc}^2	$z \leq 0.1 z_{ic} : \sigma_{wc}^2 = 1.6 \left(\frac{z}{z_{ic}} \right)^{2/3} w_*^2$ <p>(IV.57) (Panofsky et al., 1977)</p> $0.1 z_{ic} < z \leq z_{ic} : \sigma_{wc}^2 = 0.35 w_*^2$ <p>(IV.58) (Hicks, 1985)</p> $z > z_{ic} :$ $\sigma_{wc}^2 = 0.35 w_*^2 \exp \left[- \frac{6(z - z_{ic})}{z_{ic}} \right]$ <p>(IV.59) (Cimorelli et al., 1998)</p>	---
σ_{wm}^2	$\sigma_{wm}^2 = \sigma_{wml}^2 + \sigma_{wmr}^2$ (IV.60) (Cimorelli et al., 1998)	
σ_{wml}	$z < z_i : \sigma_{wml} = 1.3 u_* \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{1/2}$ <p>(IV.61)</p> $z \geq z_i : \sigma_{wml} = 0.0$ <p>(Cimorelli et al., 1998)</p>	
σ_{wmr}	$z < z_i : \sigma_{wmr} = \sigma_{wmx} \text{Min}[z/z_i; 1.0]$ $z \geq z_i : \sigma_{wmr} = \sigma_{wmx}$ <p>(Cimorelli et al., 1998)</p> $\sigma_{wmx} = \text{m\u00e9dia das medi\u00e7\u00f5es de } \sigma_w \text{ acima de } z_i$ <p>ou (se n\u00e3o existem medi\u00e7\u00f5es) $\sigma_{wmx} = 0.02 u \{ z_i \}$</p> <p>(Cimorelli et al., 1998)</p>	

A Equa\u00e7\u00e3o IV.59 destina-se a ligar o valor de σ_{wc} verificado na CLC com o valor pr\u00f3ximo de 0 acima desta camada.

Na equa\u00e7\u00e3o IV.61, para $z=0$ obt\u00e9m-se $\sigma_{wml} = 1.3 u_*$, estando de acordo com Panofsky et al (1977).

O valor de σ_{wmx} utilizado quando n\u00e3o existem medi\u00e7\u00f5es de σ_w acima de z_i \u00e9 resultante do valor da intensidade de turbul\u00eancia (iz = σ_w/u) que se assume existir acima de $z_i - 0.02$ - um valor similar ao assumido por Gifford (1975).

A utiliza\u00e7\u00e3o das mesmas equa\u00e7\u00f5es para o c\u00e1lculo de σ_{wm}^2 para a CLC e CLE permite que se tenha continuidade da turbul\u00eancia com a aproxima\u00e7\u00e3o \u00e0 situa\u00e7\u00e3o de camada limite neutra (Cimorelli et al., 1998).

IV.3.3.1.4 Perfil de turbul\u00eancia lateral

Tal como com a turbul\u00eancia vertical, a turbul\u00eancia lateral (σ_{vT}) \u00e9 considerada no AERMOD como contendo uma componente de turbul\u00eancia de origem mec\u00e2nica (σ_{vm}) e de uma componente de turbul\u00eancia de origem convectiva (σ_{vc}), pela Equa\u00e7\u00e3o IV.62.

$$\sigma_{vT}^2 = \sigma_{vc}^2 + \sigma_{vm}^2 \quad (\text{IV.62})$$

No caso da CLE a parte convectiva não é considerada.

Apresentam-se no Quadro IV.18, as expressões que representam o perfil esperado da turbulência lateral, tendo em consideração a Equação IV.62.

Quadro IV.18 : Equações caracterizadoras do perfil esperado para as componentes da turbulência lateral.

Grandeza	Camada Limite Convectiva	Camada Limite Estável
σ_{vm}	$z \leq z_{im} : \sigma_{vm}^2 = \left[\frac{\sigma_{vm}^2 \{z_{im}\} - \sigma_{v0}^2}{z_{im}} \right] z + \sigma_{v0}^2 \quad (IV.63)$ $z > z_{im} : \sigma_{vm}^2 = \sigma_{vm}^2 \{z_{im}\}$ <p>(Cimorelli et al., 1998)</p> <hr/> $\sigma_{v0}^2 = 3.6 u_*^2 \quad (IV.64) \quad (\text{Panofsky e Dutton, 1984})$ $\sigma_{vm}^2 \{z_{im}\} = \text{Min} [\sigma_{v0}^2; 0.25 m^2 / s^2] \quad (\text{Cimorelli et al., 1998})$ $\sigma_{vm} = \text{Max} [\sigma_{vm}; 0.2 m / s; 0.05 u] \quad (\text{Cimorelli et al., 1998; Hanna, 1983})$	
σ_{vc}^2	$z \leq z_{ic} : \sigma_{vc}^2 = 0.35 w_*^2 \quad (IV.65)$ <p>(Cimorelli et al., 1998)</p> $z_{ic} < z \leq 1.2 z_{ic} : \text{variação linear entre}$ $\sigma_{vc}^2 \{z_{ic}\}, \text{ em } z_{ic}, \text{ e } 0.25 \text{ em } 1.2 z_{ic}$ <p>---</p> $z > 1.2 z_{ic} : \sigma_{vc}^2 = 0.25 m^2 / s^2$ <p>(Cimorelli et al., 1998)</p>	

A Equação IV.63 resulta da interpolação linear entre o valor de σ_{v0}^2 à superfície, tal como obtido de experiências de campo de Panofsky e Dutton (1984) para a turbulência mecânica pura, e o valor no topo da camada de mistura mecânica. O valor de $0.25 m^2/s^2$, apresentado como limite inferior de $\sigma_{vm}^2 \{z_{im}\}$, obtido durante a avaliação do AERMOD, foi considerado devido a um bom comportamento da pluma com a sua utilização, o que demonstra a existência de uma turbulência lateral acima da camada de mistura (Cimorelli et al., 1998).

No caso de existirem medições abaixo de z_{ic} , o valor da medição do nível mais baixo é persistido para baixo até à superfície e o valor da medição do nível mais alto é continuado até ao nível z_{ic} . Se o maior valor observado está acima de $1.2 z_{ic}$ este valor é continuado para cima. Entre z_{ic} e $1.2 z_{ic}$ o valor de medição de nível mais alto que esteja entre estes dois níveis é extrapolado linearmente até $1.2 z_{ic}$, com base no declive do perfil esperado (Quadro IV.18). Entre os valores de medição interpola-se linearmente.

O limite máximo para σ_{vm} deve-se ao facto de em condições de velocidade do vento muito fraca, u_* poder ser muito pequena e por isso σ_{v0} excessivamente pequena, tendo sido obtidos os valores referidos durante a fase de avaliação do AERMOD (Cimorelli et al., 1998). No cálculo do limite, u é avaliado à mesma altura que σ_{vm} .

IV.3.3.2 Modelo de Qualidade do Ar

IV.3.3.2.1 Tratamento da não homogeneidade vertical na Camada Limite

Apesar de a formulação do AERMOD utilizar apenas um parâmetro para modelar o transporte e dispersão de poluentes numa camada de ar esta formulação tem em consideração o facto de na realidade não existir uma homogeneidade vertical dos parâmetros da Camada Limite. A não existência de homogeneidade é responsável pela possibilidade de as plumas que entram na camada estável acima da Camada Limite, possam poder voltar a entrar na Camada Limite. Além disso esta característica da atmosfera é de grande importância quando se pretende modelar a libertação de poluentes realizada por fontes perto do solo, dado que o gradiente de velocidade é maior nesta zona.

A consideração de uma não homogeneidade vertical é considerada mediante o cálculo de parâmetros efectivos que caracterizam cada camada. A camada relevante para a dispersão é aquela em que a pluma poluente é transportado directamente da fonte para o receptor, isto apenas no caso de a parte reflectida da pluma no topo da Camada Limite e no solo não ser de importância significativa para a concentração no receptor. A camada assim constituída é a que se encontra entre a altura do centróide da pluma, a altura da chaminé corrigida para o efeito da extremidade da chaminé no escoamento somada da elevação da pluma (uma aproximação simplificada da altura do centro de massa da pluma) e a altura do receptor acima do nível de solo da fonte, calculada segundo Cimorelli et al. (1998).

Este procedimento é realizado para algumas das variáveis utilizadas no cálculo das concentrações: u , σ_{VT} , σ_{WT} e T_{Ly} (Cimorelli et al., 1998).

Nas secções seguintes utiliza-se a seguinte notação para se indicar um parâmetro efectivo: se α é o parâmetro, $\underline{\alpha}$ é o parâmetro efectivo correspondente.

IV.3.3.2.2 Consideração do terreno

O efeito do terreno pode provocar a existência de concentrações elevadas em receptores localizadas no perto de elevações.

A consideração do efeito do terreno no AERMOD baseia-se no conceito da linha de divisão de escoamento, descrito na Secção III.4 deste trabalho. Não são considerados pelo modelo efeitos de escoamento preferencial pelos lados da elevação que podem ocorrer em terrenos elevados.

Tendo como base o conceito da linha de divisão de escoamento o AERMOD considera que a concentração de poluente num receptor em presença de uma elevação, é a resultante de uma combinação de dois casos extremos da pluma: o estado em que o escoamento contorna a elevação, o estado horizontal característico da zona abaixo da linha de divisão, ocorrendo em condições muito estáveis; o estado em que o escoamento passa por cima da elevação, ou seja, o estado em que a pluma responde ao terreno. Neste último estado a altura da linha de divisão é igual à altura inicial, antes do efeito da elevação.

Para um receptor colocado na elevação, e que tenha uma determinada altura acima do nível do solo (z_a) os dois estados extremos da pluma têm interacções diferentes. De facto, se no caso da pluma horizontal o receptor é considerado como tendo a sua altura total (elevação do terreno somada da sua altura acima do nível do

solo), dado que a pluma embate contra a elevação (não se considera o efeito do escoamento lateral), no caso da pluma que segue o terreno, devido ao facto de a altura da linha central da pluma se manter constante, a interacção com o receptor ocorre como se o receptor estivesse localizado em terreno plano à altura z_a do solo.

No AERMOD a concentração num determinado receptor é obtida pela Equação IV.66 (Cimorelli et al., 1998).

$$C_t \{x_r, y_r, z_r\} = f_e C_h \{x_r, y_r, z_r\} + (1 - f_e) C_{rt} \{x_r, y_r, z_a\} \quad (\text{IV.66})$$

onde $C_t \{x_r, y_r, z_r\}$ é a concentração total no receptor, onde z_r é a soma da altimetria do terreno na base do receptor e de z_a , $C_h \{x_r, y_r, z_r\}$ e $C_{rt} \{x_r, y_r, z_a\}$ são as concentrações para o estado horizontal e que responde ao terreno, respectivamente, e f_e é um factor de peso.

O peso relativo da concentração verificada em cada um dos estados extremos depende da estabilidade da atmosfera, velocidade do vento e da altura da pluma relativamente ao terreno (acima ou abaixo da linha de divisão) (Cimorelli et al, 1998). f_e é calculado pela Equação IV.67 (Cimorelli et al., 1998).

$$f_e = 0.5(1 + \Phi_p) \quad (\text{IV.67})$$

A fracção da massa da pluma abaixo da linha de divisão (Φ_p) é calculada pela Equação IV.68 em relação à concentração que se verifica na ausência de elevação (Cimorelli et al., 1998).

$$\Phi_p = \frac{\int_0^{H_c} C_t \{x_r, y_r, z_r\} dz}{\int_0^{\infty} C_t \{x_r, y_r, z_r\} dz} \quad (\text{IV.68})$$

A altura da linha de divisão (H_c) é calculada pelo AERMOD considerando a Equação IV.69 (Perry, 1992) que está de acordo com a equação encontrada por Snyder et al (1985), igualando a energia cinética acima da linha de divisão à energia potencial necessária à passagem por cima da elevação.

$$\frac{1}{2} u^2 \{H_c\} = \int_{H_c}^{h_c} N^2 (h_c - z) dz \quad (\text{IV.69})$$

onde N é a frequência de Brunt-Väisälä, dada pela expressão $N = \left[\frac{g}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right]^{1/2}$, h_c é a escala de altura, calculada pelo AERMAP.

Esta definição de f_e implica que quando toda a pluma se encontra no estado horizontal, quando a atmosfera está muito estável, $\Phi_p = 1$ e $f_e = 1$, e quando $\Phi_p = 0$, ou seja, a pluma está completamente acima da linha de divisão, $f_e = 0.5$. Desta forma, a pluma nunca se comporta como estando totalmente no estado que segue o terreno, mesmo em situações de grande instabilidade.

A utilização da Equação IV.66 permite que haja um mecanismo de descrição comum de terreno elevado ou plano.

IV.3.3.2.3 Cálculo da concentração nos receptores

Para cada estado da pluma, horizontal ou que reponde ao terreno, o cálculo da concentração pelo AERMOD baseia-se na abordagem gaussiana, através da Equação IV.70, resultante da realização de um balanço de massa (Weil et al., 1997),

$$C\{x, y, z\} = \frac{Q}{u} p_y\{y, x\} p_z\{z, x\} \quad (\text{IV.70})$$

onde Q é a taxa de emissão de poluente da fonte, u é a velocidade do vento efectiva e p_y e p_z são as funções de densidade de probabilidade para o plano horizontal e vertical.

p_y é considerada gaussiana para a CLE e CLC; p_z é ainda considerada como gaussiana para a CLE, mas para a CLC não é gaussiana.

Para a determinação da concentração o AERMOD considera a existência de cinco tipos diferentes de fontes: directa, indirecta, penetrante, injectada e estável. Os três primeiros casos são os considerados no modelo PDF para a CLC (Weil et al., 1997), apresentado na Secção III.6.2. A fonte injectada é aquela em que a altura da fonte é superior a z_i , sendo modelada como uma fonte estável, devido às características de estabilidade da camada acima de z_i . A fonte estável é considerada para o caso de se ter CLE (Cimorelli et al., 1998).

A diferenciação entre CLC e CLE é realizada com base no valor de L :

- $L < 0$ tem-se CLC;
- $L > 0$ tem-se CLE.

Na CLC o cálculo da concentração é feito com base no modelo PDF (Weil et al., 1997). Desta forma a concentração num receptor é considerada como a soma das concentrações resultantes das fontes directa, indirecta e penetrante. No caso do estado horizontal da pluma isto é realizado pela Equação IV.71.

$$C_c\{x_r, y_r, z_r\} = C_d\{x_r, y_r, z_r\} + C_r\{x_r, y_r, z_r\} + C_p\{x_r, y_r, z_r\} \quad (\text{IV.71})$$

onde $C_c\{x_r, y_r, z_r\}$ é a concentração total, $C_d\{x_r, y_r, z_r\}$ é a concentração da fonte directa, $C_r\{x_r, y_r, z_r\}$ é a concentração resultante da fonte indirecta, $C_p\{x_r, y_r, z_r\}$ é a concentração da fonte penetrante.

As expressões para o cálculo da concentração são as consideradas pelo modelo PDF, excepto para o caso da pluma penetrante, que é modelada considerando a função de distribuição de probabilidade no plano vertical como gaussiana.

Apresentam-se no Quadro IV.19 as expressões utilizadas pelo AERMOD para o cálculo da concentração na CLC.

Quadro IV.19 : Expressões de cálculo da concentração para a CLC no AERMOD.

Tipo de fonte	Expressão para a concentração
Directa	$C_d \{x_r, y_r, z_r\} = \frac{Qf}{2\pi u \sigma_y} \exp\left(-\frac{y_r^2}{2\sigma_y^2}\right)$ $\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{j=1}^2 \frac{\lambda_j}{\sigma_{zj}} \left(\exp\left[-\frac{(z - 2mz_i - \Psi_j)^2}{2\sigma_{zj}^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + 2mz_i + \Psi_j)^2}{2\sigma_{zj}^2}\right] \right)$ <p style="text-align: center;">(IV.72) (Weil et al., 1997)</p> <hr/> $\Psi_{dj} = h_s + \Delta h_d + \frac{w_j x}{u} \quad \text{(IV.73), } j=1,2 \quad \text{(Weil et al., 1997)}$
Indirecta	$C_r \{x_r, y_r, z_r\} = \frac{Qf}{2\pi u \sigma_y} \exp\left(-\frac{y_r^2}{2\sigma_y^2}\right)$ $\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{j=1}^2 \frac{\lambda_j}{\sigma_{zj}} \left(\exp\left[-\frac{(z - 2mz_i + \Psi_j)^2}{2\sigma_{zj}^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + 2mz_i - \Psi_j)^2}{2\sigma_{zj}^2}\right] \right)$ <p style="text-align: center;">(IV.74) (Weil et al., 1997)</p> <hr/> $\Psi_{rj} = h_s + \Delta h_r + \frac{w_j x}{u} \quad \text{(IV.75), } j=1,2, \quad \Delta h_r = \Delta h_d - \Delta h_i$ <p style="text-align: center;">(Cimorelli et al., 1998)</p>
Penetrante	$C_p \{x_r, y_r, z_r\} = \frac{Q(1-f)}{2\pi u \sigma_{yp} \sigma_{zp}} \exp\left(-\frac{y_r^2}{2\sigma_y^2}\right)$ $\sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(\exp\left[-\frac{(z - 2mz_{ieff} - h_{ep})^2}{2\sigma_{zp}^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + 2mz_{ieff} + h_{ep})^2}{2\sigma_{zp}^2}\right] \right) \quad \text{(IV.76)}$ <p style="text-align: center;">(Cimorelli et al., 1998)</p> <hr/> <p style="text-align: center;">h_{ep} = altura da fonte penetrante (Cimorelli et al., 1998) h_s = altura da fonte corrigida para o efeito da chaminé no escoamento z_{ieff} = altura da superfície reflectora numa camada estável</p>

No cálculo de f são utilizadas as expressões de modelo PDF (Equação III.20) onde Δh_{eq} é obtido pela Equação IV.77 (Cimorelli et al., 1998),

$$\Delta h_{eq} = \left(2.6^3 P_s + (2/3)^3 \right)^{1/3} z_i' \quad \text{(IV.77)}$$

onde z_i' é obtido pela expressão (III.21) e P_s pela Equação IV.78 (Cimorelli et al., 1998),

$$P_s = \frac{F_b}{u_p N_i^2 \Delta h_h^3} \quad \text{(IV.78)}$$

onde u_p é a velocidade do vento em h_s , F_b pela Equação III.14 e N_i é dado pela Equação III.23. Nesta expressão θ_a é avaliado à altura z_i e $\frac{\partial \theta_i}{\partial z}$ é o gradiente de temperatura potencial acima na Camada Limite de z_i a z_i+500 , determinado pelo AERMET.

Para a fonte estável ou injectada a concentração é calculada pela Equação IV.79 (Cimorelli et al., 1998),

$$C_s \{x_r, y_r, z_r\} = \frac{Q}{\sqrt{2\pi} \sigma_{zs}} \cdot F_y \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\exp \left[-\frac{(z - 2nz_{ieff} - h_{es})^2}{2\sigma_{zs}^2} \right] + \exp \left[-\frac{(z + 2nz_{ieff} + h_{es})^2}{2\sigma_{zs}^2} \right] \right) \quad (IV.79)$$

onde h_{es} é a altura da fonte estável e F_y é a função de distribuição de probabilidade para o plano horizontal.

Para condições estáveis não existe um impedimento à dispersão vertical tal como é verificado na CLC, mas o nível de turbulência esperado acima da camada de mistura mecânica é demasiado baixo para que haja a mistura para cima do material da pluma (Cimorelli et al., 1998). Tendo em conta esta situação o AERMOD considera uma altura de reflexão z_{ieff} obtida pela Equação IV.80 (Cimorelli et al., 1998) .

$$z_{ieff} = MAX[(h_{es} + 2.15\sigma_{zs}\{h_{es}\}); z_{im}] \quad (IV.80)$$

Para $z_r \geq z_{ieff}$, z_{ieff} é considerado ∞ .

Na CLE é considerado o efeito do deslocamento lateral da pluma devido à mudança de direcção do vento. No AERMOD este efeito é contabilizado através de interpolação entre as funções de distribuição de probabilidade para o plano horizontal para a pluma coerente (com a velocidade média), gaussiana (F_{yC}), e a pluma aleatória (F_{yA}), obtidas pelas Equações IV.81 e IV.82 (Cimorelli et al, 1998).

$$F_{yC} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \quad (IV.81)$$

$$F_{yA} = \frac{1}{2\pi x_r} \quad (IV.82)$$

Para evitar que F_{yA} se torne muito elevado, quando se tem um receptor muito perto da fonte o seu valor é limitado ao valor de F_{yC} .

Considerando que a velocidade do vento horizontal é constituída por uma componente média e uma componente de flutuação, aleatória, existe uma parte da energia cinética do escoamento horizontal resultante da componente de flutuação (σ_r^2).

O valor de F_y é obtido por interpolação entre os valores destas duas funções considerando a fracção desta energia cinética em relação à energia cinética total do escoamento horizontal σ_h^2 , pela Equação IV.83 (Cimorelli et al., 1998),

$$F_y = F_{yC} \left(1 - \sigma_r^2 / \sigma_h^2\right) + F_{yR} \left(\sigma_r^2 / \sigma_h^2\right) \quad (\text{IV.83})$$

onde σ_h^2 e σ_r^2 são calculados de acordo com Cimorelli et al. (1998).

À medida que o tempo de viagem aumenta, a componente aleatória torna-se dominante e σ_r^2 vai-se aproximando de σ_h^2 .

IV. 3.3.2.4 Cálculo da altura da chaminé considerando o efeito da extremidade

A extremidade da chaminé provoca uma perturbação no escoamento, o que pode ter como consequência um deslocamento da pluma para baixo, fazendo aumentar as concentrações ao nível do solo a sotavento da chaminé. Adicionalmente, nesta situação de pluma pouco elevada esta pode ser mais facilmente sujeita ao efeito dos edifícios no escoamento, o que faz aumentar ainda mais as concentrações ao nível do solo.

O efeito de extremidade de chaminé na pluma só se manifesta quando o momento dos gases que saem da chaminé é insuficiente para vencer o gradiente de pressão entre o topo e o lado de sotavento da chaminé. Para que este efeito não ocorra considera-se que a relação entre a velocidade de saída dos gases e a velocidade do vento no topo da chaminé não deve ser inferior a 1.5 (Baynes, 1987).

O deslocamento da pluma para baixo, no caso de esta relação não se verificar é calculada com uma equação sugerida por Briggs (1973), Equação IV.84,

$$d = 2D(w/u - 1.5) \quad (\text{IV.84})$$

onde d é o deslocamento e D é o diâmetro interno da chaminé.

h_s é calculada no AERMOD pela Equação IV.85,

$$h_s = h + d \quad (\text{IV.85})$$

onde h é a altura real da chaminé.

IV.3.3.2.5 Cálculo dos coeficientes de dispersão

Os desvios padrões das distribuições de concentração no plano horizontal (σ_y) e vertical (σ_z) são considerados no AERMOD como resultantes do efeito conjunto da turbulência do ambiente (σ_{ya}, σ_{za}), turbulência devido à impulsão (σ_{yb}, σ_{zb}) e turbulência devido aos efeitos dos edifícios no escoamento (σ_{ye}, σ_{ze}). Nem todas estas componentes são consideradas para todos os tipos de fontes. As equações gerais para o cálculo de σ_y e σ_z no AERMOD para cada tipo de fonte são apresentadas no Quadro IV.20.

Quadro IV.20 : Equações para o cálculo de σ_y , σ_z no AERMOD, segundo o tipo de fonte (Cimorelli et al., 1998).

Fonte	Expressão para o cálculo de σ_y e σ_z
Directa	$\sigma_{yd,zd}^2 = \sigma_{yad,zad}^2 + \sigma_{bd}^2 + \sigma_{yed,zed}^2$ (IV.86)
Indirecta	$\sigma_{yr,zr}^2 = \sigma_{yar,zar}^2 + \sigma_{br}^2$ (IV.87)
Penetrante	$\sigma_{yp,zp}^2 = \sigma_{yap,zap}^2 + \sigma_{bp}^2$ (IV.88)
Estável ou Injectada	$\sigma_{ys,zs}^2 = \sigma_{yas,zas}^2 + \sigma_{bs}^2 + \sigma_{yes,zes}^2$ (IV.89)

Tipo de fonte: d=directa, r=indirecta, p=penetrante, s=estável ou injectada

As componentes da dispersão nos planos horizontal (σ_{ya}) e vertical (σ_{za}), devido à turbulência ambiente são obtidas da turbulência lateral (σ_v) e vertical (σ_w), respectivamente (Cimorelli et al., 1998)

Para as fontes na CLE e injectadas, σ_{za} é composto por uma parte de superfície, σ_{zss} , e outra de altitude, σ_{zes} , segundo a Equação IV.90.

$$\sigma_{zas} = \left(1 - \frac{h_{es}}{z_i}\right) \sigma_{zss} + \left(\frac{h_{es}}{z_i}\right) \sigma_{zes} \quad (IV.90)$$

Na CLC também são consideradas as duas componentes de superfície e de altitude de σ_{za} para o caso da fonte directa e indirecta, sendo contabilizadas através da Equação IV.91.

$$\sigma_{zaj}^2 = \sigma_{zej}^2 + \sigma_{zs}^2 \quad (IV.91)$$

A componente de altitude (σ_{zej}^2) é calculada para cada uma das componentes da função de distribuição de probabilidade que contabiliza os movimentos para baixo e cima na CLC (Cimorelli et al., 1998). O cálculo da componente de superfície (σ_{zs}^2) é realizado de modo a que se verifique $\sigma_z \propto \frac{(u_*/\underline{u})^2 x^2}{|L|}$ para σ_z para uma fonte à superfície na camada de superfície instável (Venkatram, 1992). Esta componente de superfície é nula acima da camada de superfície ($z > 0.1 z_i$) (Cimorelli et al., 1998).

Para a fonte penetrante σ_z consiste apenas na parte resultante da parte de altitude, calculada do mesmo modo que para a fonte estável, devido à sua localização acima de z_i (Cimorelli et al., 1998)

Os coeficientes de dispersão resultantes da impulsão são calculados com base na elevação da pluma (Cimorelli et al., 1998).

O efeito dos edifícios em σ_y e σ_z é contabilizado pelo AERMOD de acordo com a distância do receptor à fonte. Assim, existem três zonas de receptores, definidas tendo em conta o parâmetro L_b , o comprimento mínimo entre a largura e a altura do edifício (Cimorelli et al., 1998):

- distância à fonte menor que $3L_b$: zona da cavidade dos edifícios, não são realizados cálculos de concentração;
- distância entre $3L_b$ e $10L_b$: calcula-se σ_y e σ_z contabilizando-se o efeito dos edifícios e compara-se com os valores obtidos sem contabilizar este efeito; o AERMOD utiliza o maior valor para o cálculo da concentração.
- distância maior que $10L_b$: utiliza-se o valor de σ_{yb} e σ_{zb} calculado para $10L_b$ corrigido com o valor de σ_{yas} e σ_{zas} , respectivamente.

Para os casos de receptores localizados entre $3L_b$ e $10L_b$ é calculado um desvio padrão da função de distribuição de probabilidade para o plano horizontal e para o plano vertical de acordo que representa a acção conjunta da turbulência ambiente e do efeito dos edifícios (Cimorelli et al., 1998). Deste modo, nas equações IV.86 e IV.89 surgem apenas dois termos na soma.

IV.3.3.2.6 Cálculo da elevação da pluma

Para a fonte directa a elevação da pluma é resultante da acção conjunta fluxo de momento e de flutuação, enquanto para as fontes indirecta e penetrante apenas é contabilizado o fluxo flutuante. No cálculo da elevação da pluma nestes tipos de fontes são utilizados os algoritmos do modelo PDF: Equação III.27 para o caso da fonte directa, Equação III.37 para a fonte indirecta e equações III.45 e III.46. Em todos os casos a velocidade considerada no cálculo é $u\{h_s\}$. Para a fonte directa o raio da fonte considerado é o corrigido para o efeito da extremidade da chaminé no escoamento (Cimorelli et al., 1998).

Para a CLE, devido à existência de um gradiente vertical de temperatura potencial positivo, a flutuação da pluma diminui à medida que a pluma se eleva. O AERMOD utiliza um algoritmo em que a expressão da elevação da pluma é dada por uma expressão semelhante à utilizada para a elevação de equilíbrio da pluma num ambiente estável no modelo PDF (Equação III.22) modificada para este efeito (Weil, 1990). Neste algoritmo a elevação da pluma é calculada iterativamente, com o cálculo de valores de u e N sucessivos (Cimorelli et al., 1998). O valor assim calculado está sujeito a valores máximos obtidos da elevação final da pluma, condições neutrais e em situações de calma.

IV.3.3.2.7 Camada limite urbana

A Camada Limite Urbana é apenas contabilizada no AERMOD para o período nocturno. Esta situação caracteriza-se pela existência à noite de ar mais quente sobre a cidade que numa zona rural, devido a um arrefecimento mais lento da superfície urbana em relação à superfície. Isto ocorre devido ao facto de os edifícios, obstruindo em parte o solo, dificultarem as perdas de calor da superfície por radiação para o céu, e devido aos materiais urbanos terem uma maior capacidade térmica.

A diferença de temperatura entre a zona urbana e rural (ΔT_{u-r}) origina um fluxo vertical de calor na zona urbana, o que no AERMOD é contabilizado com um aumento

da turbulência total. O fluxo vertical de calor (H_u) é obtido pela Equação IV.92 (Cimorelli et al, 1998),

$$H_u = \alpha \rho c_p \Delta T_{u-r} u_* \quad (\text{IV.92})$$

onde α é um parâmetro que decresce linearmente entre 0.1, no centro da zona urbana, para 0 na borda desta zona.

ΔT_{u-r} é calculada pela Equação IV.93 (Cimorelli et al., 1998), obtida empiricamente a partir de observações de diferenças de temperatura para cidades canadenses realizadas por Oke (1973, 1982),

$$\Delta T_{u-r} = \Delta T_{max} \left[\ln \left(\frac{P_{pop}}{P_{pop0}} \right) + 1.0 \right] \quad (\text{IV.93})$$

onde P_{pop} é a população da zona urbana e $\Delta T_{max} = 12^\circ\text{C}$ e $P_{pop0} = 2\,000\,000$.

A altura da camada limite urbana noturna apenas devido à convecção (z_{iuc}) é calculada a partir da população da zona urbana de acordo com a Equação IV.94 (Cimorelli et al, 1998), que concorda com a relações encontradas entre a altura da camada limite urbana (z_{iu}) e dimensão (R_u) e população (P_{pop}) da cidade na análise das observações de Oke (1973, 1982): $z_{iu} \sim R_u^{1/2}$ e $R_u \sim P_{pop}^{1/2}$.

$$z_{iuc} = z_{iu0} \left(\frac{P_{pop}}{P_{pop0}} \right)^{1/4} \quad (\text{IV.94})$$

onde z_{iu0} é a altura da camada limite para P_{pop0} , considerada 500m.

O tratamento da camada limite urbana noturna é feito considerando a situação convectiva para o cálculo da escala de convectiva de velocidade, no cálculo da turbulência vertical e lateral, na consideração da z_{iuc} como superfície reflectora dos poluentes e no tratamento da pluma penetrante. Os factores de dispersão e a elevação da pluma são calculados como fonte estável mas assumindo, no primeiro caso, uma camada limite neutral. No cálculo da concentração não é considerado o efeito do deslocamento no plano horizontal para a linha central da pluma, dado que se assume que a camada limite urbana se comporta como uma camada convectiva fraca nesse aspecto, para qual esse efeito não é significativo (Cimorelli et al, 1998).

IV.3.4 Organização do AERMOD

O código base para a criação do executável do AERMOD (Aermod.exe) é constituído pelo programa AERMOD, por subrotinas associadas e por ficheiros contendo declaração de variáveis.

Durante a execução do programa são geradas, tal como nos preprocessadores mensagens de três tipos, informativas, de aviso e de erros, resultando estas últimas na interrupção do processamento dos dados.

À semelhança com o AERMAP e o AERMET as acções realizadas pelo AERMOD podem-se agrupar numa fase de préprocessamento e numa fase de processamento.

Na fase de préprocessamento incluem-se as seguintes acções:

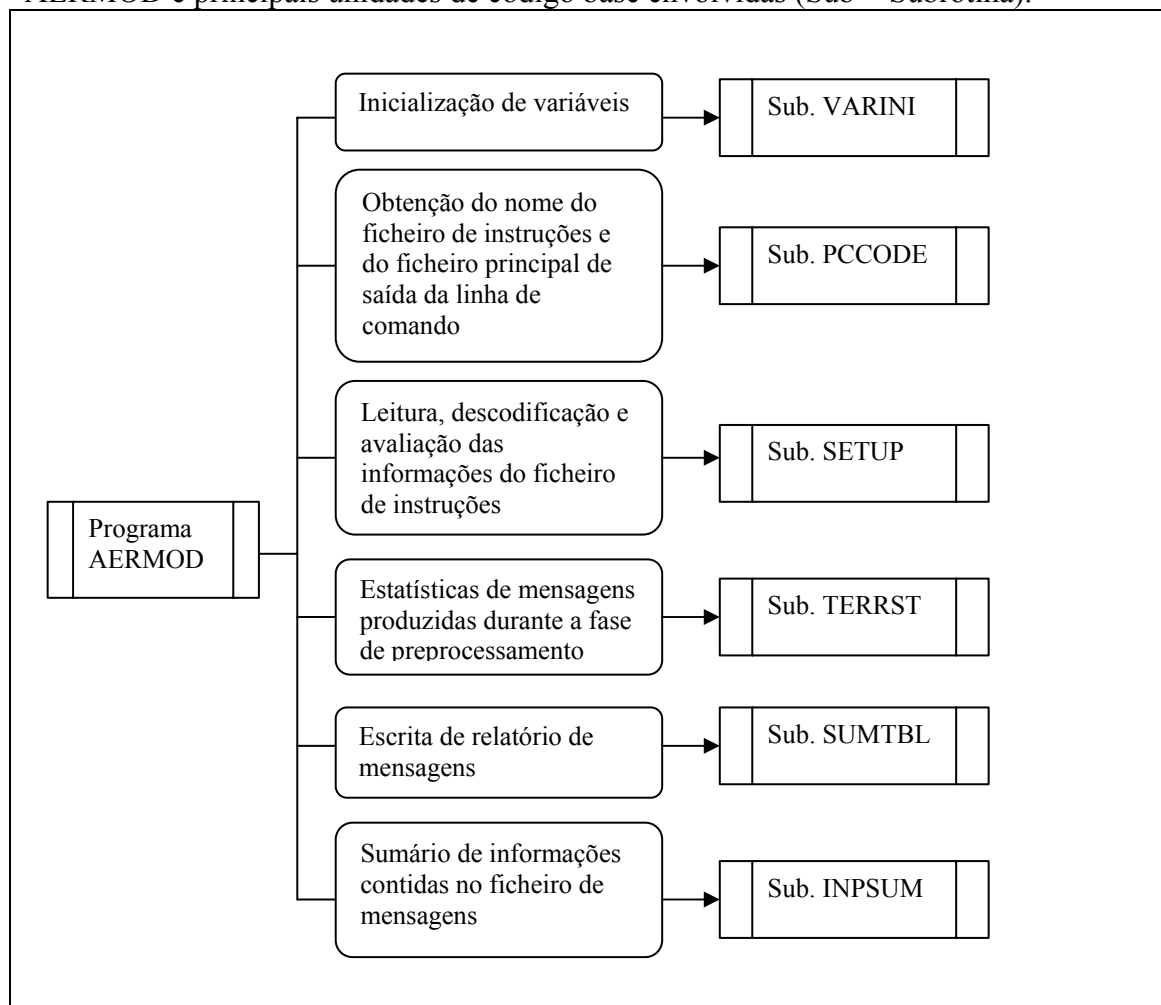
- inicialização das variáveis a utilizar durante a execução;
- obtenção do nomes dos ficheiros de instruções e do ficheiro principal a produzir pelo programa;
- decodificação das informações contidas no ficheiro de instruções de acordo com o *pathway* – nesta fase é também feita uma avaliação das informações fornecidas, nomeadamente quanto aos valores dos parâmetros das fontes;
- realização de uma estatística das mensagens geradas;
- relatório das mensagens para o ficheiro principal produzido pelo programa - se tiverem sido geradas mensagens de erro e se o utilizador tiver especificado a execução do programa não deve incluir o processamento de dados, ou seja, deve incluir apenas a fase de processamento;
- escrita do sumário de informações incluídas no ficheiro de entrada para o ficheiro principal produzido pelo programa – apenas se não tiverem sido detectados erros na fase de préprocessamento;

Apresenta-se na Figura IV.8 o esquema simplificado das acções realizadas na fase de préprocessamento do AERMOD e as principais unidade de código base envolvidas.

Na fase de processamento o AERMOD realiza as seguintes acções:

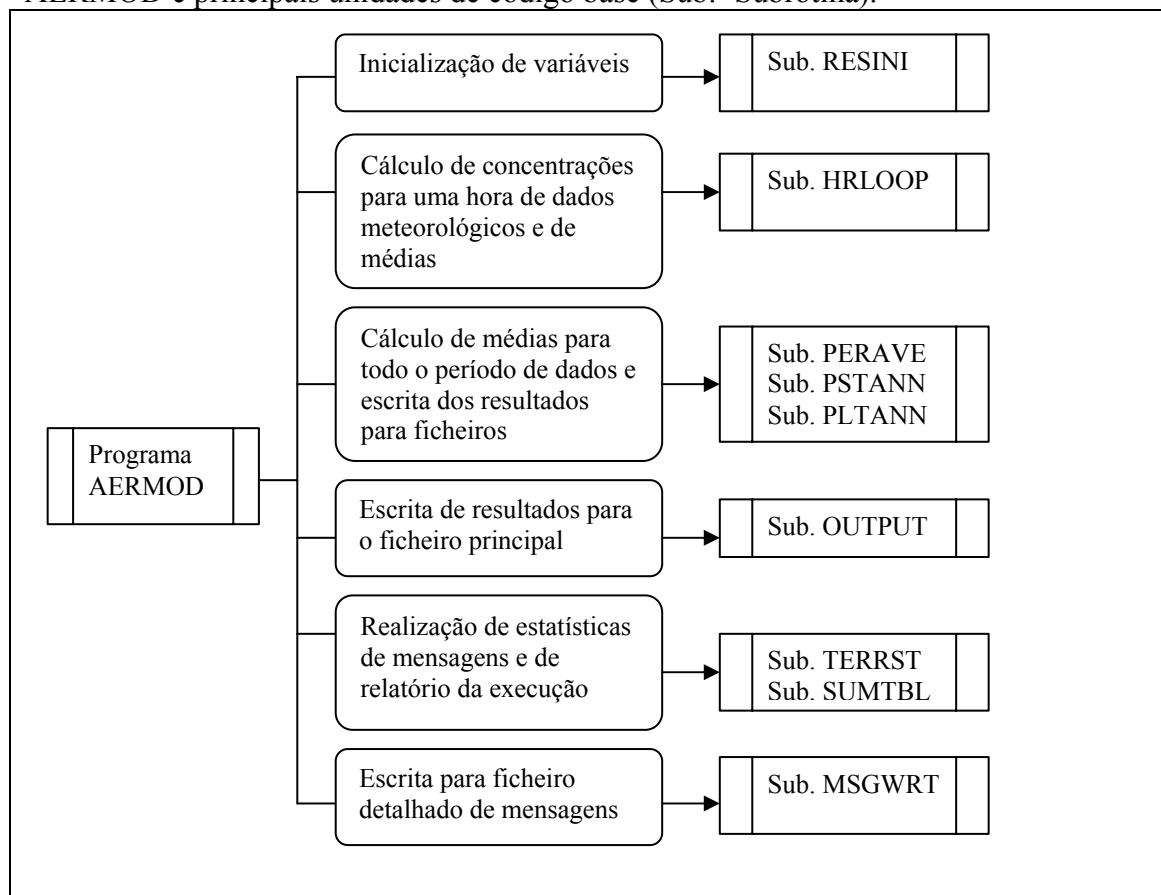
- reinicialização das variáveis com os valores contidos em ficheiro específico – esta acção é realizada apenas se especificada pelo utilizador;
- obtenção, a partir do ficheiro de dados meteorológicos, de uma hora de dados;
- avaliação dos dados para detecção de situações de calma e de dados em falta;
- cálculo de perfis dos parâmetros;
- obtenção de parâmetros das fontes;
- cálculo de concentrações;
- cálculo de médias;
- escrita dos resultados para o ficheiro principal e para os ficheiros específicos solicitados;
- realização de estatísticas de mensagens e de relatório para o ficheiro principal;
- escrita de estatísticas de mensagens pormenorizadas no ficheiro de mensagens – apenas se este ficheiro tiver sido especificado (*keyword* ERRORFIL no *pathway* CO no ficheiro de entrada).

Figura IV.8 : Esquema das acções realizadas na fase de préprocessamento do AERMOD e principais unidades de código base envolvidas (Sub = Subrotina).



As principais acções realizadas na fase de processamento do AERMOD são apresentadas na Figura IV.9, juntamente com as principais unidades de código base.

Figura IV.9 : Esquema das principais acções realizadas na fase de processamento do AERMOD e principais unidades de código base (Sub.=Subrotina).



Em Apêndice, no Documento 3, encontra-se uma lista funcional das principais unidades de código base necessárias à construção do executável do AERMOD.