

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA
CENTRO DE CIÊNCIAS NATURAIS E EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM METEOROLOGIA**

**EMPREGO DE UM MODELO DE DISPERSÃO
TURBULENTO NO ESTUDO DA UNIVERSALIDADE
DA TAXA DE DISSIPACÃO DA ENERGIA**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Juliana Bittencourt Gonçalves

**Santa Maria, RS, Brasil
2010**

**EMPREGO DE UM MODELO DE DISPERSÃO
TURBULENTO NO ESTUDO DA UNIVERSALIDADE DA
TAXA DE DISSIPACÃO DA ENERGIA**

por

Juliana Bittencourt Gonçalves

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Meteorologia, Área de concentração em Micrometeorologia, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Meteorologia

Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia

Santa Maria, RS, Brasil, 2010.

**Universidade Federal de Santa Maria
Centro de Ciências Naturais e Exatas
Programa de Pós-Graduação em Meteorologia**

A comissão Examinadora, abaixo assinada,
aprova a Dissertação de Mestrado

**EMPREGO DE UM MODELO DE DISPERSÃO TURBULENTO NO
ESTUDO DA UNIVERSALIDADE DA TAXA DE DISSIPACÃO DA
ENERGIA**

elaborada por
Juliana Bittencourt Gonçalves

Como requisito parcial para a obtenção do grau de
Mestre em Meteorologia

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia
(Presidente/Orientador)

Prof. Dra Débora Regina Roberti (UFSM)

Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho (UFPeI)

Santa Maria, 13 de agosto de 2010.

**Este trabalho é dedicado aos meus pais, aos meus irmãos
e às minhas filhas Stefanny e Kétlyn pela compreensão
e o apoio constante.**

AGRADECIMENTOS

Agradeço especialmente ao meu orientador Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia, pela sua orientação e por ter permitido compartilhar de sua experiência profissional e pelo incentivo e grande apoio durante o curso de mestrado.

À Prof. Dr^a. Simone Erotildes Teleginski Ferraz, pela sua disposição para solucionar eventuais problemas surgidos, pela amizade e apoio.

À Prof. Dr^a. Débora Regina Roberti e a Andréa Ucker Timm pelos conhecimentos transmitidos e pela amizade e apoio.

Ao Prof. Dr. Jonas da costa Carvalho pelo apoio essencial na elaboração desta dissertação.

Ao grupo de professores do PPGMET.

Ao Conselho Nacional de Pesquisas (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro.

Aos amigos e colegas dos cursos de graduação e pós-graduação da meteorologia, pelo convívio e amizade.

Aos meus queridos pais, pelo amor, compreensão e pela base educacional.

Aos meus 'anjinhos', minhas filhas Stefanny e Kétlyn por compreenderem a ausência da mamãe.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

A Deus.

RESUMO

Dissertação de Mestrado
Programa de Pós-Graduação em Meteorologia
Universidade Federal de Santa Maria

EMPREGO DE UM MODELO DE DISPERSÃO TURBULENTO NO ESTUDO DA UNIVERSALIDADE DA TAXA DE DISSIPÇÃO DA ENERGIA

AUTORA: JULIANA BITTENCOURT GONÇALVES
ORIENTAÇÃO: PROF. Dr. GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA
Local e data da defesa: Santa Maria, 13 de agosto de 2010.

Neste estudo foram empregadas diferentes funções de autocorrelação e expansões em série de Maclaurin na derivação de expressões que descrevem a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Estas expressões apresentam a mesma forma funcional, porém são descritas em termos de diferentes coeficientes numéricos. Os valores obtidos para os coeficientes numéricos foram empregados em um modelo de dispersão estocástico Lagrangiano para simular a dispersão de contaminantes na Camada Limite Planetária (CLP). Os resultados das simulações foram comparados com dados de concentração do experimento de Copenhagen. O bom desempenho da parametrização e a análise através de índices estatísticos permitiram concluir que as relações matemáticas que descrevem a taxa de dissipação da turbulenta, apresentam uma incerteza. A análise desenvolvida nesse estudo permite concluir que não existe uma forma funcional universal descrevendo a taxa de dissipação de energia turbulenta.

Palavras-chave: taxa de dissipação de energia turbulenta, funções de autocorrelação, modelos de dispersão estocásticos Lagrangianos.

ABSTRACT

Dissertação de Mestrado
Programa de Pós-Graduação em Meteorologia
Universidade Federal de Santa Maria

EMPLOYING A TURBULENT DISPERSION MODEL TO STUDY THE UNIVERSALITY OF DISSIPATION RATE

AUTORA: JULIANA BITTENCOURT GONÇALVES

ORIENTAÇÃO: PROF. Dr. GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA

Local e data da defesa: Santa Maria, 13 de agosto de 2010.

This study employed different autocorrelation functions and Maclaurin series expansions in the derivation of expressions describing the dissipation rate of turbulent kinetic energy. These expressions have the same functional form, but are described in terms of different numerical coefficients. The values obtained for the numerical coefficients were used in a Lagrangian stochastic dispersion model to simulate the dispersion of contaminants in the Planetary Boundary Layer (PBL). The simulation results were compared with concentration data observed in the Copenhagen experiment. The good performance of the parameterization and analysis through statistical indices showed that the mathematical relationships that describe the turbulent dissipation rate present an uncertainty. The analysis developed in this study indicates that there is no a universal functional form describing the dissipation rate of turbulent energy.

Keywords: dissipation rate of turbulent energy, autocorrelation functions, Lagrangian stochastic dispersion models.

LISTA DE FIGURAS

- FIGURA 2.1 – Forma do espectro de energia para uma turbulência bem desenvolvida. Adaptada de Möller e Silvestrine, 2004.....26
- FIGURA 5.1 – Área do experimento de Copenhagen. O eixo x está apontando para Leste, o eixo y para norte e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos em três arcos concêntricos em relação à fonte. O contaminante foi liberado de uma altura de 115m na posição $(x, y) = (0,0)$. Foram instalados e distribuídos aproximadamente 20 sensores ao longo de cada arco. A linha cheia indica o litoral de Øresund(extraído de Gryning e Lyck, 1998).....66
- FIGURA 5.2 – Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando-se $n_c = 2$ 71
- FIGURA 5.3 – Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando-se $n_c = 3$ 72
- FIGURA 5.4 – Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando-se $n_c = 4$ 72
- FIGURA 5.5 – Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando-se $n_c = 10$ 73

LISTA DE TABELAS

TABELA 5.1 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Copenhagen.....	67
TABELA 5.2 – Comparação entre os valores de concentração observados com os valores de concentração simulados a partir das diferentes magnitudes do coeficiente numérico n_c	69
TABELA 5.3 – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para as simulações empregando os diferentes valores de n_c	70

LISTA DE SÍMBOLOS E SIGLAS

a_i - coeficiente *damping*

$A_d(z)$ - probabilidade de ocorrência das áreas ocupadas por *downdrafts*

$A_u(z)$ - probabilidade de ocorrência das áreas ocupadas por *updrafts*

b - coeficiente que representa a difusão molecular

C - concentração média

C_0 - concentração observada

C_s - concentração simulada

C_0 - constante de Kolmogorov

CLC - camada limite convectiva

CLE - camada limite estável

CLN - camada limite neutra

CLS - Camada limite superficial

CLP - camada limite planetária

$D_L(\tau)$ - função de estrutura Lagrangiana

FA2 - fator dois

FB - erro fracional

FS - desvio padrão fracional

FDP - função densidade de probabilidade

$(f_m^*)^{n+s}$ - frequência do pico espectral da estratificação neutra

$(f_m)_i$ - frequência do pico espectral para componente genérica da velocidade turbulenta

$(f_m^*)_i^c$ - frequência reduzida do pico espectral convectivo

$F_L(n)$ - espectro de energia Lagrangiano normalizado pela variância de velocidade

f_c - parâmetro de Coriolis

h - altura da Camada Limite Planetária

K - coeficiente de difusão turbulento

K_z - coeficiente de difusão turbulento na direção vertical

L - comprimento de Monin-Obukhov

m_p - massa da partícula

n - frequência em Hertz

n_c - coeficiente numérico

N_p - número de partículas

N_{PEF} - número de partículas emitidas da posição da fonte

N_{PVS} - número de partículas no sensor

$N_{\Delta t}$ - número de passos no tempo

NMSE - erro quadrado médio normalizado

P_E - função densidade de probabilidade Euleriana

$P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$ - função densidade de probabilidade (FDP)

Q - taxa de emissão da fonte

R - coeficiente de correlação

R_{Li} - função de correlação

S - termo de fonte

$S_L(n)$ - função densidade espectral na frequência n

SF6 - sulfurhexaflorídrico

t' - tempo posterior

t^* - tempo para o qual $\rho_{Li}(t^*) \approx 0$

T - período de uma oscilação

TDET - teoria da difusão estatística de Taylor

T_{Li} - escala de tempo de decorrelação Lagrangiana

T_{Lu} - escala de tempo de decorrelação Lagrangiana horizontal na direção u

T_{Lv} - escala de tempo de decorrelação Lagrangiana horizontal na direção v

T_{Lw} - escala de tempo de decorrelação Lagrangiana vertical

U - velocidade média do vento na direção zonal

U_i - velocidade média do vento

u_i - flutuação da velocidade devido à turbulência

u_* - velocidade de fricção local

$(u_*)_0$ - velocidade de fricção superficial

$\overline{V^2}$ - variância de uma componente da velocidade turbulenta

V_f - volume da fonte

V_s - volume do sensor

ω - frequência em radianos por segundo

w_* - escala de velocidade convectiva

$\overline{(w'\theta'_v)_0}$ - fluxo de calor superficial

z - coordenada cartesiana (direção vertical)

- altura arbitrária

z_i - altura da Camada Limite Planetária

z_0 - comprimento de rugosidade aerodinâmico

SÍMBOLOS GREGOS:

α, β - coeficientes de transporte de difusão

$\delta(g)$ - delta de Dirac

δ_{ij} - delta de Kronecker

ε - taxa de dissipação de energia cinética turbulenta

γ - constante do espectro

$(\lambda_m)_{u,v,w}$ - comprimento de onda do pico espectral nas componentes u, v, w

k - constante de Von karman ($\kappa = 0,4$)

θ_v - temperatura potencial virtual

Λ - comprimento de Monin-Obukhov local

ρ_{Li} - coeficiente de correlação

σ_u - variância da velocidade horizontal turbulenta

σ_v - variância da velocidade horizontal turbulenta

σ_w - variância da velocidade vertical turbulenta

σ_i^2 - variância da velocidade do vento turbulenta

ϕ_ε - taxa de dissipação adimensional na camada superficial

$\Phi_L(\omega)$ - função densidade espectral na frequência ω

τ - intervalo de tempo

τ_k - escala de tempo de Kolmogorov

ψ_ε - função de dissipação adimensional

$\xi(t)$ - função aleatória

Δt - passo no tempo

SUMÁRIO

1.INTRODUÇÃO.....	16
2. CONSIDERAÇÕES GERAIS.....	19
2.1 Camada Limite Planetária (CLP)	19
2.2. Estrutura e Condições de Estabilidade na LP.....	20
2.2.1 Camada limite superficial (CLS).....	20
2.2.2 Camada limite convectiva (CLC).....	20
2.2.3 Camada limite estável ou noturna (CLE).....	21
2.2.4 Camada limite neutra (CLN).....	21
2.2.5 O comprimento de Obukhov.....	21
2.3 Turbulência.....	22
2.3.1 Irregularidade.....	22
2.3.2 Difusibilidade.....	23
2.3.3 Ocorre a altos números de Reynolds.....	23
2.3.4 A turbulência é um fenômeno altamente dissipativo.....	23
2.3.5 A turbulência é um fenômeno contínuo.....	24
2.3.6 A turbulência é um fenômeno imprevisível.....	24
2.4 Espectro de Energia Turbulenta.....	25
2.5 Modelos para a Difusão de Contaminantes na Atmosfera.....	27
2.5.1 Eulerianos.....	27
2.5.2 Lagrangianos.....	27
2.5.3 Gaussianos.....	28
2.5.4 Estocásticos Lagrangianos.....	28

3. GRANDEZAS QUE CARACTERIZAM OS PROCESSOS DE DISPERSÃO E DERIVAÇÕES PARA A TAXA DE DISSIPACÃO DA ENERGIA TURBULENTA.....	31
4. MODELOS DE DISPERSÃO ESTOCÁSTICOS LAGRANGIANOS.....	44
4.1 Movimento Browniano.....	44
4.2 Modelos de Dispersão Estocásticos Lagrangianos.....	45
4.3 O Modelo de Langevin.....	46
4.3.1 Turbulência não-homogênea e Gaussiana.....	48
4.3.2 Turbulência não-homogênea e não-Gaussiana.....	51
4.3.3 Função Densidade de Probabilidade (FDP).....	54
4.4 Cálculo da Concentração de Contaminantes em um Modelo Estocástico Lagrangiano.....	57
5.SIMULAÇÕES COM O MODELO DE DISPERSÃO LAMBDA E COMPARAÇÕES COM O EXPERIMENTO DE COPENHAGEN.....	59
5.1 Modelo de Dispersão LAMBDA.....	59
5.2 Parâmetros Utilizados na Simulação.....	61
5.3 Experimento de Copenhagen.....	64
5.4 Resultados Obtidos.....	67
6.CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	73
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	74

INTRODUÇÃO

Com o advento da era industrial geraram-se mudanças drásticas no meio ambiente devido à emissão contínua de poluentes para a atmosfera. Os problemas resultantes da poluição do ar afetam os ecossistemas e são de difícil descrição. Isto levou a comunidade científica a tentar explicar a dispersão de poluentes e desenvolver estratégias que possibilitem prever e reduzir os efeitos negativos dos contaminantes no equilíbrio dos ecossistemas. Cientistas do IPCC (Painel Intergovernamental de Mudanças Climáticas) chegaram à conclusão de que um dos problemas causadores do desequilíbrio dos ecossistemas é acúmulo de poluentes lançados na atmosfera.

Partindo destes fatos, nota-se a importância em se estudar o efeito da poluição na atmosfera. Isto exige um conhecimento detalhado da evolução temporal da camada limite planetária (CLP) e da turbulência que ocorre no seu interior.

Devido às dificuldades observacionais, principalmente associadas aos altos custos, o transporte de poluentes na atmosfera é normalmente estudado através de modelos matemáticos. Na literatura existem muitos modelos baseados em aproximações Lagrangianas e Eulerianas que permitem estudar a dispersão de contaminantes.

Ao estudarmos a CLP, percebemos a sua complexidade, principalmente seus campos de vento e a turbulência que se apresentam na forma não-homogênea (variações espaciais), não-estacionária (variações temporais) e gaussiana ou não-gaussiana (distribuição do campo de velocidade), assim a análise dos processos físicos que ocorrem na baixa atmosfera são fatores essenciais para o estudo da dispersão de contaminantes. Como o transporte das partículas de contaminantes é provocado pela dispersão das partículas de fluido, os modelos de dispersão estocásticos Lagrangianos constituem uma ferramenta adequada para descrever a difusão turbulenta na CLP. Nestes modelos, os deslocamentos das partículas são produzidos por velocidades aleatórias cuja evolução é um processo de Markov, ou seja, um processo estocástico que tem memória zero do passado e um futuro que é função do presente e algumas regras de transição (Rodean 1996). Neste trabalho, será utilizado o modelo de partículas Lagrangiano LAMBDA (Ferrero et al. 1995) que é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para calcular a concentração de contaminantes (Thomson, 1987). Neste método, é derivada a hipótese de que a velocidade é dada pela combinação de dois termos, um

determinístico e outro aleatório. Cada uma das partículas move-se de acordo com parâmetros atmosféricos que descrevem o transporte e a turbulência. A estimativa da concentração é possível a partir da distribuição espacial das partículas em cada ponto do domínio de cálculo e em um dado instante.

O modelo LAMBDA, utilizado para as simulações deste trabalho, é um modelo tridimensional para simular a dispersão de poluentes sobre terreno plano. Este modelo utiliza um determinado número de partículas fictícias para descrever a dinâmica da atmosfera. Estas partículas permitem compreender os processos físicos que ocorrem nas partículas reais. Acompanhando-se a trajetória de um conjunto de partículas liberadas continuamente através de uma fonte, pode-se calcular a concentração de poluentes na atmosfera. As trajetórias descritas pelas partículas são simuladas numericamente a partir do campo de velocidade e das propriedades físicas do escoamento. Então pode-se determinar a concentração de poluentes pela distribuição espacial das partículas em um certo volume a cada passo no tempo.

A CLP normalmente é turbulenta. Pelo fato de escoamentos turbulentos serem dissipativos (Tennekes e Lumley, 1973), a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta (ε) por unidade de massa do fluido é um parâmetro físico importante na descrição de qualquer escoamento turbulento. Além de seu uso na definição das propriedades do espectro de energia da turbulência, no subintervalo inercial, a magnitude de ε compõe as parametrizações que descrevem o transporte turbulento na CLP. Existem algumas formulações alternativas para se representar a taxa de dissipação ε .

A seguinte relação para a taxa de dissipação da turbulência (Hinze, 1975; Arya, 1999; Pope, 2000; and Yeung, 2002),

$$\varepsilon = \frac{n_c \sigma^2}{C_0 T_L} \quad (1.1)$$

onde σ^2 é a variância de velocidade, T_L é a escala de tempo integral Lagrangiana, C_0 é a constante de Kolmogorov e n_c é um coeficiente numérico, estabelece uma premissa fundamental na teoria da turbulência bem desenvolvida. A Eq. (1.1) mostra que a dissipação é diretamente proporcional à energia disponível, e inversamente proporcional à evolução temporal dos turbilhões mais energéticos. Portanto, a razão representada na Eq. (1.1) mostra que a ordem de magnitude de ε é fornecida pelas quantidades que caracterizam os turbilhões mais energéticos. A formulação (1.1) com valor de $n_c = 2$ tem sido exaustivamente

empregada em parametrizações da turbulência e aplicada em modelos de dispersão estocásticos Lagrangianos (Thomson, 1987; Luhar e Britter, 1989; Weil, 1990; Sawford, 1991; Pope, 1994; Wilson e Sawford, 1996; Du, 1997; Ferrero e Anfossi, 1998a, b; Yeung, 2002). Apesar da expressão (1.1) ser muito utilizada, uma análise proposta por Degrazia et al. (2005) mostrou que a escolha da função de autocorrelação para a velocidade turbulenta, pode definir outras magnitudes para n_c .

O objetivo deste trabalho é empregar funções conhecidas de autocorrelação e expansões em séries de Maclaurin, para derivar expressões da forma da Eq. (1.1) contendo diferentes magnitudes do coeficiente numérico n_c . Um objetivo adicional é utilizar estes diferentes coeficientes numéricos para simular numericamente a dispersão de contaminantes na CLP.

Esta dissertação está estruturada em seis capítulos: no segundo capítulo é apresentada uma descrição geral da CLP e dos modelos de dispersão. No terceiro capítulo, são descritas as grandezas que caracterizam os processos de dispersão e as derivações para o coeficiente numérico n_c , utilizando-se diferentes funções de autocorrelação. No quarto capítulo é feita uma descrição dos modelos estocásticos Lagrangianos e do modelo LAMBDA, no capítulo cinco são apresentados os resultados das simulações numéricas empregando-se o modelo de dispersão LAMBDA e as comparações com o experimento de Copenhagen. No capítulo seis discutem-se os resultados e apresentam-se as conclusões.

CONSIDERAÇÕES GERAIS

2.1 Camada Limite Planetária

Quando se considera a influência da superfície terrestre e os seus efeitos no movimento do ar, costuma-se dividir a atmosfera em duas partes: a camada limite planetária, justaposta à superfície terrestre, cuja rugosidade natural afeta profundamente o escoamento do ar, e a atmosfera livre logo acima da CLP onde se admite que a atmosfera não sofre a influência direta da superfície (escoamento sem atrito).

Em mecânica dos fluidos, define-se camada limite como a região de escoamento onde existe um intenso gradiente de velocidade, forçando as componentes deste campo a convergirem para zero quando se aproximam de uma superfície rígida ou interface entre dois meios (Landau, Lifshits, 1959). Esta definição leva em consideração apenas o forçante mecânico, ou seja, o cisalhamento do campo de velocidade do vento. Na troposfera, próximo à superfície da Terra, há formação da camada limite, na qual além do cisalhamento do vento deve-se considerar os efeitos térmicos gerados pelo aquecimento da superfície devido à incidência de radiação eletromagnética proveniente do sol. Assim, quando considera-se esse forçante adicional, define-se CLP como a região da atmosfera que tem seu regime de escoamento influenciado pela presença da superfície e pelo aquecimento (ou resfriamento) dos níveis inferiores da atmosfera.

Ainda, a partir de Stull, 1988, a CLP é definida como a região da atmosfera que sofre influência direta da superfície e responde a forçantes superficiais com uma escala de tempo de aproximadamente uma hora ou menos. A espessura dessa camada é muito variável podendo atingir desde algumas centenas de metros a poucos quilômetros, e depende de condições como cobertura de nuvens, quantidade de radiação recebida pela atmosfera, estação do ano, etc. O escoamento atmosférico na CLP é essencialmente turbulento e o número de Reynolds (Re) é da ordem de 10^7 . Por isso ainda pode-se ter uma outra definição para a CLP de acordo com a turbulência: CLP é a porção da atmosfera onde os efeitos diretos da superfície sobre o processo de transporte turbulento são apreciáveis (Businger, 1981). Próximo à superfície terrestre, o predomínio é da turbulência mecânica. Progressivamente, porém, à medida que a altura aumenta, a convecção torna-se a principal fonte da turbulência. Esta desenvolve importante papel na dinâmica da atmosfera, já que muitos processos de trocas entre a

atmosfera e o solo e processos de dissipação de energia cinética turbulenta, ocorrem na CLP. Neste caso, então o transporte de calor ocorre pelo efeito difusivo da turbulência de origem térmica. As massas de ar quente que se elevam a partir da superfície (gradiente de transporte positivo) são chamadas termas, turbilhões ou vórtices.

Durante o período diurno, a CLP se aquece em resposta ao aquecimento da superfície. Durante a noite, a camada sofre um resfriamento, onde a turbulência é gerada mecanicamente pelo cisalhamento do vento.

Algumas quantidades como calor, umidade, momentum e contaminantes são transportados na baixa atmosfera, na horizontal pelo vento médio (advecção) da ordem de 2m/s a 10m/s, e na vertical pela turbulência. Movimentos turbulentos podem ser entendidos como uma condição irregular do fluxo do ar, no qual vários elementos apresentam variação aleatória no tempo e no espaço. Ele pode ser visualizado como uma superposição de vórtices, cujos tamanhos são variáveis da ordem de 1mm a 2000m de diâmetro.

Como a CLP está em contato direto com a superfície, nela encontra-se a maior parte das fontes naturais e antropogênicas de contaminantes, sendo uma região onde os poluentes lançados sofrem as primeiras transformações ao serem transportados pelo vento e pela turbulência.

2.2 Estrutura e Condições de Estabilidade da CLP

A CLP é classificada em algumas categorias de acordo com a condição de estabilidade:

2.2.1 Camada limite superficial (CLS)

É a região da CLP, onde os fluxos turbulentos variam menos que 10% de sua magnitude (Stull, 1988). É nessa camada que a interação entre a atmosfera e a superfície terrestre é fortemente sentida. Esta camada estende-se como uma função da estabilidade atmosférica variando de 10m e 100m.

2.2.2 Camada limite convectiva (CLC):

Surge com o aquecimento diurno da superfície devido à circulação convectiva. Nesta camada a taxa de variação da temperatura potencial é negativa, ou seja, ela diminui com a altura, indicando atmosfera instável. Neste caso a turbulência é mais intensa.

2.2.3 Camada limite estável ou noturna (CLE)

É determinada pelo resfriamento noturno da superfície. Nesta condição a taxa de variação da temperatura potencial é positiva, ou seja, a temperatura aumenta com a altura, o que implica em uma atmosfera estável, onde a turbulência é reduzida. Esta camada é formada por pequenos turbilhões que agem localmente, e os forçantes superficiais propagam-se lentamente ao longo da camada.

2.2.4 Camada limite neutra (CLN)

Nesta camada, a taxa de variação da temperatura potencial é nula. A atmosfera mantém a turbulência e esta fase ocorre principalmente durante a transição do dia para a noite.

Para descrever a estabilidade atmosférica é importante ter-se um parâmetro que indique a condição da camada limite atmosférica como um todo. Isto é fornecido por um parâmetro de estabilidade estabelecido por Obukhov (1954).

2.2.5 O comprimento de Obukhov

Em 1954, Monin e Obukhov propuseram a teoria da similaridade e introduziram dois parâmetros de escala, independentes da altura da camada. Uma velocidade característica, a velocidade de fricção (u_e) e um comprimento característico chamado comprimento de Obukhov (L) definido como.

$$L = - \frac{(u_*)^3}{k \left(\frac{g}{\theta_v} \right) (\overline{w'\theta'})_0} \quad (2.1)$$

onde:

k é a constante de Von Karman;

θ_v é a temperatura potencial virtual;

u_* a velocidade de fricção na superfície;

$\overline{w'\theta'}$ o fluxo de calor superficial.

O comprimento de Obukhov é um parâmetro de escala que é usado na camada superficial. Ele representa a altura acima da superfície na qual há equilíbrio entre a turbulência produzida termicamente e a turbulência produzida mecanicamente.

2.3 Turbulência

O estudo dos movimentos turbulentos na atmosfera, ocasionou mudanças revolucionárias em nosso conhecimento, permitindo avanços importantes no entendimento da dispersão de contaminantes na atmosfera.

O escoamento do ar na baixa troposfera tem um comportamento turbulento. A turbulência é um processo físico, através do qual perturbações infinitesimais das partículas de fluido são amplificadas exponencialmente devido à instabilidades dinâmicas do escoamento. Essa condição de instabilidade ocorre quando os termos viscosos, responsáveis pela dissipação térmica da energia, são muito menores que os termos não lineares das equações básicas.

A turbulência atmosférica representa um processo de transporte devido à intensa variabilidade das componentes da velocidade turbulenta, que proporciona uma constante mistura entre as camadas adjacentes de fluido e que, assim, têm suas propriedades misturadas. Este é um processo análogo àquele que causa difusão molecular de quantidades devido à agitação térmica das moléculas. Entretanto, como a intensidade das flutuações turbulentas é muito maior do que a que caracteriza a agitação molecular, o transporte turbulento também é muito mais efetivo do que o molecular.

Dessa forma, como a superfície terrestre é dominada pela turbulência, o entendimento dos fenômenos de transporte próximos à superfície está diretamente relacionado a uma caracterização dos fluxos turbulentos.

A turbulência também pode ser entendida como um estado de um sistema dinâmico caracterizado por um gigantesco número de graus de liberdade. Observa-se a presença da turbulência em uma vasta gama de problemas práticos, como na dispersão de contaminantes. Dentre suas características, pode-se destacar:

2.3.1 Irregularidade:

Escoamentos turbulentos são de difícil predição determinística, sendo o uso de ferramentas estatísticas uma forma de análise largamente empregada na sua descrição.

2.3.2 Difusibilidade

Uma partícula de fluido marcada irá se deslocar em relação a sua posição inicial de maneira análoga a uma molécula de um gás, porém quantitativamente, de maneira muito mais intensa. Isto implica em um transporte de quantidades como matéria, *momentum*, energia na forma de calor, etc.

2.3.3 Ocorre a altos números de Reynolds

A transição de um escoamento para o regime turbulento, bem como a sua manutenção dependem da importância relativa entre os efeitos convectivos e difusivos. Os efeitos convectivos altamente não lineares, são efeitos amplificadores de perturbações e geradores de instabilidades. Por outro lado os efeitos difusivos são amortecedores ou inibidores da formação da instabilidade. O número de Reynolds é definido como a razão entre os efeitos convectivos e os efeitos difusivos. Desta forma, um escoamento só poderá transicionar ou se manter turbulento quando R_e for maior que a unidade. O R_e é definido como:

$$R_e = \frac{VL}{\nu} \quad (2.2)$$

onde, V e L são a velocidade e o comprimento na camada limite respectivamente, e os valores típicos são: $V = 5m/s$, $L = 100m$ para a camada superficial e $\nu_{ar} \cong 1,5 \times 10^{-5} m^2 s^{-1}$. Substituindo-se na Eq. (2.2) encontra-se que $R_e \approx 10^7$.

2.3.4 A turbulência é um fenômeno altamente dissipativo

O processo de dissipação viscosa da energia cinética turbulenta gerando um aumento de energia interna acontece nas altas frequências. Sabe-se ainda que em regime completamente desenvolvido toda a energia injetada no escoamento deve cascatar sobre o espectro de turbilhões até as frequências dissipativas. Para se manter o escoamento turbulento a energia precisa ser fornecida continuamente. Caso contrário, o regime turbulento entra em decaimento. Daí esta característica da turbulência.

2.3.5 A turbulência é um fenômeno contínuo

Escoamentos de fluidos newtonianos podem ser modelados utilizando-se as equações de Navier-Stokes. Se o fluido for não-newtoniano estas equações devem ser modificadas em seu termo viscoso. É importante enfatizar que estas equações modelam qualquer escoamento independentemente do regime ser ou não turbulento. Demonstra-se, inclusive que as menores escalas de comprimento da turbulência são ainda muito maiores que o livre caminho médio molecular do fluido.

2.3.6 A turbulência é um fenômeno imprevisível

Esta é uma característica relativa à nossa incapacidade de reprodução experimental. Mesmo no laboratório, sob condições extremas de controle, não é possível desenvolver duas realizações experimentais idênticas. Do ponto de vista de simulação numérica, torna-se impossível reproduzir exatamente as condições iniciais de contorno experimentadas no laboratório. Um escoamento turbulento tem, pelos efeitos não lineares, uma alta capacidade de amplificação destes pequenos erros, conduzindo a resultados completamente diferentes.

A turbulência na CLP pode ser classificada segundo os parâmetros estatísticos que a descrevem, nas seguintes três formas:

- Variações temporais: a turbulência é estacionária quando suas propriedades estatísticas não dependem do tempo. As características de um fluxo turbulento na CLP são geralmente não-estacionárias, principalmente por causa da variação diurna de temperatura. É aceitável dizer que a turbulência é estacionária quando o período de tempo considerado é suficientemente curto, durante o qual as transformações passam por estados quase estacionários.

- Variações espaciais: a turbulência é homogênea quando as características do fluxo não variam no espaço. Assim, como a estacionariedade implica na invariância estatística para uma transformação no eixo temporal, também a homogeneidade indica invariância no espaço. A CLP pode ser considerada aproximadamente homogênea na horizontal, o que não pode ser considerado na vertical.

▪ **Isotropia:** quando o fluxo é estatisticamente invariante por translação, reflexão ou rotação no eixo espacial, então a turbulência é denominada isotrópica. A CLP geralmente não é isotrópica, mas ao considerar-se uma escala suficientemente pequena podemos considerar o fluxo localmente isotrópico.

No estudo de um campo turbulento geofísico, como o da CLP, onde o número de Reynolds é grande, todas as simetrias possíveis permitidas pelas equações (e as condições de contorno) são recuperadas em um senso estatístico, a turbulência pode ser considerada bem desenvolvida.

2.4 O Espectro de Energia Turbulenta

Devido à complexidade do campo turbulento, que por efeito da não linearidade do fenômeno, o escoamento turbulento possui um intervalo de escalas de movimento todas acopladas entre si, faz-se necessário o desenvolvimento de parametrizações que permitam modelar tal situação. Em um senso, uma parametrização significa uma representação idealizada (baseada em argumentos heurísticos) do fenômeno de transporte turbulento. Ao parametrizar processos de transporte turbulento introduz-se nas equações, que descrevem as leis de conservação (modelos físicos), relações matemáticas aproximadas, que em princípio são usadas como substitutas dos termos desconhecidos presentes no fenômeno natural.

A confiabilidade de cada modelo depende da maneira na qual os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados à compreensão da física da CLP. A escolha das escalas típicas de velocidade e comprimento são fatores essenciais para a obtenção dos parâmetros turbulentos que são formulados a partir de uma fenomenologia aplicada em uma turbulência bem desenvolvida, reside na escolha de escalas típicas de velocidade e comprimento.

Um parâmetro descrevendo um campo turbulento possui uma grande variabilidade, tanto espacial quanto temporal. Esta variabilidade está associada ao número de graus de liberdade que, por sua vez, está diretamente relacionado ao número de Reynolds (Landau, Lifshitz, 1959). Desta maneira, pode-se conceber a idéia de uma variável turbulenta ser composta pela sobreposição de harmônicos de diferentes números de onda κ chamados turbilhões ou vórtices. Assim, como a radiação eletromagnética, cada número de onda corresponde a uma quantidade de energia cinética turbulenta e, portanto, precisamos saber como esta energia está distribuída nos turbilhões de diferentes tamanhos ou harmônicos de diferentes números de onda.

Os turbilhões são formados nas grandes escalas e transferem energia para os menores e assim por diante. Esta transferência de energia turbulenta em forma de cascata, que vai dos maiores para os menores turbilhões, ocorre até um comprimento de onda limite no qual a ação da viscosidade se torna importante no processo de dissipação da energia cinética turbulenta na forma de calor (Richardson, 1922).

Sendo válida certa analogia com o espectro e energia eletromagnética, a distribuição da energia turbulenta entre os diferentes números de onda não se dá de forma linear como a energia eletromagnética se distribui entre fótons de diferentes frequências. O espectro de energia cinética turbulenta está dividido em intervalos que possuem diferentes características e o seu comportamento pode auxiliar decisivamente na determinação das escalas típicas de velocidade e comprimento para uma turbulência bem desenvolvida. A Figura 2.1 é uma representação do espectro de energia cinética turbulenta.

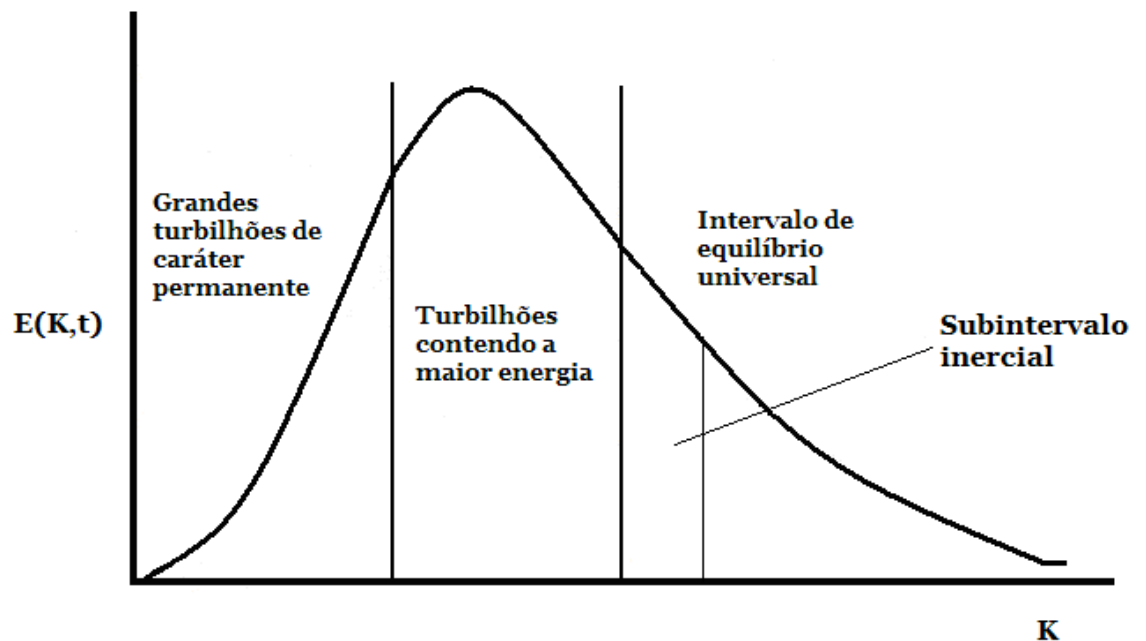


Figura 2.1 – Forma do espectro de energia para uma turbulência bem desenvolvida. Adaptada de Möller e Silvestrine, 2004.

- Grandes turbilhões de caráter permanente: são os maiores turbilhões de caráter permanente que não possuem a maior parcela da energia turbulenta total.
- Turbilhões contendo a maior energia: turbilhões que possuem a maior parcela de energia turbulenta total tem grande influência no processo dispersivo e, conseqüentemente na parametrização dos fluxos turbulentos será importante obter uma escala de comprimento em termos das características destes turbilhões com maior energia.

- Intervalo / Subintervalo inercial: o caráter da turbulência nestes números de onda é inteiramente determinado pelo fluxo de energia e pela taxa de dissipação é igual à energia total fornecida para este intervalo. Da forma do espectro observa-se que esta energia é proveniente dos turbilhões que possuem o maior conteúdo de energia. Esta região do espectro encerra entre turbilhões menores que a escala integral e maiores que a micro escala de Kolmogorov.
- Intervalo de equilíbrio universal: o caráter da turbulência, nestes números de onda, é inteiramente determinado pelo fluxo de energia e pela razão de dissipação ε , onde ε é a dissipação média de energia por unidade de tempo e por unidade de massa do fluido. A soma do fluxo de energia com a dissipação é igual a energia total que é fornecida para este intervalo. Observando a forma do espectro nota-se que esta energia provém dos grandes turbilhões que possuem a maior quantidade de energia. Assim, apesar da dissipação ser provocada pela viscosidade, a ordem de magnitude de ε é determinada apenas por aquelas quantidades que caracterizam os turbilhões mais energéticos.

2.5 Modelos para Difusão de Contaminantes na Atmosfera

Em física da atmosfera os estudos da dispersão de contaminantes baseiam-se em modelos matemáticos. Os modelos mais utilizados são:

2.5.1 Eulerianos

Estes modelos são baseados em observações das massas de ar a partir de um ponto fixo na Terra. Nestes modelos descreve-se o andamento temporal da concentração de uma substância, liberada de uma fonte, em pontos fixos no espaço (grade), relativamente ao sistema de referência terrestre. O processo dispersivo é então formulado por uma equação diferencial com derivadas parciais de conservação de massa.

2.5.2 Lagrangianos

Descrevem o movimento das partículas do fluido em um sistema de referência que segue o escoamento. Em particular, as partículas movem-se aleatoriamente seguindo os vórtices turbulentos, descrevendo trajetórias casuais. O sistema de coordenadas é baseado na

posição (x, y, z) de uma partícula em um tempo t , relativo à sua posição (x_0, y_0, z_0) em um tempo de referência t_0 . Em outras palavras, na aproximação Euleriana o sistema de referência é fixo em relação à terra, enquanto na Lagrangiana o sistema de referência segue o movimento das parcelas de ar ou partículas de contaminantes.

Nos modelos Eulerianos a concentração do contaminante em um determinado ponto do espaço e no tempo é representada através do valor da concentração dos elementos de fluido que está ocupando a posição do espaço no instante em questão, sem levar em conta a sua origem. Assim, no caso Euleriano, a taxa de variação temporal da concentração do contaminante é representada pela taxa de variação temporal (local) da concentração do contaminante. Nos modelos Lagrangianos cada elemento que compõe o escoamento é identificado através da sua posição no instante inicial e a evolução temporal e espacial da concentração do poluente é obtida através da determinação da trajetória de cada elemento de fluido. que compõe o escoamento.

2.5.3 Gaussianos

Dentro dos modelos Eulerianos existe outra categoria que são os modelos Gaussianos. Estes consideram que a concentração do poluente assume uma distribuição normal, com pico de concentração ao longo da linha de centro da pluma, uma dispersão σ_y na direção horizontal e σ_z na direção vertical. Os modelos Gaussianos são baseados em uma fórmula simples que descreve um campo de concentração tridimensional gerado por uma fonte pontual elevada sob condições meteorológicas constantes. As condições de emissão também são consideradas como sendo constantes neste tipo de modelo (Moreira e Tirabassi, 2004). As várias versões dos modelos Gaussianos se diferenciam essencialmente pela técnica utilizada para calcular o desvio padrão em função da estabilidade atmosférica e da distância da fonte emissora. Estes modelos também são utilizados para estimar as concentrações médias sobre longos períodos de tempo. Neste caso, a concordância entre os valores de concentração previstos e observados pode ser bastante satisfatória, contanto que o campo meteorológico não apresente freqüentes variações na direção vertical.

2.5.4 Estocásticos Lagrangianos

Os modelos de dispersão estocásticos Lagrangianos representam uma das ferramentas computacionais mais recente e poderosa para a discretização numérica de um sistema físico (Zannetti, 1990). Estes modelos são baseados na equação de Langevin (Wilson e Sawford, 1996; van Dop, 1995), na qual o movimento das partículas em um escoamento turbulento é descrito de forma análoga ao movimento browniano, permitindo tratar a aceleração sofrida pela partícula, em um escoamento turbulento, como a soma das acelerações do tipo determinística e aleatória. Os modelos de partículas usam um certo número de partículas computacionais (fictícias) para simular a dinâmica de um parâmetro físico selecionado. Estas partículas fictícias permitem compreender os processos físicos que atuam nas partículas reais. A velocidade e a posição de cada partícula, em cada passo no tempo, são obtidas integrando-se numericamente as seguintes equações:

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\alpha u_i + \beta \quad (2.3)$$

e

$$\frac{dx_i}{dt} = U_i(t) + u_i \quad (2.4)$$

onde $i = 1, 2, 3$, x_i representa a posição das partículas, U_i é a velocidade média do vento, u_i é a flutuação da velocidade devido à turbulência e α e β são os coeficientes de transporte e de difusão. O primeiro termo do lado direito da Eq. (2.3) é o termo determinístico, o qual representa a força de fricção exercida pelo escoamento das partículas, enquanto o segundo termo é o estocástico, o qual representa as acelerações aleatórias ocasionadas pelas flutuações de pressão sobre as partículas. Nestes modelos, duas quantidades físicas são importantes para o desempenho numérico das simulações de dispersão de poluentes: a variância da velocidade σ^2 e a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana τ_L . Os modelos estocásticos Lagrangianos são capazes de descrever a dispersão de poluentes na CLP levando em conta as propriedades estatísticas do escoamento. Por exemplo, na CLP convectiva as características da turbulência refletem sua origem térmica. Nessa condição, fortes correntes térmicas ascendentes (*updrafts*) ocupam aproximadamente 40% da área horizontal da CLP, enquanto as correntes descendentes (*downdrafts*), mais fracas, ocupam cerca de 60%. Isso resulta em uma distribuição de probabilidade de velocidade vertical assimétrica. Logo, um contaminante (liberado sem empuxo), emitido continuamente de uma fonte elevada, tem maior

probabilidade de ser levado diretamente à superfície. No caso de uma fonte próxima à superfície, o poluente tem uma maior probabilidade de ser transportado para cima. Na CLP neutra ou estável os turbilhões são menores e a velocidade vertical tem uma distribuição de probabilidade Gaussiana.

Para simular a dispersão na CLP, a velocidade vertical do modelo estocástico Lagrangiano, descrita pela equação de Langevin, deverá possuir uma distribuição de probabilidade de velocidade vertical igual a do escoamento. Desta forma, a solução da equação de Langevin deverá gerar uma distribuição de probabilidade assimétrica para as condições convectivas e uma distribuição simétrica para as condições estável e neutra. Esta propriedade dos modelos estocásticos Lagrangianos é conhecida como condição de boa mistura.

A implementação dos modelos estocásticos Lagrangianos permite levar em conta situações complexas, como, por exemplo, a presença de diferentes topografias ou não-homogeneidades do terreno, baixas velocidades do vento e variações espaciais e temporais dos campos meteorológicos. Além disso, esses modelos são capazes de simular a dispersão de contaminantes originadas de fontes de diferentes formas e dimensões, isto é, fontes pontuais, linha ou área, assim como contínuas, variáveis no tempo e instantâneas.

GRANDEZAS QUE CARACTERIZAM OS PROCESSOS DE DISPERSÃO E DERIVAÇÕES PARA A TAXA DE DISSIPACÃO DA ENERGIA TURBULENTA

Um escoamento turbulento pode ser identificado como uma superposição de turbilhões. Estes turbilhões que compõem o movimento turbulento interagem uns com os outros e possuem uma quantidade de energia que é quantificada pela magnitude das flutuações de velocidade associadas a certas frequências. A energia dos turbilhões é extraída das interações contínuas entre eles e dos mecanismos geradores da turbulência (forçantes). Para entendermos fisicamente a turbulência precisamos saber como a energia cinética está distribuída entre as várias frequências do movimento turbulento. Do ponto de vista prático, torna-se fundamental a identificação das escalas associadas aos turbilhões que contém a energia principal do fluxo turbulento, ou seja, a energia dos turbilhões mais energéticos. Estes vórtices possuem a maior parte da energia cinética e são responsáveis pelo transporte de espécies escalares e vetoriais na CLP.

Pode-se dizer que um espectro mede a distribuição da variância de certa quantidade entre as diferentes frequências ou comprimentos de onda. Considerando-se que a quantidade é uma componente da velocidade turbulenta de uma partícula de fluido, o espectro descreve a distribuição da energia cinética entre as diferentes frequências.

A partir do espectro de energia, pode-se derivar equações utilizando a transformada integral de Fourier e a teoria da difusão estatística de Taylor para expressar a capacidade de dispersão de uma turbulência bem desenvolvida.

Se um elemento de fluido deixa a origem no tempo $t = 0$, sua posição X_i em um tempo t , é dada por

$$X_i = \int_0^t V_i(t') dt' \quad (3.1)$$

um coeficiente de difusão turbulento pode ser determinado multiplicando-se a Eq. (3.1) por $V_i(t)$

$$X_i(t) \cdot V_i(t) = X_i(t) \frac{dX_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} X_i^2 \right) = \int_0^t V_i(t) V_i(t') dt' \quad (3.2)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \bar{X}_i^2 \right) = \int_0^t \overline{V_i(t) V_i(t')} dt' \quad (3.3)$$

e fazendo-se uma média sobre *ensemble* (isto é, considerando um número grande de elementos de fluido que partem em sucessão, num tempo fixo $t = 0$, obtém-se:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \bar{X}_i^2 \right) = \int_0^t \overline{V_i(t) V_i(t')} dt' \quad (3.4)$$

Na Eq. (3.4) ambos os lados têm dimensão de um coeficiente de difusão turbulento ($m^2 s^{-1}$).

A teoria de Taylor é aplicada para uma dispersão, em um campo de turbulência homogêneo e estacionário, isto é, turbulência cujas propriedades estatísticas têm a mesma estrutura em todas as partes do campo de escoamento e não mudam com o tempo. Assim a função de correlação R_{L_i} no integrando da Eq. (3.4) é uma função par da diferença de tempo $\tau = t - t'$. Para uma componente arbitrária da velocidade turbulenta, a forma da função R_{L_i} é dada por:

$$R_{L_i}(\tau) = \overline{V_i(t) V_i(t + \tau)} = \bar{V}_i^2 \rho_{L_i}(\tau) \quad (3.5)$$

A equação acima define a correlação entre a velocidade da partícula num tempo t' e num tempo subsequente $(t + t')$. A forma adimensional da função de autocorrelação é conhecida como coeficiente de autocorrelação, sendo por definição $\rho_{L_i}(0) = 1$. O índice L indica que estas correlações são Lagrangianas e suas medições são feitas seguindo o elemento de fluido que está sendo transportado pela turbulência.

Substituindo a Eq. (3.5) na Eq. (3.4) resulta em:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \bar{X}_i^2 \right) = \int_0^t R_{Li}(\tau) d\tau = \bar{V}_i^2 \int_0^t \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (3.6)$$

Pode-se integrar a Eq. (3.6) no intervalo de 0 à t :

$$\int_0^t \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \bar{X}_i^2 \right) dt = \bar{V}_i^2 \int_0^t \left[\int_0^t \rho_{Li}(\tau) d\tau \right] dt \quad (3.7)$$

$$\frac{\bar{X}_i^2}{2} = \bar{V}_i^2 \int_0^t \int_0^t \rho_{Li}(\tau) d\tau dt \quad (3.8)$$

$$\bar{X}_i^2 = 2\bar{V}_i^2 \int_0^t (t - \tau) \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (3.9)$$

As equações (3.6) e (3.7) caracterizam a dispersão turbulenta, em termos da habilidade das partículas lembrarem de suas velocidades entre 0 e t .

É de fundamental interesse o comportamento destas expressões para grandes valores de t . Ao considerarem-se períodos de tempo muito grandes, tais que $t \gg t^*$, onde t^* é o tempo para o qual $\rho_{Li}(t^*) \approx 0$, a relação (3.9), pode ser escrita como:

$$\bar{X}_i^2 = 2\bar{V}_i^2 \left[t \int_0^{t^*} \rho_{Li}(\tau) d\tau - \int_0^{t^*} \tau \rho_{Li}(\tau) d\tau \right] \quad (3.10)$$

Para $t \gg t^*$, o segundo termo do lado direito da equação acima será muito pequeno em relação ao primeiro e poderá ser desprezado. Então:

$$\bar{X}_i^2 = 2\bar{V}_i^2 t \int_0^{t^*} \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (3.11)$$

Para o valor constante da integral acima, pode-se escrever

$$T_{Li} = \int_0^{\infty} \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad (3.12)$$

onde a escala de tempo integral Lagrangiana T_{Li} pode ser considerada uma medida de tempo durante o qual, na média, um elemento de fluido permanece em movimento numa dada direção (Hinze, 1975). Com a definição de T_{Li} , para grandes tempos, $t \gg T_{Li}$ a Eq. (3.11) pode ser escrita como:

$$\overline{X}_i^2 = 2\overline{V}_i^2 t T_{Li} \quad (3.13)$$

Neste limite de tempo, \overline{X}_i^2 cresce parabolicamente com t , o que caracteriza um tipo de escoamento difusivo. Para $\tau \gg T_{Li}$, o coeficiente de difusão turbulento em (3.6) pode ser aproximado por

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \overline{X}_i^2 \right) = \sigma_i^2 \int_0^\infty \rho_{Li}(\tau) d\tau = \sigma_i^2 T_{Li} \quad (3.14)$$

onde $\sigma_i^2 = \overline{V}_i^2$ é a variância de flutuação da velocidade. Desta forma, chega-se à conclusão que o coeficiente de difusão pode ser formulado através do produto da variância de flutuação da velocidade pela escala de tempo Lagrangiana. Considerando-se uma turbulência homogênea e isotrópica, pode-se desprezar o índice i .

O parâmetro de dispersão \overline{X}^2 é uma quantidade estatística de grande interesse em modelos de dispersão e para a derivação de relações fundamentais associadas ao estudo da turbulência.

Em um trabalho clássico, Tennekes (1982) utilizou a forma exponencial para a função de autocorrelação do tipo

$$\rho_L(\tau) = e^{-\tau/T_L} \quad (3.15)$$

na seguinte expressão do modelo de difusão estatístico de Taylor,

$$\overline{X}^2 = 2\sigma^2 \int_0^t (t-\tau) \rho_L(\tau) d\tau \quad (3.16)$$

Substituindo a Eq. (3.15) na Eq. (3.16), obtém-se:

$$\bar{X}^2 = 2\sigma^2 \int_0^t (t-\tau) e^{-\tau/T_L} d\tau \quad (3.17)$$

Resolvendo-se a integral da equação acima, resulta que.

$$\bar{X}^2 = 2\sigma^2 T_L^2 \left[\frac{t}{T_L} - 1 + \exp\left(\frac{-t}{T_L}\right) \right] \quad (3.18)$$

onde t é o tempo de viagem da partícula de fluido, σ o desvio padrão da velocidade turbulenta e T_L é a escala de tempo Lagrangiana definida na Eq.(3.12).

Tennekes (1982) utilizou a Eq. (3.18) e argumentos do subintervalo inercial para derivar a seguinte expressão para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta da forma de (1.1), reescrita aqui:

$$\varepsilon = \frac{n_c \sigma^2}{C_0 T_L}$$

onde C_0 é a constante de Kolmogorov. Relações como a (1.1), são muito utilizadas em parametrizações da turbulência (Tennekes e Lumley, 1972; Mellor e Yamada, 1974). De acordo com Landau e Lifshitz (1987, p.131), isto é relevante pelo simples fato de que “... embora a dissipação ocorra devido à viscosidade, a ordem de magnitude de ε pode ser determinada por quantidades que caracterizam os grandes turbilhões.”

Para se determinar uma expressão da forma de (1.1), considera-se inicialmente uma transformada de Fourier. A transformada de Fourier é um tipo de transformada integral que pode representar um estado de um sistema com um número infinito de graus de liberdade por um conjunto contínuo de frequências. Usando-se este tipo de transformada pode-se definir:

$$\Phi_L(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R_{Li}(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (3.19)$$

onde a transformada inversa será a seguinte função de autocorrelação:

$$R_L(\tau) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_L(\omega) e^{-i\omega\tau} d\omega \quad (3.20)$$

ou

$$R_L(0) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_L(\omega) d\omega \quad (3.21)$$

de modo que Φ_L mostra como a energia cinética turbulenta é distribuída com respeito à frequência $\omega = 2\pi/T = 2\pi n$, onde T é o período de uma oscilação senoidal e n é a frequência em Hertz.

As equações (3.19) e (3.20) definem o teorema de Wiener-Khinchin e estabelecem um resultado fundamental que relaciona a transformada de Fourier da função de autocorrelação com o espectro de energia.

Considerando-se a turbulência estacionária, pode-se escrever $R_L(\tau) = R_L(-\tau)$, isto é, $R_L(\tau)$ é uma função par. Desta propriedade e da Eq. (3.19), obtém-se:

$$\Phi_L(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R_L(\tau) (\cos \omega\tau + i \operatorname{sen} \omega\tau) d\tau = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} R_L(\tau) \cos \omega\tau d\tau \quad (3.22)$$

desde que $\operatorname{sen} \omega\tau$ é uma função ímpar. Isto mostra que $\Phi_L(\omega) = \Phi_L(-\omega)$, de modo que.

$$R_L(\tau) = \int_0^{\infty} \Phi_L(\omega) \cos \omega\tau d\omega \quad (3.23)$$

então,

$$R_L(0) = \int_0^{\infty} \Phi_L(\omega) d\omega \quad (3.24)$$

A transformada de $R_L(\tau)$, a saber, $\Phi_L(\omega)$, é chamada a Função Densidade Espectral de Energia em analogia com o espectro de luz estudado na física. O produto $\Phi_L(\omega) d\omega$ é a

contribuição para a variância feita por flutuações no intervalo de largura $d\omega$ centrado em ω . Pode-se mudar a frequência ω , expressa em radianos por segundo, para a frequência $n = \omega/2\pi$, expressa em ciclos por segundo, então uma nova densidade espectral.

$$S_L(n) = 2\pi\Phi_L(2\pi n) \quad (3.25)$$

pode ser introduzida de modo que

$$R_L(\tau) = \int_0^{\infty} \Phi_L(2\pi n) \cos(2\pi n \tau) 2\pi n dn = \int_0^{\infty} S_L(n) \cos(2\pi n \tau) dn \quad (3.26)$$

Logo, aplicando-se $\tau = 0$ na equação acima, tem-se que,

$$\sigma^2 = R_L(0) = 2\pi \int_0^{\infty} \Phi_L(2\pi n) dn = \int_0^{\infty} S_L(n) dn \quad (3.27)$$

onde $\sigma^2 = \bar{V}^2$ é a variância de uma componente da velocidade turbulenta. Assim, pode-se confirmar que duas vezes a energia cinética por unidade de massa é obtida se o espectro é integrado sobre todas as frequências. Pode-se escrever em termos da frequência n .

$$2\pi\Phi_L(2\pi n) = 4 \int_0^{\infty} R_L(\tau) \cos 2\pi n \tau d\tau \quad (3.28)$$

resultando em

$$S_L(n) = 4 \int_0^{\infty} R_L(\tau) \cos 2\pi n \tau d\tau \quad (3.29)$$

Definindo-se a função de autocorrelação como

$$R_L(\tau) = \overline{v(t')v(t'+\tau)} = \bar{v}^2 \rho_L(\tau) \quad (3.30)$$

e conhecendo-se a escala de tempo integral Lagrangiana Eq.(3.12), conclui-se que para $n = 0$,

$$S_L(0) = 4 \int_0^{\infty} R_L(\tau) d\tau = 4\bar{v}^2 T_L \quad (3.31)$$

O produto $\bar{v}^2 T_L$ é um coeficiente de difusão turbulento expresso aqui pelo espectro de energia calculado na frequência $n \rightarrow 0$, ou seja, em termos dos grandes turbilhões. Isto mostra que deve-se considerar a questão de como as diferentes frequências contribuem para a difusão turbulenta de partículas de fluido. A partir disto, apresenta-se o modelo de difusão de Taylor, que expressa o parâmetro de dispersão turbulento generalizado em termos da variância e da função de autocorrelação na seguinte forma:

$$\bar{X}^2 = 2\bar{v}^2 \int_0^t (t - \tau) \rho_L(\tau) d\tau \quad (3.32)$$

substituindo $\rho_L(\tau)$ em (3.32) por sua transformada de Fourier (3.26), resulta

$$\bar{X}^2 = 2\bar{v}^2 \int_0^t (t - \tau) \left[\int_0^{\infty} F_L(n) \cos 2\pi n \tau dn \right] d\tau \quad (3.33)$$

$$\bar{X}^2 = \bar{v}^2 t^2 \int_0^{\infty} F_L(n) \frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{(n\pi)^2} dn \quad (3.34)$$

onde $F_L(n) = \frac{S_L(n)}{\bar{v}^2}$, é o espectro de energia Lagrangiano normalizado pela variância da

velocidade. A quantidade $\frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{(n\pi)^2}$ à medida que o tempo passa age como um filtro passa -

baixa (Frisch, 1995), ou seja, ele remove altos harmônicos na nossa decomposição de Fourier.

A equação (3.34) indica que para um intervalo de tempo curto após o instante de liberação da partícula de fluido, todas as escalas (altas e baixas frequências) contribuem para o crescimento de \bar{X}^2 ; à medida que o tempo de difusão aumenta o filtro passa baixa remove

as altas frequências na decomposição espectral de Fourier; altas frequências prgressivamente perdem a habilidade de expandir \bar{X}^2 .

Vamos analisar a Eq. (3.34):

a) Para $t \ll T_L$

$\text{sen}(n\pi t) \approx n\pi t$ quando $t \rightarrow 0$, logo

$$\lim_{t \rightarrow 0} \bar{X}^2 = \sigma^2 t^2 \int_0^{\infty} F_L(n) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\text{sen}^2(n\pi t)}{(n\pi)^2} dn = \sigma^2 t^2 \quad (3.35)$$

Então para $t \ll T_L$ todas as frequências do movimento turbulento estão contribuindo para o crescimento de \bar{X}^2 .

b) Para $t \gg T_L$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \bar{X}^2 \right) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{2\pi} \int_0^{\infty} F_L(n) \frac{\text{sen}(2\pi n t)}{n} dn \\ &= \frac{\sigma^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} F_L \left(\frac{g}{2\pi} \right) \delta(g) dg = \sigma^2 T_L \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde, $g \equiv 2\pi n$, $\delta(g)$ é a função Delta de Dirac e $T_L = F_L(0)/4$.

Tennekes (1982) considerou a forma exponencial para a função de autocorrelação Eq. (3.15), substituiu esta relação na teoria da difusão estatística de Taylor Eq.(3.16) obtendo um parâmetro de dispersão Eq.(3.18) e expandindo em série de Maclaurin, obteve:

$$\bar{X}^2 = 2\sigma^2 T_L^2 \left[\frac{t^2/T_L^2}{2!} - \frac{t^3/T_L^3}{3!} + \dots \right] \quad (3.37)$$

Como demonstrado por Degrazia et al. (2005), o termo de potência três na Eq. (3.37), contribui para o decréscimo do parâmetro de dispersão. Do ponto de vista físico, este resultado indica uma supressão no número de graus de liberdade do escoamento turbulento, associado aos harmônicos de alta frequência. Como consequência é plausível associar o termo

$\left(-\frac{t^3/T_L^3}{3}\right)$ aos turbilhões de alta frequência do subintervalo inercial. Esta relação pode ser

estabelecida com o uso da função de estrutura Lagrangiana $D_L(\tau)$,

$$D_L(\tau) = 2\sigma^2[1 - \rho_L(\tau)] = C_0 \varepsilon \tau \quad (3.38)$$

A partir da Eq. (3.38) pode-se escrever uma relação para a função de autocorrelação $\rho_L(\tau)$ em termos dos parâmetros do subintervalo inercial

$$\rho_L(\tau) = 1 - \frac{C_0 \varepsilon \tau}{2\sigma^2} \quad (3.39)$$

Substituindo-se (3.39) em (3.17), resulta

$$\overline{X^2} = \sigma^2 t^2 - \frac{C_0 \varepsilon t^3}{6} \quad (3.40)$$

Comparando-se (3.40) com (3.37), ou seja,

$$-\frac{C_0 \varepsilon t^3}{6} = \sigma^2 T_L^2 \left(-2 \frac{t^3/T_L^3}{3} \right)$$

resulta uma expressão para ε da forma,

$$\varepsilon = \frac{2}{C_0} \frac{\sigma^2}{T_L} \quad (3.41)$$

Por outro lado, o uso da função de autocorrelação da forma (Degrazia et al., 2005),

$$\rho_L(t) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{t}{T_L} \right)} - \frac{t}{T_L \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{t}{T_L} \right) \right]^2} + \frac{1}{4} \frac{t^2}{T_L^2 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{t}{T_L} \right) \right]^3} \quad (3.42)$$

na teoria da difusão estatística de Taylor, permite escrever

$$\bar{X}^2 = \frac{\sigma^2 t^2}{\left(1 + \frac{1}{2} \frac{t}{T_L} \right)} \quad (3.43)$$

Expandindo a Eq. (3.43) em série binomial e considerando-se $t < T_L$ e seguindo o procedimento anterior, encontra-se uma nova relação para ε ,

$$\left(\bar{X}^2 \right) = \sigma^2 t^2 \left(1 - \frac{t}{2T_L} + \dots \right) = \sigma^2 t^2 - \sigma^2 \frac{t^3}{2T_L} + \dots \quad (3.44)$$

Comparando-se a expressão (3.44) com Eq. (3.40), encontra-se mais uma expressão para a taxa de dissipação de energia turbulenta:

$$\varepsilon = \frac{3}{C_0} \frac{\sigma^2}{T_L} \quad (3.45)$$

Então, quando analisa-se diferentes expansões em séries de Maclaurin do parâmetro de dispersão (\bar{X}^2), obtido a partir de diferentes funções de autocorrelação, pode-se ver a incerteza na universalidade para a forma funcional da taxa de dissipação da energia turbulenta (Degrazia et al., 2005).

Motivado por esta incerteza a respeito da forma da expressão para a taxa de dissipação de energia turbulenta (determinação do valor de n_c), a proposta do presente estudo é também mostrar que uma função de autocorelação proposta por Pasquill e Smith (1983) e Panofsky e Dutton (1984), permite derivar um outro valor para n_c .

A partir de dados experimentais de dispersão, a seguinte função de autocorrelação binomial foi sugerida por Phillips e Panofsky (1982) e (Pasquil e Smith, 1983).

$$\rho_L(t) = \left(1 + \frac{\tau}{T_L}\right)^{-2} \quad (3.46)$$

A função de autocorrelação que provém da Eq. (3.46), satisfaz as condições matemáticas propostas por Hinze (1975, p.59) para a turbulência homogênea, exceto para o critério $\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{d\rho_L}{dt}\right) = 0$. A substituição da Eq. (3.48) no teorema da difusão estatística de Taylor resulta no seguinte parâmetro de dispersão:

$$\left(\overline{X^2}\right) = 2\sigma^2 T_L \left[t - T_L \ln\left(1 + \frac{t}{T_L}\right) \right] \quad (3.47)$$

A Eq. (3.47) é consistente com a teoria do subintervalo inercial. Desta forma, Panofsky e Dutton (1984) sugeriram a Eq. (3.47) como uma representação alternativa para as equações (3.18) e (3.43). Assim, uma expansão para $t < T_L$ da função $\ln\left(\frac{t}{T_L} + 1\right)$ na expressão (3.47), resulta em:

$$\overline{X^2} = \sigma^2 t^2 - \frac{2}{3} \sigma^2 \frac{t^3}{T_L} + \dots \quad (3.48)$$

Seguindo-se procedimentos feitos anteriormente compara-se o termo negativo da Eq. (3.40) com a Eq.(3.48), obtendo-se:

$$\varepsilon = \frac{4}{C_0} \frac{\sigma^2}{T_L} \quad (3.49)$$

Uma outra forma para a função de autocorrelação proposta por Frenkiel (1953), é dada pela seguinte equação:

$$\rho_L(\tau) = \exp\left(\frac{-\pi \tau^2}{4 T_L}\right) \quad (3.50)$$

Esta equação fornece o seguinte parâmetro de dispersão:

$$(\bar{X}^2) = \sigma^2 T_L^2 \left[2 \frac{t}{T_L} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\pi} t}{2 T_L} \right) + \frac{4}{\pi} \exp \left(\frac{-\pi t^2}{4 T_L^2} \right) - \frac{4}{\pi} \right] \quad (3.51)$$

No entanto, uma expansão de (3.51) em série de Maclaurin não permite a obtenção de potências ímpares de t . Portanto, uma expressão da forma de (1.1) não pode ser derivada dessas equações. Diferentemente da forma exponencial (e^{-t/T_L}) e das Eqs. (3.42) e (3.46), a Eq. (3.50) não concorda com a teoria do subintervalo inercial de Kolmogorov e, conseqüentemente, o emprego de (3.51) é inadequado para representar parâmetros de dispersão.

MODELOS DE DISPERSÃO ESTOCÁSTICOS LAGRANGIANOS

A modelagem da difusão turbulenta é um processo extremamente difícil, porque ela deve ser capaz de simular os efeitos da turbulência para obter previsões confiáveis da concentração de contaminantes.

Em um modelo Lagrangiano, são construídas as trajetórias dos movimentos das partículas de fluido, à medida que essas sofrem a ação da velocidade média e das flutuações de velocidades turbulentas. O elemento ou partícula de fluido é um pequeno volume de controle, que viaja na velocidade local do meio fluido. A sua dimensão é grande quando comparada com as escalas moleculares e pequena em relação à menor escala de movimento, a microescala de Kolmogorov ($\sim 10^{-3} m$). As partículas movem-se seguindo os vórtices turbulentos, descrevendo trajetórias aleatórias.

Neste trabalho será utilizado um modelo estocástico Lagrangiano.

4.1 Movimento Browniano

O movimento irregular de grãos de pólen imerso em um fluido foi descoberto e caracterizado, pela primeira vez, pelo escocês Robert Brown em 1827. Neste movimento, conhecido como movimento Browniano, as partículas são continuamente bombardeadas pelas moléculas do fluido.

Robert Brown era botânico e logo foi levado a pensar que este movimento era característico de vida orgânica. Continuando seu trabalho com suspensões de outros tipos de partículas finas, orgânicas e inorgânicas observou o mesmo fenômeno e concluiu que este movimento não era de origem orgânica.

Einstein, em 1905, publicou a primeira explicação satisfatória do movimento Browniano considerando-o como um processo de caminho aleatório. Os principais pontos de sua proposta foram: (1) o movimento é ocasionado por frequentes impactos entre as moléculas do fluido sobre os grãos de pólen suspensos nesse meio; (2) a complexidade do movimento das moléculas somente pode ser descrita probabilisticamente considerando os impactos com as partículas independentes e com grande frequência de ocorrência; (3) cada partícula executa um movimento independente das outras partículas presentes no meio; e (4) os movimentos de

uma partícula em diferentes e consecutivos intervalos de tempo são processados independentes. A hipótese (4) é válida desde que estes intervalos de tempo sejam suficientemente grandes em relação ao tempo médio entre dois impactos consecutivos com moléculas.

4.2 Modelos de Dispersão Estocásticos Lagrangianos

Os modelos de dispersão estocásticos Lagrangianos representam uma ferramenta computacional fundamental na simulação numérica das trajetórias das partículas de fluido e consequentemente possibilita a reprodução do campo de concentração de contaminantes (Zannetti, 1990).

A equação fundamental de um modelo Lagrangiano, para a evolução espacial e temporal da concentração média de um contaminante em uma parcela de fluido descrição da dispersão atmosférica para um determinado contaminante é

$$C(\vec{x}, t) = \int_0^t \int P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0) S(\vec{x}_0, t_0) d\vec{x}_0 dt_0 \quad (4.1)$$

onde, $C(\vec{x}, t)$ é a concentração média em \vec{x} no tempo t , $S(\vec{x}_0, t_0)$ é o termo de fonte (massa de contaminante por unidade de volume e por unidade de tempo) e $P(\vec{x}, t | \vec{x}_0, t_0)$ é a função densidade de probabilidade (FDP) da parcela de fluido que está na posição \vec{x}_0 no instante t_0 vir a ocupar a posição \vec{x} no instante t . A FDP pode ser estimada numericamente, mediante a determinação da trajetória de um conjunto suficientemente grande de partículas contidas no escoamento (Baldochi, 1992; Zannetti, 1990). A Eq.(4.1) representa uma descrição rigorosa dos processos de transporte e difusão expressa em uma notação probabilística. Uma forma de estimar-se a trajetória das partículas em um escoamento turbulento é utilizando-se um modelo de partículas estocástico Lagrangiano.

Os modelos de partículas Lagrangianos são baseados na equação de Langevin (Wilson e Sawford, 1996; Van Dop, 1995), na qual o movimento das partículas em um escoamento turbulento é descrito de forma análoga ao movimento Browniano. Isto permite tratar a aceleração sofrida pela partícula, em um escoamento turbulento, como a soma das acelerações do tipo determinísticas e aleatórias, uma vez que os modelos de partículas usam um

determinado número de partículas computacionais (fictícias), para simular um parâmetro físico selecionado. Assim, essas partículas permitem uma melhor compreensão dos processos físicos que atuam nas partículas reais.

A velocidade e a posição de cada partícula, em cada passo no tempo, são obtidas integrando-se numericamente as equações (2.3) e (2.4) e reescritas aqui.

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\alpha u_i + \beta$$

e

$$\frac{dx_i}{dt} = U_i(t) + u_i$$

Nestes modelos, o cálculo da dispersão de contaminantes é feito gerando-se, casualmente, um grande número de partículas, as quais movem-se de acordo com parâmetros atmosféricos, que descrevem o transporte e a turbulência.

No caso de um modelo de dispersão estocástico Lagrangiano, pode-se usar diferentes topografias, que consideram as variações temporal e espacial da velocidade do vento, podendo simular concentrações de substâncias liberadas por fontes com dimensões e formas distintas variando no tempo dos campos meteorológicos.

4.3 O Modelo de Langevin

Langevin publicou em 1908, uma solução alternativa para o movimento Browniano.

$$\frac{du(t)}{dt} = a_1(t) + b\xi(t) \quad (4.2)$$

Sendo que a velocidade da partícula Lagrangiana é representada por u , t é o tempo, a_1 é um coeficiente *damping* que está associado ao arraste viscoso da partícula. O coeficiente b representa a difusão molecular. O produto do coeficiente b pela função aleatória $\xi(t)$ representa uma componente da aceleração flutuante rápida, devido ao bombardeamento irregular e assimétrico das moléculas na partícula.

Na Eq.(4.2) o primeiro termo do lado direito está representando a medida da perda de memória “*fading memory*” da velocidade no tempo. Tendo a correção *drift* neste termo, a qual satisfaz a condição de boa mistura “*well mixed*”, ou seja, quando a distribuição das partículas de um gás é inicialmente uniforme, em um escoamento turbulento, permanecerá desta maneira.

O segundo termo da Eq.(4.2) representa as acelerações aleatórias, devido às flutuações de pressão, com tempo de correlação curtos, sendo da ordem da escala de Kolmogorov, a escala de tempo de Kolmogorov τ_k que define o tamanho dos turbilhões que dissipam energia.

A versão tridimensional do modelo de Langevin está disponível para turbulência não-homogênea e Gaussiana e para turbulência não-homogênea e não-Gaussiana. Para a aplicação do modelo de partículas Lagrangeano é interessante entender como a informação da turbulência é considerada pelo modelo de Langevin. A turbulência na CLP pode ser classificada de acordo com a mudança no tempo (estacionária/não-estacionária), no espaço (homogênea/não-homogênea) e de acordo com a distribuição de velocidade (Gaussiana/não-Gaussiana). Assim, em estudos de dispersão de poluentes considera-se que na direção horizontal a turbulência na CLP é estacionária, homogênea e Gaussiana. Na direção vertical a turbulência é estacionária, não-homogênea e Gaussiana ou não-Gaussiana, dependendo da estabilidade.

Em condições de estabilidade neutra, a qual ocorre na presença de ventos fortes (com velocidades maiores de $\sim 6\text{m/s}$), a turbulência é não-homogênea com a distribuição de velocidade vertical Gaussiana ou não-Gaussiana dependendo dos valores dos momentos das flutuações da velocidade vertical. Em condições instáveis, caracterizada pela presença de grandes turbilhões, com tamanhos da ordem da altura da CLP, e ventos mais fracos, a turbulência é não-homogênea e a distribuição de velocidade é assimétrica positiva, ou seja, não-Gaussiana. No caso da instabilidade estável, que ocorre durante a noite, deve-se pensar do mesmo modo como na situação de estabilidade neutra, pois a turbulência também é gerada mecanicamente.

Quando a turbulência é não-homogênea, o perfil da variância de velocidade vertical sofre mudanças com a altura. As partículas tendem a deslocarem-se para regiões onde as variâncias são baixas, resultando em medidas incorretas dos valores de concentração calculados pelo modelo de partículas. Essas partículas possuem uma velocidade maior do que aquelas que estão deixando esta região, produzindo um fluxo líquido direcionado para as

regiões de baixa variância. Logo, torna-se necessário a inclusão de uma correção *drift* nas equações a fim de evitar o acúmulo de partículas em regiões de baixa variância e garantir a condição de boa mistura (*well-mixed*). Nas próximas seções serão mostradas como a turbulência é caracterizada de acordo com a mudança no espaço e distribuição de velocidade para a direção vertical.

4.3.1 Turbulência não-homogênea e Gaussiana

O modelo de Langevin, na forma tridimensional é baseado no trabalho de Thomson (1987). A derivação é realizada considerando-se a equação diferencial estocástica de Langevin (equação 4.2). Thomson assumiu que a evolução da velocidade e do deslocamento (\vec{x}, \vec{u}) de cada partícula é um processo de Markov (“passado e futuro são estatisticamente independente quando o presente é conhecido”), e que os vetores \vec{x} e \vec{u} são funções do tempo. As equações de Thomson são:

$$du_i = a_i(\vec{x}, \vec{u}, t) dt + b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t) dw_j(t) \quad (4.3)$$

e

$$dx_i = (U_i + u_i) dt \quad (4.4)$$

onde $i, j = 1, 2, 3$, \vec{x} é o vetor deslocamento, U_i é a velocidade do vento médio e \vec{u} é o vetor velocidade Lagrangeana. A equação (4.3), utilizada para o cálculo da velocidade, consiste de um termo determinístico, $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$, e um termo estocástico, dado por $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t) dw_j$, onde dw_j são os incrementos do processo de Wiener, um incremento aleatório de distribuição Gaussiana com média zero e variância dt . Tendo-se a descrição de $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$ e $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)$, integra-se numericamente a Eq.(4.3), encontram-se os valores de velocidade turbulenta e o resultado é substituído na Eq.(4.4) para determinar a posição de cada partícula devido aos efeitos combinados da velocidade do vento médio e da velocidade turbulenta. Estas equações determinam as sucessivas posições das partículas no domínio de cálculo utilizando os valores de velocidade média do vento e os valores da turbulência.

O principal problema na formulação dos modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos é encontrar expressões apropriadas para $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$ e $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)$. Thomson (1987) mostrou que os modelos de partículas estocásticas Lagrangeanos têm que satisfazer a dois critérios:

Primeiro, para determinar o coeficiente $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$, é necessário impor a condição de boa mistura ou *well-mixed*. Nesta condição, a trajetória das partículas inicialmente bem misturadas em um escoamento assim deve permanecer. O critério de boa mistura é satisfeito considerando-se que a função densidade de probabilidade da velocidade Euleriana (FDP), $P_E(\vec{x}, \vec{u}, t)$, satisfaça a equação de Fokker-Planck correspondente ao sistema de Eqs.(4.3) e (4.4):

$$\frac{\partial P_E}{\partial t} = -\frac{\partial(u_i P_E)}{\partial x_i} - \frac{\partial(a_i P_E)}{\partial u_i} + \frac{\partial^2(B_{i,j} P_E)}{\partial u_i \partial u_j} \quad (4.5)$$

onde, $B_{i,j} = \frac{1}{2}(b_{i,k} b_{j,k})$ e $P_E = P_E(\vec{x}, \vec{u}, t)$ é a função densidade de probabilidade Euleriana da velocidade turbulenta. A Eq.(4.5) fornece a relação entre a função $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$ e as características estatísticas Eulerianas do campo de fluxo, sendo este último representado pela distribuição de probabilidade P_E . Ainda, os termos do lado direito representam a advecção, a convecção e a difusão, respectivamente. O coeficiente determinístico $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$ é obtido por:

$$a_i P_E = \frac{\partial}{\partial u_i} (B_{i,j} P_E) + \phi_i(\vec{x}, \vec{u}, t) \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial(u_i P_E)}{\partial x_i} \quad (4.7)$$

Sujeito à condição:

$$\phi_i \rightarrow 0 \text{ quando } \vec{u} \rightarrow \infty \quad (4.8)$$

O coeficiente determinístico a_i é obtido a partir da Eq.(4.6) como:

$$a_i = -B_{i,j}V_{i,k}^{-1}(u_k - U_k) + \frac{\phi_i}{P_E} \quad (4.9)$$

onde, $V_{i,k} = \langle (u_i - U_i)(u_k - U_k) \rangle$. Na Eq.(4.9) o primeiro termo representa a perda de memória (*fading memory*) e o segundo termo a correção *drift*, que é função do gradiente espacial da velocidade.

Na Eq.(4.9) é preciso determinar a função $\phi_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$. Segundo Thomson (1987), o sistema não apresenta solução única em mais do que uma dimensão para esta função. No entanto, uma solução particular pode ser assumida considerando a distribuição de velocidade Gaussiana. Portanto, Thomson utilizou a Eq.(4.7) para obter a seguinte expressão para ϕ_i :

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i}{P_E} = & \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_{i,j}}{\partial x_i} + \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_\partial} + \frac{(V^{-1})_{i,m}}{2} \left(\frac{\partial V_{j,m}}{\partial t} + U_k \frac{\partial V_{j,m}}{\partial x_k} \right) \right] (u_j - U_j) \\ & + \frac{1}{2} (V^{-1})_{i,m} \frac{\partial V_{k,m}}{\partial x_j} (u_j - U_j)(u_k - U_k) \end{aligned} \quad (4.10)$$

O segundo critério requer que o modelo de partículas forneça resultados corretos no subintervalo inercial. Assim, o coeficiente $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)$ é determinado comparando-se a função estrutura da velocidade Lagrangeana, derivada da Eq.(4.3),

$$\overline{(du_i)^2} = b_{i,j}^2 dt \quad (4.11)$$

com a função determinada a partir da teoria de Kolmogorov no subintervalo inercial ($\tau_k \ll \Delta t \ll \tau_L$) (Rodean, 1996):

$$\overline{(du_i)^2} = \delta_{ij} C_0 \varepsilon dt \quad (4.12)$$

Então, a partir das equações (4.11) e (4.12), mostra-se que $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)$ está relacionado à constante C_0 da seguinte forma:

$$b_{i,j} = \delta_{ij} \sqrt{C_0 \varepsilon} \quad (4.13)$$

Onde δ_{ij} é a delta de Kronecker, C_0 é a constante de Kolmogorov e ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, significando que a constante da função de estrutura Lagrangeana C_0 é uma importante quantidade nos modelos estocásticos Lagrangeanos. O produto $C_0 \varepsilon$ também pode ser escrito como uma função da variância das flutuações da velocidade σ_i^2 e da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana τ_{Li} (Hinze, 1975; Tennekes, 1982):

$$b_{i,j} = \delta_{ij} = \sqrt{C_0 \varepsilon} = \delta_{ij} \left(2 \frac{\sigma_i^2}{\tau_{Li}} \right)^{1/2} \quad (4.14)$$

demonstrando que a entrada mais importante para o desempenho numérico das simulações de dispersão de poluentes a partir de médias da equação de Langevin generalizada ainda são as variâncias da velocidade σ_i^2 e as escalas de tempo de decorrelação τ_{Li} ou a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ε e a constante universal C_0 .

4.3.2 Turbulência não-homogênea e não-Gaussiana

A dispersão na CLP convectiva é fortemente influenciada pela probabilidade de ocorrência de fluxos turbulentos que dão origem as estruturas chamadas *updrafts* (ou térmicas), em conjunto surgem às estruturas chamadas *downdrafts*, cujo movimento se dá de cima para baixo. *Updrafts* têm grandes velocidades na vertical, mas ocorrem em pequenas áreas na horizontal, têm escalas de comprimento da ordem da altura da CLP convectiva e se desenvolvem a partir da união de pequenas plumas geradas próximas a superfície, enquanto os *downdrafts* ocupam grandes áreas na horizontal e possuem velocidades menores. Portanto, a distribuição de velocidade vertical na CLC é assimétrica e a suposição de turbulência Gaussiana, como apresentado na seção anterior, para derivar os modelos estocásticos Lagrangeanos, não é correta.

Dessa forma, o modelo de partículas estocástico Lagrangeanos requer uma representação matemática de uma FDP assimétrica para a velocidade vertical. Para tanto, na construção da FDP assimétrica, é utilizada a proposta de Luhar e Britter (1989) e Weil (1990), introduzida por Baerentsen e Berkowicz (1984). A construção é feita pela combinação linear de duas distribuições Gaussianas.

O modelo de Langevin para a coordenada vertical é escrito da seguinte forma:

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, w, t)dt \quad (4.15)$$

e

$$dz = wdt \quad (4.16)$$

onde todos os termos têm o mesmo significado que nas Eqs.(4.3) e (4.4). A equação de Fokker-Planck correspondente para condições estacionárias é:

$$\frac{\partial [wP_E(w, z)]}{\partial z} = -\frac{\partial [a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [b^2(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2} \quad (4.17)$$

onde o significado físico dos coeficientes a e b é o mesmo apresentado para a equação de Langevin.

Novamente, o problema encontra-se em calcular os coeficientes $a(z, w, t)$ e $b(z, w, t)$ das equações (4.15) e (4.17). Para $b(z, w, t)$, encontrar a solução é relativamente fácil, mas para $a(z, w, t)$, em turbulência não-homogênea (em uma CLC), não é uma tarefa simples. Antes, porém, duas observações sobre estes dois coeficientes são necessárias. Primeiro Thomson (1987) observou que o coeficiente $a(z, w, t)$ pode ser determinado em uma dimensão, mas não para duas ou três, como foi descrito anteriormente. Como, agora, trabalha-se somente em uma dimensão, a vertical, não haverá o problema de várias soluções para o coeficiente determinístico. Segundo, Thomson concluiu que é melhor trabalhar com um modelo simples quando na ausência de uma teoria satisfatória. Ele declarou que é mais simples manter b independente da velocidade, ou seja, $b(z, w, t) = b(z, t)$. Assim, a equação de Langevin (4.15) passa a ser escrita como:

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, t)dw(t) \quad (4.18)$$

e a equação de Fokker-Planck torna-se:

$$\frac{\partial [wP_E(w, z)]}{\partial z} = -\frac{\partial [a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [b^2(z, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2} \quad (4.19)$$

Para obter $b(z, t)$, procede-se da mesma forma como na seção anterior, ou seja, utiliza-se a função de estrutura Lagrangeana, resultando nas seguintes expressões:

$$b(z, t) = [C_0 \mathcal{E}(z)]^{1/2} \quad (4.20)$$

ou

$$b(z, t) = [C_0 \mathcal{E}(z)]^{1/2} = \left(2 \frac{\sigma_w^2}{\tau_{Lw}} \right)^{1/2} \quad (4.21)$$

Do mesmo modo, como na seção anterior, o coeficiente $a(z, w, t)$ depende da função densidade de probabilidade Euleriana, $P_E(w, z)$, e deve ser determinado a partir da equação de Fokker-Planck (4.19). Esta é dividida em duas equações, as quais definem a condição de boa mistura (*well-mixed*) de Thomson (1987):

$$a(z, w, t)P_E(w, z) = \frac{\partial}{\partial w} \left[\frac{b^2(z, t)}{2} P_E(w, z) \right] + \phi(z, w, t) \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial \phi(z, w, t)}{\partial w} = -w \frac{\partial P_E(w, z)}{\partial z} \quad (4.23)$$

sujeito à condição:

$$\phi \rightarrow 0 \text{ quando } |w| \rightarrow \infty. \quad (4.24)$$

Para o desenvolvimento do Modelo de Langevin para a difusão turbulenta não homogênea, deve-se utilizar uma FDP não-Gaussiana ou assimétrica. As FDPs não-gaussianas mais utilizadas é a bi-Gaussiana.

4.3.3 Função Densidade de Probabilidade (PDF) – Bi-Gaussiana

A PDF assimétrica pode ser construída a partir da combinação linear de duas Gaussianas (Baerenstsen e Berkowicz, 1984), uma associada aos *updrafts* e outra aos *downdrafts*. Esta PDF é chamada bi-Gaussiana:

$$P_E(w, z) = A_u(z)P_u(w, z) + A_d(z)P_d(w, z) \quad (4.25)$$

onde $A_u(z)$ e $A_d(z)$ são as respectivas probabilidades de ocorrência das áreas ocupadas por *updrafts* e *downdrafts*, sendo que ($A_u + A_d = 1, A_u > 0, A_d > 0$) deve ser respeitado. A representação da PDF gaussiana da velocidade vertical é dada por $P_u(w, z)$ e $P_d(w, z)$, respectivamente, para um *updraft* com velocidade média w_u e desvio padrão $\sigma_u = (\langle w_u^2 \rangle)^{1/2}$, e um *downdraft* com velocidade média w_d e desvio padrão $\sigma_d = (\langle w_d^2 \rangle)^{1/2}$.

A PDF bi-Gaussiana pode ser escrita como:

$$P_E(w, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{A_u}{\sigma_u} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{w - \bar{w}_u}{\sigma_u}\right)^2\right] + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{A_d}{\sigma_d} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{w - \bar{w}_d}{\sigma_d}\right)^2\right] \quad (4.26)$$

Os parâmetros $A_u(z)$, $A_d(z)$, w_u , w_d , σ_u e σ_d são funções da altura z . Para derivar esses parâmetros a $P_E(w, z)$ deve satisfazer as seguintes equações:

$$\overline{w^n}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} w^n P_E(w, z) dw \quad (4.27)$$

ou

$$\overline{w^n}(z) = A_u(z) \int_{-\infty}^{\infty} w^n P_u(w, z) dw + A_d(z) \int_{-\infty}^{\infty} w^n P_d(w, z) dw \quad (4.28)$$

Esta equação também é chamada função geradora de momentos. Calculando os quatro primeiros momentos temos o seguinte sistema: ($\overline{w}(z) = 0$),

$$A_u + A_d = 1 \quad (4.29a)$$

$$A_u w_u + A_d w_d = 0 \quad (4.29b)$$

$$A_u (w_u^2 + \sigma_u^2) + A_d (w_d^2 + \sigma_d^2) = \overline{w^2} \quad (4.29c)$$

$$A_u (w_u^3 + 3w_u \sigma_u^2) + A_d (w_d^3 + 3w_d \sigma_d^2) = \overline{w^3} \quad (4.29d)$$

$$A_u (w_u^4 + 6w_u^2 \sigma_u^2 + 3\sigma_u^4) + A_d (w_d^4 + 6w_d^2 \sigma_d^2 + 3\sigma_d^4) = \overline{w^4} \quad (4.29e)$$

A Eq.(4.23) associada a Eq.(4.27) resulta em:

$$\begin{aligned} \phi(z, w, t) = & -\frac{1}{2} \left(A_u \frac{\partial \overline{w}_u}{\partial z} + \overline{w}_u \frac{\partial A_u}{\partial z} \right) \operatorname{erf} \left[\left(\frac{w - \overline{w}_u}{\sqrt{2} \overline{w}_u} \right)^2 \right] + \overline{w}_u \left[A_u \frac{\partial \overline{w}_u}{\partial z} \left(\frac{w^2}{\sigma_u^2} + 1 \right) + \overline{w}_u \frac{\partial A_u}{\partial z} \right] P_u \\ & + \frac{1}{2} \left(A_d \frac{\partial \overline{w}_d}{\partial z} + \overline{w}_d \frac{\partial A_d}{\partial z} \right) \operatorname{erf} \left[\left(\frac{w - \overline{w}_d}{\sqrt{2} \overline{w}_d} \right)^2 \right] + \overline{w}_d \left[A_d \frac{\partial \overline{w}_d}{\partial z} \left(\frac{w^2}{\sigma_u^2} + 1 \right) + \overline{w}_d \frac{\partial A_d}{\partial z} \right] P_d \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde $\operatorname{erf}(z)$, a função erro, é definida como:

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-s^2) ds \quad (4.31)$$

e $a(z, w, t)$ da Eq.(4.22) torna-se:

$$a(z, w, t) = \frac{1}{P_E(w, z)} \left[\frac{b^2(z, t)}{2} Q + \phi(z, w, t) \right] \quad (4.32)$$

onde

$$b(z, t) = [C_0 \varepsilon(z)]^{1/2} = 2 \frac{\sigma_w^2}{\tau_{L_w}} \quad (4.33)$$

e

$$Q = A_u(z) \frac{(w - \bar{w}_u)}{\sigma_u^2} P_u(w, z) + A_d(z) \frac{(w - \bar{w}_d)}{\sigma_d^2} P_d(w, z) \quad (4.34)$$

O primeiro termo dentro do colchetes na Eq.(4.32) é o termo de perda de memória e o segundo termo se refere a correção drift.

O fechamento do sistema (4.29), é dado por vários trabalhos na literatura. Um fechamento de terceira ordem é sugerido por Luhar e Britter (1989) e Weil (1990), e um fechamento de quarta ordem é sugerido por Du et al. (1994) e Anfossi et al. (1997). Nesta dissertação usaremos o fechamento proposto por Luhar e Britter (1989).

Luhar e Britter assumiram o procedimento de Baerentsen e Berkowicz (1984), os quais determinaram que

$$\sigma_u = |w_u| \quad \text{e} \quad \sigma_d = |w_d| \quad (4.35a)$$

Assim, Luhar e Britter calcularam as seguintes expressões:

$$w_d = \frac{\bar{w}^3 \sqrt{(\bar{w}^3)^2 + 8(\bar{w}^2)^3}}{4\bar{w}^2} \quad (4.35b)$$

$$w_u = \frac{\bar{w}^2}{2w_d} \quad (4.35c)$$

$$A_u = \frac{w_d}{w_u + w_d} \quad (4.35d)$$

$$A_d = 1 - A_u \quad . \quad (4.35e)$$

A suposição $\sigma_u = |w_u|$ e $\sigma_d = |w_d|$ está baseada nas relações entre as velocidades convectivas médias e as energias turbulentas relacionadas aos movimentos convectivos. Na CLC, a turbulência é inteiramente gerada pelos movimentos convectivos. A velocidade média w_u dos *updrafts* é convertida em energia turbulenta representada por σ_u e, nos *downdrafts*, o movimento médio dado por w_d origina energia turbulenta representada por σ_d .

4.4 Cálculo da Concentração em um Modelo Estocástico Lagrangeano

Nos modelos estocásticos Lagrangianos, a concentração é obtida a partir da determinação da trajetória das partículas em suspensão no fluido. Quando o deslocamento das partículas em um escoamento turbulento é visto como um processo estocástico, a posição de cada partícula em cada instante é dada pela posição de maior probabilidade de se encontrar tal partícula (Lamb, 1984). Do ponto de vista numérico, a determinação da difusão turbulenta de poluentes na CLP é mais apropriada dentro de um sistema de referência Lagrangeano, por ser mais simples e não apresentar difusão numérica artificial (Wilson e Sawford, 1996).

As partículas são emitidas a partir da fonte na posição (\vec{x}_0, t_0) e a concentração é calculada em um sensor na posição (\vec{x}, t) . Divide-se o domínio, onde estão contidas as partículas, em pequenos subdomínios, centrado em \vec{x} , o qual representa o volume de um sensor. A concentração é calculada através do tempo de residência de cada partícula no volume do sensor. O tempo de residência, na prática, é calculado contando-se o número de partículas presentes em cada subdomínio no intervalo de tempo Δt .

$$C(\vec{x}) = S \frac{V_f}{V_s} \frac{1}{N_{PEF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \Delta t = S \frac{V_f}{V_s} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS} \quad (4.36)$$

Onde N_{PEF} é o número de partículas emitidas da posição da fonte em cada passo no tempo (Δt), N_{PVS} é o número de partículas no sensor, V_s é o volume do sensor e V_f é o volume da fonte. Tendo N_s sensores e/ou N_f elementos de fonte, a concentração em cada sensor será dada por:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} S_i \frac{V_{fi}}{V_{S,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS,i,j} \quad (4.37)$$

onde C_j é a concentração no j-ésimo sensor, S_i é a i-ésima fonte, $V_{s,i}$ é o volume do i-ésimo sensor, $N_{PEF,i}$ é o número de partículas emitidas da i-ésima fonte, $N_{PVS,i,j}$ é o número de partículas emitidas da i-ésima fonte e que se encontra no j-ésimo sensor. Podemos, ainda, definir uma intensidade de emissão, em gs^{-1} , da i-ésima fonte como sendo:

$$Q_i = S_i V_{f,i} \quad (4.38)$$

E assim, a expressão para o cálculo da concentração pode ser reescrita como:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} Q_i \frac{1}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS,i,j} \quad (4.39)$$

onde, C_j é a concentração no j-ésimo sensor.

SIMULAÇÕES COM O MODELO DE DISPERSÃO LAMBDA E COMPARAÇÕES COM O EXPERIMENTO DE COPENHAGEN

5.1 Modelo de Dispersão LAMBDA

O modelo de dispersão estocástico Lagrangiano LAMBDA (Lagrangian Model for Buoyant Dispersion in Atmosphere), é uma ferramenta numérica, que simula do ponto de vista Lagrangiano, o transporte e a dispersão de contaminantes na CLP (Ferrero&Anfossi, 1998). Este modelo é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para a velocidade aleatória (Thomson, 1987). Com o modelo LAMBDA é possível estudar a dispersão de contaminantes inertes em condições complexas (caracterizadas pela não-homogeneidade das variáveis que determinam a difusão), emitidos de qualquer tipo de fonte: pontual (chaminé), área (cidade) e linha (auto-estrada).

Através do modelo são feitas simulações de certa quantidade de partículas computacionais (partículas fictícias), que imitam o comportamento de uma partícula real, objetivando simular os movimentos atmosféricos, como os sofridos por elementos de fluido ou de contaminantes liberados na atmosfera.

A velocidade e o deslocamento de cada partícula são fornecidos pelas seguintes Eqs.(4.3) e (4.4) apresentadas no capítulo 4 e repetidas aqui:

$$du_i = a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)dt + b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)dw_j(t)$$

e

$$dx_i = (U_i + u_i)dt .$$

onde, $i, j = u, v, w$, \mathbf{x} é o vetor deslocamento, \mathbf{U} é o vetor velocidade média do vento, \mathbf{u} é o vetor velocidade Lagrangiana, $a(\vec{x}, \vec{u}, t)dt$ é o termo determinístico, $b_{ij}(\vec{x}, \vec{u}, t)dw_j(t)$ é o termo estocástico e a quantidade $dw_j(t)$ é um incremento do processo de Wiener. O coeficiente determinístico $a(\vec{x}, \vec{u}, t)dt$ depende da função densidade de probabilidade Euleriana da

velocidade turbulenta e é determinado pela equação de Fokker Planck (Thomson, 1987, Rodean, 1996). As direções horizontais para a função densidade de probabilidade são consideradas gaussianas, enquanto a direção vertical é assumida não-gaussiana. O coeficiente de difusão $b_{ij}(\vec{x}, \vec{u}, t)$ é obtido a partir da função estrutura Lagrangiana e é relacionado à constante de Kolmogorov do subintervalo inercial e com médias de conjunto para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ε . Como consequência da Eq.(1.1), o produto $C_0\varepsilon$ é determinado pelas variâncias de flutuações de velocidade ($\sigma_{Lu}, \sigma_{Lv}, \sigma_{Lw}$) e pela escala de tempo integral Lagrangiana (T_{Lu}, T_{Lv}, T_{Lw}) para uma turbulência bem desenvolvida.

A discretização destas equações são dadas por:

$$(u_i)_{N+1} = (u_i)_N + (a_i)_N \Delta t + (b_{ij})_N (\Delta W_j)_N \quad (5.1)$$

e

$$(x_i)_{N+1} = (x_i)_N + (U_i + u_i)_{N+1} \Delta t \quad (5.2)$$

onde o índice N representa o n-ésimo passo no tempo.

Como já foi mencionado, os modelos de partículas usam um certo número de partículas computacionais (partículas fictícias) para simular a difusão atmosférica. Cada partícula pode ser marcada por uma massa, a qual pode ser constante ou variável no tempo, devido aos efeitos de deposição e reação química (Zannetti, 1990). Portanto, a distribuição espacial da massa das partículas no domínio computacional permite o cálculo de um campo de concentração tridimensional. A concentração (massa por m^3) em um dado tempo e posição é determinada pela contagem do número de partículas em uma célula ou volume imaginário centrado em x, y, z :

$$C(x, y, z, t) = \frac{m_p N_v}{V_C} \quad (5.3)$$

onde m_p é a massa de cada uma das partícula, N_v é o número de partículas no interior do volume de concentração e V_C é o volume ou célula de concentração. A massa de cada partícula é determinada pela seguinte equação:

$$m_p = \frac{Q(t) N_{\Delta t}}{N_p} \quad (5.4)$$

onde, Q é a taxa de emissão, $N_{\Delta t}$ número de passos no tempo e N_p número de partículas emitidas.

5.2 Parâmetros Utilizados nas Simulações

Neste trabalho foram utilizados, os perfis verticais do desvio padrão da velocidade (σ_i) e da escala de tempo Lagrangiana (τ_{Li}) como dados de entrada no modelo estocástico Lagrangiano. Segundo Mangia et al. (2002) a confiabilidade de cada modelo depende fortemente dos caminhos pelos quais os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados à CLP. Aqui, estes parâmetros foram calculados de acordo com a parametrização da turbulência derivada por Degrazia et al. (2000), sendo esta válida somente em condições de homogeneidade horizontal. A teoria da difusão estatística clássica, as propriedades espectrais observadas e as características observadas dos turbilhões contendo energia são usadas para estimar estes parâmetros. Estas parametrizações fornecem valores contínuos para a CLP em todas as elevações ($z_0 \leq z \leq z_i, h$) e todas as condições de estabilidade da instável a estável, onde o z_0 é o comprimento de rugosidade, z_i é a altura da CLP convectiva e h é a altura da CLP neutra ou estável.

As expressões gerais para a variância da velocidade do vento (σ_i^2) e para a escala de tempo Lagrangiana (τ_{Li}) são:

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06c_i \left[\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{2/3} w_*^2}{\left[(f_m^*)_i^c \right]^{2/3}} + \frac{2,32c_i \left[\phi_\varepsilon^{n+s} \right]^{2/3} u_*^2}{\left[(f_m^*)^{n+s}_i \right]^{2/3}} \quad (5.5)$$

e

$$\tau_{Li} = \frac{z}{\sqrt{c_i}} \left\{ \frac{0,14 \left[\frac{-L}{h} \frac{h}{-L} \right]^{1/2}}{\left[(f_m^*)_i \right]^{2/3} w_* \left[\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{1/3}} + \frac{0,059}{\left[(f_m^*)_i \right]^{2/3} \left[\phi_\varepsilon^{n+s} \right]^{1/3} u_*} \right\} \quad (5.6)$$

onde, a variância da velocidade do vento (σ_i^2), proporcional à escala de velocidade ao quadrado, depende das energias cinéticas turbulentas, originadas pelos forçantes convectivo (empuxo) e mecânico (cisalhamento do vento), respectivamente. Do mesmo modo, a escala de tempo de decorrelação Lagrangiana τ_{Li} depende das escalas de tempo associadas aos forçantes convectivo e mecânico. Em ambas as equações (5.5) e (5.6), o primeiro termo contém informações sobre os turbilhões mais energéticos convectivos e o segundo os turbilhões mais energéticos mecânicos. Ainda, w_* é a escala de velocidade convectiva, u_* é a velocidade local de fricção, $\psi_\varepsilon^c = \frac{\varepsilon \cdot h}{w_*^3}$ e $\phi_\varepsilon^{n+s} = \frac{\varepsilon \cdot k z}{u_*^3}$ são as funções adimensionais das taxas de

dissipação, $(f_m^*)_i^c$ e $(f_m^*)_i^{n+s}$ são as frequências reduzidas dos picos espectrais convectivo e neutro ou estável, respectivamente. O termo na raiz quadrada é introduzido para fornecer uma transição contínua

da condição neutra à convectiva. $\frac{-L}{h}$ é um parâmetro de estabilidade médio para a CLP convectiva, k é a constante de von Karman e $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi k)^{-2/3}$ com $\alpha_i = 1,4/3,4/3$ e $\alpha_u = 0,5 \pm 0,05$ para as componentes u , v e w , respectivamente.

Na parametrização da turbulência, dada pelas equações (5.5) e (5.6), é necessário ter expressões para w_* , u_* , ψ_ε^{n+s} , ϕ_ε^{n+s} , $(f_m^*)_i^c$ e $(f_m^*)_i^{n+s}$. Para a CLP convectiva, $(\psi_\varepsilon^c)^{2/3} \approx 0,75$

(Caughey e Palmer, 1979; Højstrup, 1982; Wilson, 1997), $w_* = (u_*) \left(\frac{-h}{kL} \right)^{1/3}$ e, recordando que

$(f_m^*)_i^c = \frac{z}{(\lambda m)_i}$ e $(\lambda m)_i$ é o pico espectral da velocidade turbulenta do vento, expressões de

$(f_m^*)_i^c$ para $i = u, v, w$ podem ser derivadas.

Segundo Kaimal et al. (1976), Caughey (1982) e Degrazia e Anfossi (1998),

$$(\lambda m)_u = (\lambda m)_v = 1,5 z_i \quad (5.7)$$

e

$$(\lambda m)_w = 1,8 z_i \left[1 - \exp\left(-4 \frac{z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(8 \frac{z}{z_i}\right) \right] \quad (5.8)$$

mas,

$$(f_m^*)_i^c = \frac{z}{B_i z_i} \quad (5.9)$$

com $B_u = B_v = 1,5$ e

$$B_w = 1,8 \left[1 - \exp\left(-4 \frac{z}{z_i}\right) - 0,0003 \exp\left(8 \frac{z}{z_i}\right) \right] \quad (5.10)$$

Para uma CLP neutra ou estável, ϕ_ε^{n+s} pode ser escrito como (Sorbjan, 1989):

$$\phi_\varepsilon^{n+s} = \phi^n \left(1 + 3,7 \frac{z}{\Lambda} \right) \quad (5.11)$$

Onde, $\phi_\varepsilon^n = 1,25$ e $\Lambda = L \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{(1,5\alpha_1 - \alpha_2)}$ (Degrazia e Moraes, 1992) é o comprimento de Monin-

Obukhov local. Para a CLP estável, $\alpha_1 = 1,5$ e $\alpha_2 = 1,0$ (Nieuwstadt, 1984). Além disso, para a CLP neutra ou estável, a velocidade de fricção é:

$$u_*^2 = (u_*^2)_0 \left(1 - \frac{z}{h} \right)^{\alpha_1} \quad (5.12)$$

em que $\alpha_1 = 1,7$ para o caso neutro (Wyngaard et al., 1974).

Seguindo Sorbjan (1989), Delage (1974) e Stull (1988), $(f_m^*)_i^{n+s}$ é obtido:

$$(f_m^*)^{n+s} = (f_m^*)^n \left(1 + 0,03a_i \frac{f_c z}{(u_*)_0} + 3,7 \frac{z}{\Lambda} \right) \quad (5.13)$$

onde $(f_m^*)_{is}^n$ é a frequência do pico espectral na superfície para condições neutras e $f_c = 10^{-4} s^{-1}$ é o parâmetro de Coriolis. De acordo com Olesen et al. (1984) e Sorbjan (1989), $(f_m^*)_{us}^n = 0,045$, $(f_m^*)_{vs}^n = 0,16$ e $(f_m^*)_{ws}^n = 0,33$. Na Eq.(5.13), $a_w = 500$ (Hanna, 1968; Hanna, 1981), $a_u = 3889$, $a_v = 1094$.

A parametrização contínua para todas as estabilidades é garantida pelo fato de que condições estáveis e instáveis não podem existir ao mesmo tempo, numa mesma posição. No entanto, efeitos estáveis e neutros podem ocorrer simultaneamente, visto que tanto a turbulência estável quanto a turbulência neutra é gerada por forçantes mecânicos. Portanto, em condições neutro-instável o último termo da Eq.(5.13) torna-se nulo, enquanto em condições estável-neutra o termo $\frac{1}{(f_m^*)_i^c}$ é nulo, nas Eqs.(5.5) e (5.6).

5.3 Experimento de Copenhagen

No experimento de Copenhagen o contaminante (SF6) foi liberado sem empuxo de uma fonte de 115m de altura e coletado ao nível do solo por amostradores de concentração em três distâncias na direção preferencial do vento (entre 2 e 6 km a partir da fonte) como mostrado na Figura 5.1 (Gryning e Lyck, 1984 e 1998). As medidas de concentração foram feitas a cada 20 mim, totalizando 3 medidas em 1 hora. A região do experimento era plana com um comprimento de rugosidade de 0.6m. Os resultados de 23 experimentos convectivos $\left(-\frac{z_i}{L} > 10 \right)$ são apresentados. Todos os dados avaliados (veja Tabela 5.1) foram usados para criar a entrada para as simulações do modelo LAMBDA. O produto $C_0 \varepsilon$, presente no termo estocástico da equação de Langevin, foi calculado em termos da variância da velocidade turbulenta σ_i^2 e da escala de tempo de decorrelação Lagrangiana τ_{Li} , equações (4.1) e (4.2), respectivamente, que foram parametrizadas de acordo com o esquema de parametrização derivado por Degrazia et al. (2000).

As velocidades do vento medidas em 10 e 115 metros foram utilizadas para calcular o coeficiente para o perfil vertical exponencial do vento, que é usado para obter a velocidade do vento como segue (Carvalho et al., 2002):

$$\gamma = \left[\frac{\log(U(115/U(10)))}{\log(115/10)} \right] \quad (5.14)$$

e

$$U(z) = U(10) \left[\frac{z}{10} \right]^\gamma \quad (5.15)$$

onde $U(10)$ é a velocidade do vento em 10m e $U(115)$ é a velocidade do vento em 115m.

No LAMBDA, o domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores e o domínio vertical foi considerado igual à altura da camada limite convectiva, h . O passo no tempo foi mantido constante ($\Delta t = 1s$) e obtido o valor da escala de tempo de decorrelação Lagrangiana:

$$\Delta t = \frac{T_{Li}}{c} \quad (5.16)$$

onde, T_{Li} deve ser o menor valor entre as escalas T_{Lu}, T_{Lv}, T_{Lw} e c é um coeficiente numérico fixado que vale 10. Um total de 100 partículas foram lançadas a partir da fonte durante 1500 passos no tempo. O volume que representa a fonte pontual foi de 0.1m x 0.1m x 0.1m, enquanto o volume para o cálculo da concentração foi de 20m x 20m x 25m. A solução utilizada foi um fechamento de terceira ordem sugerido por Luhar e Britter (1989) já descrito no capítulo 4.

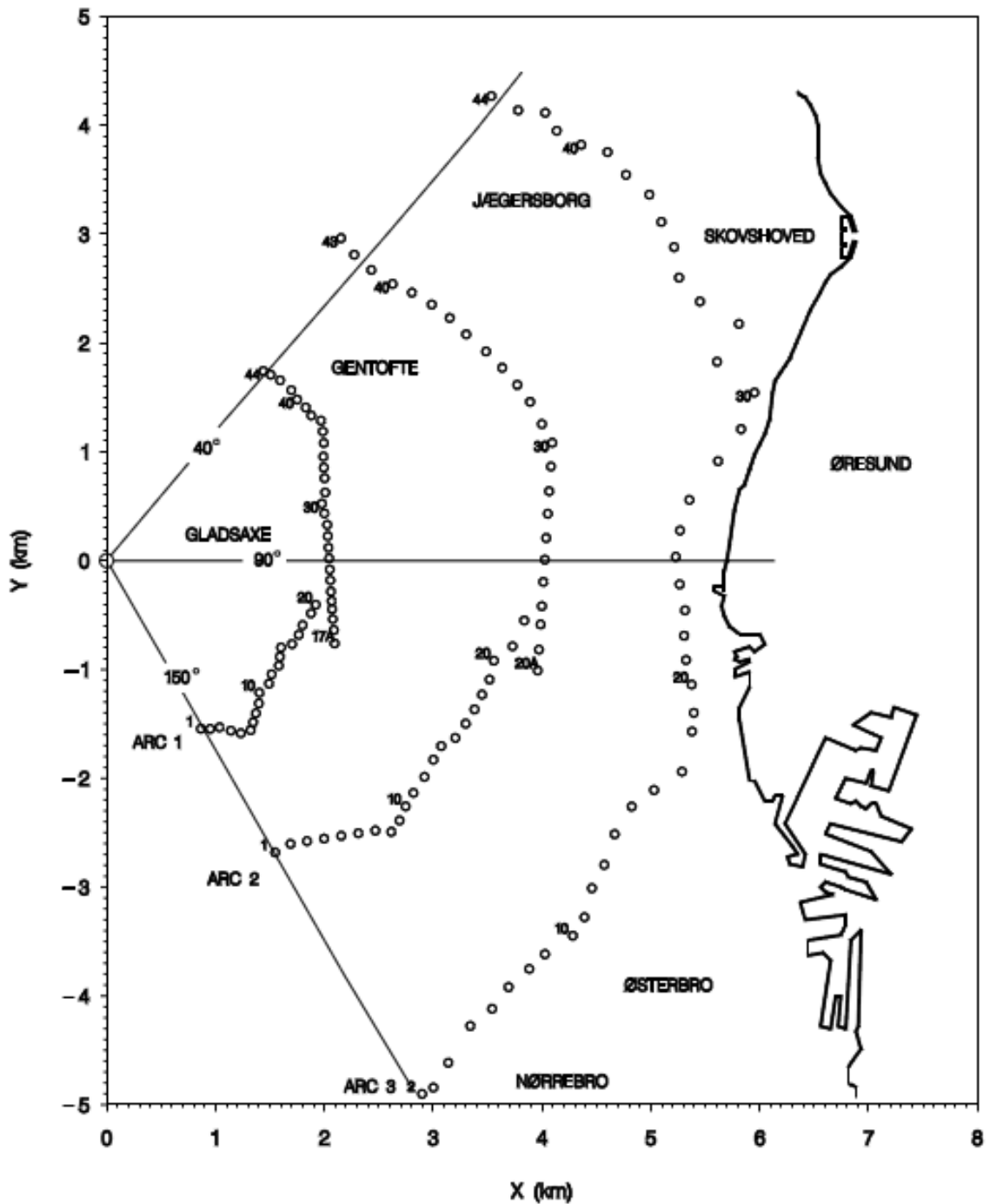


Figura 5.1 – Área do experimento de Copenhagen. O eixo x está apontando para Leste, o eixo y para norte e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos em três arcos concêntricos em relação à fonte. O contaminante foi liberado de uma altura de 115m na posição $(x, y) = (0,0)$. Foram instalados e distribuídos aproximadamente 20 sensores ao longo de cada arco. A linha cheia indica o litoral de Øresund (extraído de Gryning e Lyck, 1998).

Os dados micrometeorológicos do experimento de Copenhagen publicados por Carvalho et al. (2002), foram empregados nas simulações e apresentados na tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Copenhagen.

Exp.	$-L(m)$	$h(m)$	$u_s(m/s)$	$U_{10m}(m/s)$	$U_{115m}(m/s)$	$Q(g/s)$
1	37	1980	0.36	2.1	3.4	3.2
2	292	1920	0.73	4.9	10.6	3.2
3	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2
4	133	390	0.38	2.5	4.6	2.3
5	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2
6	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1
7	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4
8	56	810	0.69	4.2	9.4	3.0
9	289	2090	0.75	5.1	10.5	3.3

5.4 Resultados Obtidos

Os resultados das simulações utilizando-se as taxas de dissipação fornecidas pelas equações (3.41), (3.45) e (3.49) são comparados com os dados de concentração do experimento de Copenhagen. Desta forma, os seguintes índices estatísticos sugeridos por Hanna (1989) são empregados para avaliar a qualidade das simulações realizadas empregando-se as diferentes magnitudes do coeficiente numérico n_c .

- Erro quadrado médio normalizado

$$NMSE = \frac{\overline{(C_0 - C_s)^2}}{C_0 C_s} \quad (5.17)$$

Sendo, $0 < NMSE < 1$, onde, C_0 é a concentração observada e C_s a concentração simulada. Este parâmetro indica a média das diferenças entre C_0 e C_s ao quadrado. Quanto mais próximo de zero, menor é o erro.

- Erro fracional

$$FB = \frac{\overline{C_0} - \overline{C_s}}{0.5(\overline{C_0} + \overline{C_s})} \quad (5.18)$$

Sendo, $-2 \leq FB \leq 2$. O erro fracional mostra se as concentrações médias simuladas superestimam as concentrações médias observadas.

- Desvio padrão fracional

$$FS = 2 \frac{\sigma_0 - \sigma_s}{\sigma_0 + \sigma_s} \quad (5.19)$$

Sendo, $-2 \leq FS \leq 2$. Este índice revela se a dispersão simulada em torno da concentração média é superestimada ou subestimada. Se $\sigma_s > \sigma_0$, o contaminante simulado está mais disperso que o contaminante observado ou vice-versa.

- Coeficiente de correlação

$$R = \frac{\overline{(C_0 - \overline{C_0})(C_s - \overline{C_s})}}{\sigma_0 \sigma_s} \quad (5.20)$$

Sendo, $-1 \leq R \leq 1$. Este parâmetro mede a qualidade do ajuste à verdadeira reta, mediante a qual são relacionadas as concentrações C_0 e C_s , ou ainda o grau de relação linear que existe entre elas.

- Fator dois

$$FA2 = 0.5 \leq \frac{C_s}{C_0} \leq 2 \quad (5.21)$$

Sendo, $0 \leq FA2 \leq 1$. Indica o percentual de partículas que se encontram dentro de um erro de até 100%. Quanto mais próximo de 1 melhor o resultado.

Tabela 5.2 – Comparação entre os valores de concentração observados com os valores de concentração simulados a partir das diferentes magnitudes do coeficiente numérico n_c .

Exp.	Dist.Fonte (m)	$Q(g/s)$	$C_o(\mu gm^{-2})$	$C_s(\mu gm^{-2})$			
				$n_c = 2$	$n_c = 3$	$n_c = 4$	$n_c = 10$
1	1900	3.2	2074	1417	1924	1592	730
1	3700	3.2	739	748	627	593	250
2	2100	3.2	1722	1370	1529	1969	665
2	4200	3.2	944	1041	925	866	319
3	1900	3.2	2624	2969	2327	1986	886
3	3700	3.2	1990	1496	1629	1423	373
3	5400	3.2	1376	1208	1118	986	134
4	4000	2.3	2682	2462	2423	1998	352
5	2100	3.2	2150	2073	1967	1691	1355
5	4200	3.2	1869	1914	1763	1903	729
5	6100	3.2	1590	965	1070	925	362
6	2000	3.1	1228	860	799	929	525
6	4200	3.1	688	663	494	593	270
6	5900	3.1	567	562	378	490	171
7	2000	2.4	1608	1143	1092	1759	421
7	4100	2.4	780	645	607	516	150
7	5300	2.4	535	497	668	313	108
8	1900	3.0	1248	1229	989	897	424
8	3600	3.0	606	800	596	470	208
8	5300	3.0	456	570	575	427	151
9	2100	3.3	1511	1326	1208	1244	706
9	4200	3.3	1026	1071	925	853	333
9	6000	3.3	855	791	746	803	190

Tabela 5.3 – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para as simulações empregando os diferentes valores de n_c .

n_c	NMSE	FB	FS	R	FA2
2	0.05	0.10	0.05	0.92	1.00
3	0.04	0.16	0.11	0.97	1.00
4	0.08	0.20	0.15	0.93	1.00
10	1.89	1.03	0.76	0.69	0.04

Os resultados obtidos a partir das simulações numéricas são apresentados e analisados nas tabelas (5.2) e (5.3) e nas figuras abaixo:

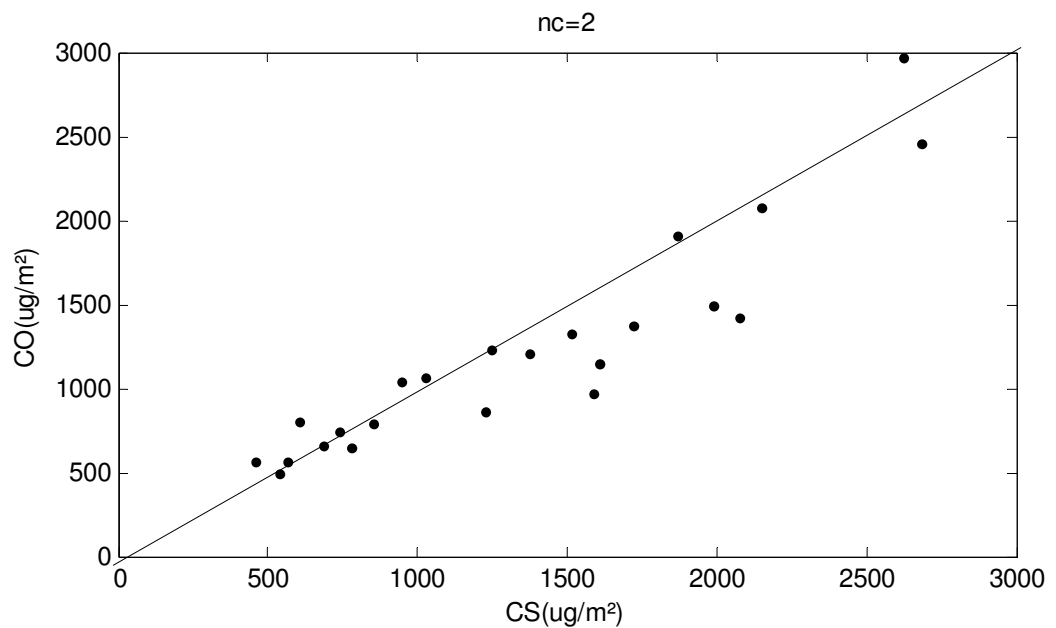


Figura 5.2 - Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando-se $n_c = 2$.

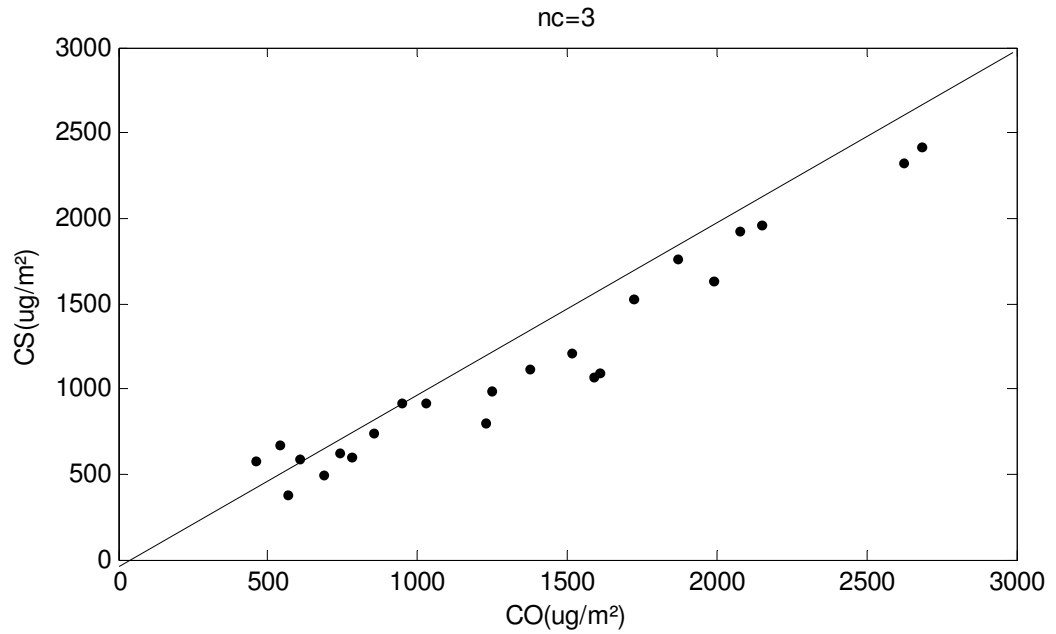


Figura 5.3 – Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando-se $n_c = 3$.

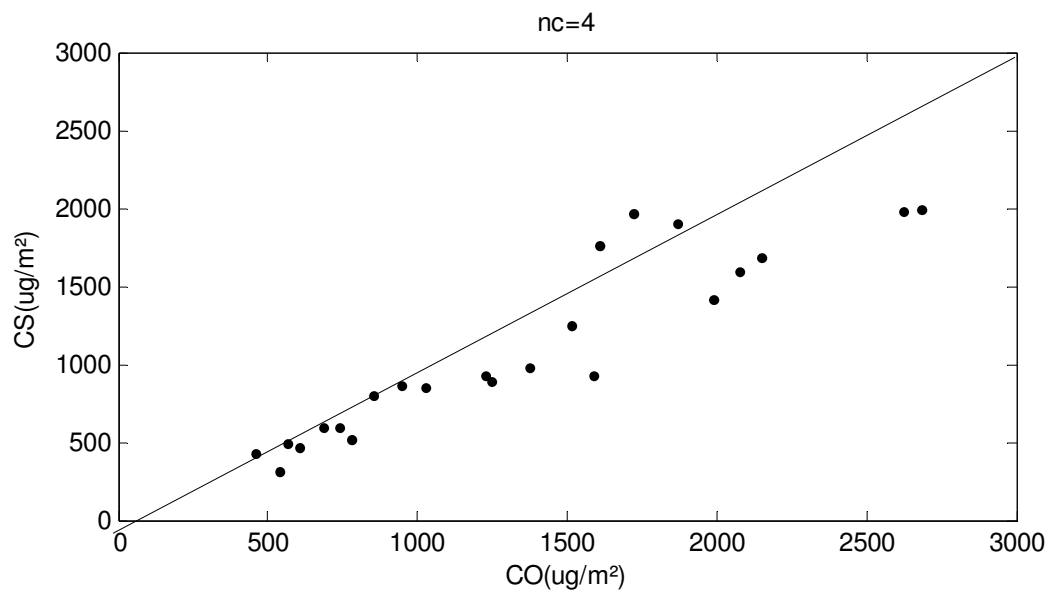


Figura 5.4 - Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhagen utilizando-se $n_c = 4$.

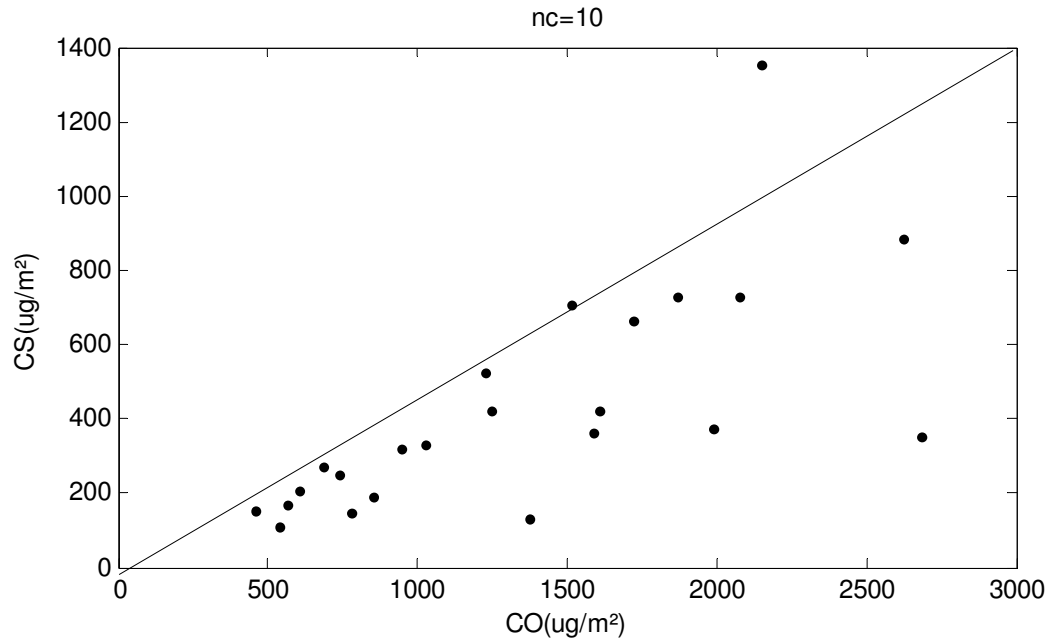


Figura 5.5 – Diagrama de espalhamento entre os valores das concentrações observadas (CO) e simuladas (CS) para o conjunto de dados de Copenhague utilizando-se $n_c = 10$.

O desempenho do LAMBDA é apresentado nas tabelas 5.2 e 5.3 e nas figura 5.2 á 5.5. Estas figuras representam o espalhamento dos dados de concentração simulados (CS) e observados (CO) e mostram que os resultados simulados subestimam levemente os valores observados. De acordo com a tabela 5.3, nota-se que os valores dos índices estatísticos NMSE, FB e FS são próximos de zero e que os índices R e FA2 são próximos de 1 para simulações utilizando-se os coeficientes $n_c=2,3$ e 4. Fazendo-se um teste de sensibilidade no modelo ao empregar-se $n_c = 10$, observa-se que os valores obtidos para estes mesmos índices estatísticos não são satisfatórios. Isto indica que o modelo de difusão estocástico Lagrangiano LAMBDA parametrizado com as diferentes expressões para ε (escritas em termos de $n_c=2,3$ e 4) simula muito bem as concentrações observadas no experimento de Copenhague. Portanto, esse bom desempenho da parametrização turbulenta como determinado pela Eq. (1.1), contendo diferentes valores de n_c , permite concluir que as relações matemáticas descrevendo a taxa de dissipação da energia turbulenta, não representam certezas universais.

Capítulo 6

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste estudo foi utilizada a teoria da difusão estatística de Taylor com diferentes funções de autocorrelação para se obter parâmetros de dispersão. Os parâmetros de dispersão foram expandidos em séries de Maclaurin para se derivar relações que permitem estimar a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Embora, tendo-se empregado funções de autocorrelação distintas, a análise desenvolvida permite derivar taxas de dissipação que são expressas em termos das mesmas variáveis turbulentas. Neste aspecto, a forma funcional que descreve a taxa de dissipação é sempre a mesma independente da função de autocorrelação. Todavia, a escolha da função de autocorrelação seleciona nestas formas funcionais coeficientes numéricos com magnitudes distintas. Esta variação no valor do coeficiente numérico é causada pela nossa incerteza associada à função de autocorrelação descrevendo uma turbulência bem desenvolvida. As formas funcionais para a taxa de dissipação e seus coeficientes numéricos são importantes no desenvolvimento de modelos de dispersão estocásticos Lagrangianos. Assim, os valores encontrados para o coeficiente numérico n_c foram testados no modelo de dispersão de contaminantes LAMBDA empregando-se dados experimentais de concentração observados no experimento de Copenhagen. Os resultados de concentração obtidos nas simulações, quando confrontados com as concentrações observadas reproduzem satisfatoriamente as medidas experimentais. Além do mais, os índices estatísticos de validação do modelo mostram que os diferentes valores do coeficiente numérico n_c não são responsáveis por grandes variações nas concentrações simuladas. Este resultado permite concluir que existe uma incerteza acerca da forma exata da taxa de dissipação da energia cinética turbulenta. Do presente estudo, conclui-se que as relações matemáticas para a forma da taxa de dissipação e para a função de autocorrelação não são universais.

REFERÊNCIAS

ARYA, S. P., 1999. **Air Pollution Meteorology and Dispersion**. Oxford University Press, New York 310 pp.

ANFOSSI, D. et al. Tracer dispersion simulation in low wind speed conditions with a new 2D Langevin equation system. **Atmospheric Environment**, v.40, p.7234 - 7245, 2006.

BERKOWICZ, R., 1986, Monte Carlo Simulation of Plume Dispersion in the Convective Boundary Layer, **Atmospheric Environment**. Environ. 18, 701-712.

CARVALHO, J. C.; DEGRAZIA, G. A.; ANFOSSI, D.; DE CAMPOS, C.R.J.; ROBERTI, D. R.; KERR, A. S. Lagrangian Stochastic Dispersion Modeling for the Release of Contaminants from Tall and Low Sources. **Meteorologische Zeitschrift**, v.11, p.89- 97, 2002.

DEGRAZIA, G.A.; ANFOSSI, D. Estimation of the Kolmogorov constant C_0 from classical Statistical diffusion theory. **Atmospheric Environment**, v. 32, p.3611-3614, 1998.

DEGRAZIA, G.A. et al. On the universality of the dissipation rate functional form and of the autocorrelation function exponential form. **Atmospheric Environment**, v. 39, p. 1917-1924, 2005.

DEGRAZIA, G.A. et al. Turbulence parameterization for PBL dispersion models in all stability conditions. **Atmospheric Environment**, v. 34, p. 3575-3583, 2000

FERRERO, E. et al. Lagrangian particle model LAMBDA: evaluation against tracer data. **International Journal Environment and Pollution**, v.5, p.360-374, 1995.

FRENKIEL, F.N. Turbulent diffusion: mean concentration distribution in a flow field of homogeneous turbulence. **Advances in Applied Mechanics**, v.3, p.61-107, 1953

HANNA, S.R. Applications in air pollution modelling. In: Nieuwstadt, F.T.M., van Dop, H. (Eds.), **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling**. Reidel, Dordrecht, p.275-310, 1982.

HINZE, J.O. **Turbulence**. McGraw-Hill, New York, 1975, 790p.

LUHAR, A.; BRITTER, R., 1989. A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Atmospheric Environment**, Elsevier, 23, n. 9, 1911-1924.

OBUKHOV, A.M. **Description of turbulence in terms of Lagrangian variables. Atmospheric Diffusion and Air Pollution** (Ed. F.N. Frenkiel e P.A. Sheppard.), Proceedings of symposium held at Oxford, August 24-29, 1958, p. 113-116, Academic Press, New York, 1959.

PANOFSKY, H.; DUTTON, J., 1984. **Atmospheric turbulence**. John Wiley & Sons. 397pp.

PASQUILL, F., SMITH, F. B., 1983. **Atmospheric Diffusion**. Ellis Horwood, Chichester, UK 437pp.

PHILLIPS, P., PANOFSKY HA., 1989. A re-examination of lateral dispersion from continuous sources. **Atmospheric Environment** 16, 1851-1859.

POPE, S B., 1994. Lagrangian PDF methods for turbulent flows . **Annual review of fluid mechanics**, Annual Reviews, 26,. 23-63.

POPE, S., 2000. **Turbulent Flows**. Cambridge, New York, 771pp.

ROBERTI, D.R. **A influência da constante da Kolmogorov em um modelo de dispersão estocástico Lagrangeano**. Santa Maria, PPGF-UFSM, 2001.74p (Dis, Mestr.)

ROBERTI, D.R. **Problemas inversos em física da atmosfera. 2005**.Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria

RODEAN, H., 1996 Stochastic Lagrangian models of turbulent diffusion. American Meteorological Society , Boston. p.84.

SORBJAN, Z. **Structure of the Atmospheric Boundary Layer**. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 317p, 1989.

STULL, R.B. **An Introduction to Boundary Layer Meteorology**. Kluwer Academic Publishers, Boston, 666p, 1988.

TAYLOR, G.I. **The present position in the theory of turbulent diffusion**. Advances in Geophysics, v.6, p.101-111, 1959.

TENNEKES, H. The exponential Lagrangian correlation function and turbulent diffusion in the inertial subrange. **Atmospheric Environment**, v.13, p.1565-1667, 1979.

THOMSON, D.J. Criteria for the selection of stochastic models of particle trajectories in turbulent flows. **Journal of Fluids Mechanics**, v.180, p.529-556, 1987.

TIMM, A. U.; **Estudo da difusão turbulenta empregando modelos estocásticos Lagrangianos**. Dissertação de mestrado em física, 2007, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS, 2007.

Van Dop, H. **Some topics in turbulent diffusion**. In: Diffusion and transport of pollutants in the atmospheric flow fields. U.K.:Albert Gry and Franz-S. Rys, Kluwer, Dordrecht, 1995.216p.

YEUNG, P. L., 2002. Lagrangian Investigations of Turbulence. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Annual Reviews, 34, n. 1, 115-142.