

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

**DERIVAÇÃO DE UM SKEWNESS DA VELOCIDADE
VERTICAL TURBULENTA A PARTIR DE UM
MODELO LES**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Silvana Maldaner

Santa Maria, RS, Brasil

2010

DERIVAÇÃO DE UM SKEWNESS DA VELOCIDADE VERTICAL TURBULENTA A PARTIR DE UM MODELO LES

por

Silvana Maldaner

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. 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

**DERIVAÇÃO DE UM SKEWNESS DA VELOCIDADE VERTICAL
TURBULENTA A PARTIR DE UM MODELO LES**

elaborada por
Silvana Maldaner

como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em Meteorologia

COMISSÃO EXAMINADORA:

Dr. Gervásio Annes Degrazia
(Presidente/Orientador)

Dr. Jonas da Costa Carvalho (UFPEL)

Dr. Débora Regina Roberti (UFSM)

Santa Maria, 13 de agosto de 2010.

AGRADECIMENTOS

Agradeço...

Aos meus pais...

Em especial ao professor Gervásio Annes Degrazia pela orientação e amizade.

Aos colegas Guilherme, Franciano e Andréa pela orientação durante o trabalho.

À professora Débora e ao professor Humberto Rizza pela co-orientação.

Ao professor Jonas da Costa Carvalho pelo auxílio no entendimento do modelo lagrangiano.

Aos professores do grupo de Ensino de Física (GEF-UFSM).

Ao Diogo pela ajuda, compreensão e apoio em todos os momentos da realização deste trabalho.

Aos meus colegas da Meteorologia e da Física.

A todos os amigos que incentivaram e apoiaram a realização deste trabalho.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1- Distribuição de frequência.....	20
Figura 2 - Distribuição de frequência com terceiro momento negativo.....	20
Figura 3 - Distribuição de frequência com terceiro momento nulo.....	21
Figura 4 - O espectro de energia turbulenta subdividido em três grandes regiões espectrais ..	30
Figura 5 - Perfil da variância da velocidade vertical (normalizada) a partir da viscosidade de subfiltro de Taylor	36
Figura 6 - Perfis da variância da velocidade vertical.....	37
Figura 7 - Perfil da variância da velocidade vertical (normalizada) a partir da viscosidade de subfiltro de Heisenberg.....	37
Figura 8 - Perfil da variância da velocidade vertical a partir da viscosidade de subfiltro de Taylor	38
Figura 9 - Perfil da variância da velocidade vertical a partir da viscosidade de subfiltro de Heisenberg.....	38
Figura 10 - Os contornos da velocidade vertical em planos horizontais.....	40
Figura 11 - Skewness da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Taylor	41
Figura 12 - Skewness da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg.....	42
Figura 13 - Perfis do skewness da velocidade vertical turbulenta.....	43
Figura 14 - Terceiro momento da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Taylor	44
Figura 15 - Terceiro momento da velocidade vertical turbulenta (normalizado por w_*) com a viscosidade de subfiltro de Taylor.....	44
Figura 16 - Momento terceiro da velocidade vertical turbulenta (normalizado por w_*) com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg	45

Figura 17 - Perfis do terceiro momento da velocidade vertical.....	46
Figura 18 - Comparação entre o terceiro momento de LES e os dados de Lenschow et al.(1980).....	46
Figura 19 - Momento terceiro da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg	47
Figura 20 - Perfis do terceiro momento empregados no modelo LAMBDA	52

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - Relação entre a estabilidade atmosférica e L	18
TABELA 2 - Parâmetros internos do LES	35
TABELA 3 - Parâmetros internos para as simulações	35
TABELA 4 - Valores das constantes para ambos os ajustes algébricos	39
TABELA 5 - Valores das constantes para ambos os ajustes algébricos	43
TABELA 6 -Valores de skewness simulados na camada limite superficial	55
TABELA 7 - Valores de skewness da velocidade vertical turbulenta observados	55
TABELA 8-Valores do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta observados	56
TABELA 9 - Valores do Terceiro momento Simulados e Observados na Camada Limite Superficial.....	56
TABELA 10 - Parâmetros meteorológicos medidos durante a execução do projeto Prairie Grass	52
TABELA 11 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento obtido por simulação com viscosidade de subfiltro de Taylor. Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.	65
TABELA 12 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se skewness obtido por simulação com viscosidade de subfiltro de Heisenberg. Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.	65
TABELA 13 - Resultados da análise estatística realizada a partir do modelo de Hanna para ambas as simulações.	66
TABELA 14 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA	

utilizando-se o terceiro momento de Weil (1990). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.....	67
TABELA 15 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se terceiro momento de Rotach (1996). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.....	68
TABELA 16 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento de De Baas et al. (1986). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.	69
TABELA 17 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento obtido por Franzese et al. (1999). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.	70
TABELA 18 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento dado pela Eq.(5.14). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.....	71
TABELA 19 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento dado pela Eq.(5.15). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.....	71
TABELA 20 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento dado pela Eq.(5.22). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.....	72
TABELA 21 - Desempenho do modelo LAMBDA a partir do índices estáticos de Hanna(1989).....	73
TABELA 22 - Desempenho do modelo LAMBDA em regiões próximas da fonte.....	73

SUMÁRIO

RESUMO	10
ABSTRACT	11
1. INTRODUÇÃO	12
2. CAMADA LIMITE PLANETÁRIA	16
2.1 Camada Limite Atmosférica	16
2.1.1 Camada Limite Convectiva	16
2.1.1.1 Camada Limite Superficial	16
2.1.1.2 Camada Bem Misturada Convectiva	17
2.1.1.3 Camada Interfacial.....	17
2.2 Camada Limite Residual	17
2.3 Camada Limite Estável	17
2.4 Escala de Comprimento de Monin-Obukhov	17
2.5 Definições estatísticas	18
2.6 Teoria de Difusão Estatística de Taylor	21
2.7 Teoria de transferência de energia de Heisenberg	24
3 DESCRIÇÃO DO MODELO LES	18
3.1 LES um modelo do tipo média de volume	18
3.2 Principais equações do modelo LES	26
3.3 Modelo de subgrade (viscosidade turbulenta)	28
4 DERIVAÇÃO DA VISCOSIDADE DE SUBFILTRO DE LES	30
5 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA COM O MODELO LES	35
5.1 Experimento numérico com a utilização da viscosidade de subfiltro de Taylor e Heisenberg	35
5.2 Variância da velocidade vertical turbulenta	35
5.3 Terceiro momento e skewness da velocidade vertical	39
5.4 Parametrizações para o terceiro momento	47

5.5	Parametrizações do $\overline{w^3}$ aplicadas a problemas de dispersão	49
5.5.1	Modelo de De Baas	49
5.5.2	Modelo de Rotach	50
5.5.3	Modelo de Weil	51
5.5.4	Terceiro momento de Kastner-Klein para dados de túnel de vento	51
5.5.5	Terceiro momento de Franzese	52
6	ANÁLISE DOS RESULTADOS NUMÉRICOS E COMPARAÇÃO COM DADOS OBSERVACIONAIS	54
6.1	Descrição do sítio experimental e cálculo do skewness	54
6.2	Resultados encontrados	54
7	DESCRIÇÃO DO MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO	57
7.1	Desempenho do Modelo LAMBDA	61
8	RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA COM O MODELO LAMBDA	63
8.1	Comparação com os dados do experimento de Prairie Grass	64
8.2	Simulação com o terceiro momento de LES com viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg	64
8.3	Simulação com o terceiro momento Weil 1990	66
8.4	Simulação com o terceiro momento Rotach	67
8.5	Simulação com o terceiro momento de De Baas	68
8.6	Simulação com o terceiro momento de Franzese (1999)	69
8.7	Simulação com o terceiro momento obtido por LES e pela relação de similaridade	70
8.8	Simulação com o terceiro momento Kastner-Klein (2001)	72
8.9	Comparação entre os resultados obtidos	75
9	CONSIDERAÇÕES FINAIS	77

RESUMO

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

DERIVAÇÃO DE UM SKEWNESS DA VELOCIDADE VERTICAL TURBULENTA A PARTIR DE UM MODELO LES

AUTORA: SILVANA MALDANER

ORIENTADOR: GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 13 de agosto de 2010.

A camada limite planetária (CLP) é um sistema físico que apresenta uma variedade de estados complexos caracterizados pelo fenômeno da turbulência. O entendimento dos padrões de turbulência e os seus detalhes estruturais é de fundamental importância nas grandes e pequenas escalas meteorológicas e na dispersão atmosférica. Do ponto de vista numérico, a turbulência na CLP tem sido investigada empregando Large Eddy Simulation Models (LES). Nos modelos de Simulação dos Grandes Turbilhões, os graus de liberdade contendo a energia principal do campo turbulento são resolvidos explicitamente, enquanto o efeito dos menores e mais isotrópicos é parametrizado. A modelagem destes movimentos turbulentos menores e residuais é normalmente baseada em argumentos heurísticos. Tais movimentos são também chamados de subfiltro ou subgrade e a descrição dos seus efeitos constitui um problema fundamental na construção de modelos de Simulação dos Grandes Turbilhões. Desta forma, a derivação de viscosidades de subfiltro expressa em termos do número de onda de corte é um procedimento fundamental na metodologia LES. O objetivo do presente estudo é derivar uma nova viscosidade turbulenta de subfiltro baseada teoria de difusão estatística de Taylor. Como um objetivo adicional, esta nova viscosidade será empregada em um modelo LES para se obter um novo perfil do skewness da velocidade vertical turbulenta na camada limite convectiva (CBL). Uma comparação entre os resultados do skewness gerado pela simulação LES com dados observados do skewness na superfície mostra que os valores modelados estão de acordo com os observados. O perfil vertical do skewness simulado pelo LES é empregado em um modelo estocástico de difusão Lagrangiano para reproduzir as concentrações de contaminantes medidas durante o experimento de Prairie Grass. Este novo perfil de skewness simulado a partir do LES pode ser usado em modelos de difusão para reproduzir concentrações observadas de contaminantes.

Palavras-chave: Dispersão de contaminantes; turbulência; modelos LES

ABSTRACT

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

DERIVATION OF THE VERTICAL VELOCITY SKEWNESS FROM LES MODEL

AUTORA: SILVANA MALDANER

ORIENTADOR: GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 13 de agosto de 2010.

The planetary boundary layer (PBL) is a physical system presenting a variety of complex states characterized by the turbulence phenomenon. An understanding of the turbulence patterns and its structural details is of fundamental importance in large and small meteorological scales and atmospheric dispersion. From the numerical point of view, the PBL turbulence has been investigated employing LES models. In LES, only the energy-containing eddies of the degrees of freedom of the turbulent field are explicitly resolved and the effect of the smaller, more isotropic eddies, needs to be parameterized. Modeling these residual turbulent motions, which are also termed subfilter-scale motions, is in large part a phenomenological procedure based on heuristic arguments. These movements are called subfiltro or subgrade and the description of its effects is a major problem in the formulation models of large eddy simulation. Therefore, the derivation of subfilter viscosities expressed in terms of a cutoff wave number is a fundamental procedure in LES methodology. The purpose of the present study is to derive a new turbulent subfilter viscosity based on the energy at cutoff from the Taylor statistical diffusion theory. As an additional purpose, this new viscosity is used in a LES model to obtain a new profile of the vertical velocity skewness in the convective boundary layer (CBL). A comparison between the results of the skewness generated by the LES simulation with the observed skewness values in surface shows that the calculated numerically values are consistent with those observed. Vertical profiles of the simulated skewness by the LES is employed in a Lagrangian stochastic diffusion model to reproduce the contaminants concentrations measured during the Prairie Grass experiment. This new profile simulated from the LES can be used in diffusion models to reproduce the observed contaminants concentrations.

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A dispersão de contaminantes na atmosfera tornou-se um tema muito discutido nos últimos anos. Este fato ocorreu em virtude da crescente preocupação com o controle da qualidade do ar. Uma vez que este controle é realizado mediante redes de monitoramento da qualidade do ar e que, por motivos econômicos, o número de pontos de medida é reduzido, uma boa caracterização dos processos de difusão que ocorrem na atmosfera é de extrema importância. Sendo assim, faz-se necessária a utilização de modelos matemáticos que simulam o transporte e a difusão dos poluentes na atmosfera (Moreira; Tirabassi, 2004). Atualmente, a técnica de Simulação dos Grandes Turbilhões (LES, do inglês Large Eddy Simulation) tem sido uma ferramenta bastante utilizada para este fim.

Os modelos LES têm sido frequentemente empregados para estudar os padrões e as características do fenômeno de turbulência que ocorre na camada limite planetária (CLP). Nestes modelos, os efeitos dos turbilhões que possuem a maior energia são simulados (resolvidos explicitamente) e os de menor energia são modelados (parametrizados) (Rizza, 2005). Desta maneira, em modelos LES ocorre a separação do escoamento em escalas, escalas resolvidas e escalas de subgrade (SGS, do inglês sub-grid-scale) ou subfiltro. Na determinação das componentes de subgrade são empregados os modelos fornecidos por Deardorff (1979) e Smagorinsky (1963).

Uma parametrização amplamente empregada para o tensor de SGS é descrita na forma (Smagorinsky, 1963; Sullivan et al., 1994)

$$\tau_{ij} = -\nu_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad 1.1$$

onde u_i e u_j são as componentes resolvidas da velocidade e ν_T é a viscosidade de subfiltro, proposta por Deardorff (1973, 1980), que pode ser escrita na forma

$$\nu_T = c_k \ell_0 \sqrt{e} \quad 1.2$$

onde $c_k = 0,1$ é uma constante, ℓ_0 é a escala de comprimento de mistura (Mason, 1994) e e é a energia cinética turbulenta da escala de subfiltro.

A maioria dos modelos que descrevem o termo de tensão residual empregam uma viscosidade turbulenta de subfiltro (Lesieur; Metais, 1996). A interpretação física do conceito de viscosidade de subfiltro está relacionada ao fato de que o mecanismo de transferência de energia das escalas resolvidas para as escalas de subgrade é semelhante ao mecanismo molecular representado por uma viscosidade (Degrazia, 2009).

Degrazia et al. (2007) propôs uma viscosidade turbulenta de subfiltro para os modelos LES baseada na teoria de transferência de energia de Heisenberg. Esta viscosidade de subfiltro é expressa em termos do número de onda corte para o subintervalo inercial

$$\nu_T = 0,093e^{1/2}\Delta \quad 1.3$$

onde Δ é a largura do filtro.

Neste trabalho, deriva-se uma nova viscosidade de subfiltro. Esta nova parametrização é descrita em termos de um número de onda de corte e é obtida a partir da teoria de difusão estatística de Taylor. Emprega-se a viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg, proposta por Degrazia et al. (2007) no código LES, para simular uma camada limite fortemente convectiva. O objetivo deste estudo é obter uma expressão algébrica para o perfil vertical do skewness da velocidade vertical turbulenta, simulado pelo modelo LES descrito acima. Um objetivo adicional deste trabalho será a implementação destes perfis de skewness (calculados a partir das viscosidades de Taylor e Heisenberg) no modelo de partículas estocástico lagrangiano LAMBDA (do inglês Lagrangian Model for the Buoyant Emission Dispersion in Atmosphere) e comparar os resultados com outras parametrizações para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta.

O skewness é uma medida da assimetria da distribuição. Se a curva de distribuição de frequências for simétrica o skewness será nulo. Se a distribuição for desviada para esquerda, diz-se que ela tem skewness negativo e se for desviada para direita, skewness positivo. O skewness é definido a partir da seguinte equação

$$S_w = \frac{\overline{w^3}}{(\sigma_w^2)^{3/2}} \quad 1.4$$

onde w' é a flutuação de velocidade vertical e σ_w^2 é a variância da velocidade vertical.

O skewness presente na função densidade de probabilidade da velocidade vertical é apontado como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes abandonados por altas chaminés. Além disso, o emprego do skewness em modelos de dispersão leva em conta o efeito do transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes, considerando de um modo mais completo a estrutura da turbulência. Dessa forma, é importante considerar o skewness nestes modelos. (Buligon, 2004)

A análise dos processos físicos que ocorrem na camada limite superficial é relevante para a compreensão do transporte de diferentes espécies entre a superfície e a atmosfera. Dessa forma, o skewness da velocidade vertical turbulenta é um parâmetro estatístico importante para descrever a distribuição de movimentos ascendentes e descendentes na camada limite planetária. Por ser um indicador da distribuição de updrafts e downdrafts, o seu perfil vertical é empregado nas parametrizações para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta nos modelos estocásticos lagrangianos.

Os modelos estocásticos lagrangianos são ferramentas importantes na descrição da dispersão de contaminantes na atmosfera. Neste trabalho, será utilizado o modelo de partículas estocástico lagrangiano proposto por Ferrero et al. (1995) e Carvalho et al. (2002).

O LAMBDA é um modelo tridimensional que simula a dispersão de escalares passivos sobre terreno plano. Neste modelo, o contaminante é emitido a partir de uma fonte e coletado em diversas posições ao nível da superfície. Faz-se o cálculo da concentração de poluentes a partir das partículas simuladas e compara-se o valor da concentração simulada com o valor observado.

O desempenho do modelo LAMBDA empregando as diferentes formulações do terceiro momento da velocidade vertical é avaliado mediante os índices estatísticos de Hanna (1989).

No Capítulo 2, faz-se uma descrição da camada limite planetária e de alguns conceitos associados à turbulência. Uma descrição do modelo de simulação dos grandes turbilhões é realizada no Capítulo 3. A derivação da nova viscosidade de subfiltro baseada na teoria de difusão estatística de Taylor é apresentada no Capítulo 4. Os resultados da simulação LES empregando as viscosidades de subfiltro de Taylor e Heisenberg são apresentados no Capítulo 5, onde também são discutidas as parametrizações existentes na literatura para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta. Uma análise dos resultados numéricos e comparação com dados observacionais de skewness é realizada no Capítulo 6. Uma descrição do modelo estocástico lagrangiano (LAMBDA) e o seu desempenho na simulação da concentrações dos contaminantes

medidas durante o experimento de Prairie Grass é realizada no capítulo 7. Os resultados da simulação numérica com o modelo LAMBDA são apresentados no capítulo 8. O Capítulo 9 destina-se às considerações finais.

CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

2.1 Camada Limite Atmosférica

A Camada Limite Atmosférica (CLA) ou Camada Limite Planetária (CLP) é a porção da atmosfera mais próxima ao solo (baixa troposfera). Segundo Stull (1988), a CLP é a região na qual a parte inferior da atmosfera fica sujeita aos efeitos superficiais (trocas verticais de energia na forma de calor, momento e outras diferentes espécies físicas).

A estrutura da CLA, num período de 24 horas, pode ser dividida em Camada Limite Convectiva (CLC), Camada Limite Residual (CLR) e Camada Limite Estável (CLE)

2.1.1 Camada Limite Convectiva

A CLC ou CLA instável é caracterizada por um fluxo de energia na forma de calor sensível positivo ($H > 0$). Ao amanhecer, o fluxo de energia na forma de calor é positivo devido à elevação da temperatura da superfície pela radiação absorvida e reemitida para a atmosfera. Esta elevação de temperatura gera movimentos ascendentes e descendentes das parcelas de ar. Desta forma, o principal mecanismo de movimento na CLC é produzido por efeito térmico.

Segundo Deardorff (1980), a CLC pode ser dividida ainda em Camada Limite Superficial, Bem Misturada e Interfacial.

2.1.1.1 Camada Limite Superficial

A Camada Limite Superficial (CLS) é a camada que fica imediatamente acima da superfície da Terra. Esta região fica na parte inferior da Camada Limite Planetária. Na CLS predomina a turbulência mecânica e os fluxos turbulentos variam menos de 10% de sua magnitude (Stull, 1988).

2.1.1.2 Camada Bem Misturada Convectiva

A Camada Bem Misturada Convectiva (CBMC) é a camada caracterizada por uma forte mistura associada ao fluxo vertical de energia na forma de calor positivo.

2.1.1.3 Camada Interfacial

A Camada Interfacial é a camada onde a estrutura da turbulência é dominada por efeitos de entranhamento. Nesta região, ocorrem as trocas verticais de calor e momento com a atmosfera livre (Caughey, 1982).

2.2 Camada Limite Residual

A Camada Limite Residual (CLR) forma-se próximo ao pôr-do-sol, quando inicia o decaimento da turbulência. Sendo assim, a CLR é a camada na qual a turbulência existente é um resíduo da CLC.

2.3 Camada Limite Estável

A Camada Limite Estável (CLE) ou Camada Limite Noturna (CLN) surge no final do dia, quando o fluxo de energia na forma de calor sensível torna-se negativo e a superfície da Terra diminui sua temperatura. Sendo assim, a turbulência começa a decair, resultando em uma estrutura turbulenta estavelmente estratificada. Nesta camada a turbulência é predominantemente mecânica.

2.4 Escala de Comprimento de Monin-Obukhov

Existem vários critérios para caracterizar a estabilidade dinâmica da atmosfera. No presente estudo, utiliza-se a escala de comprimento de Monin-Obukhov (L). Esta escala é definida como

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

onde k é a constante de Von Karman, $\overline{w'\theta'}$ é o fluxo turbulento de energia na forma de calor sensível, u_* é a velocidade de fricção na superfície, g é a aceleração da gravidade e $\bar{\theta}$ temperatura potencial média da camada.

A interpretação física de L está associada à importância dos mecanismos de geração mecânica de turbulência em relação aos térmicos.

Segundo Seinfeld (1996), a estabilidade atmosférica está relacionada ao L de acordo com a Tabela 1.

Tabela 1 - Relação entre a estabilidade atmosférica e L

Estabilidade	L (m)
Muito instável	$-100 < L < 0$
Instável	$-10^5 < L < -100$
Neutra	$ L > 10^5$
Estável	$10 < L < 10^5$
Muito estável	$0 < L < 10$

2.5 Definições estatísticas

Há na estatística alguns parâmetros que caracterizam a dispersão de um conjunto de dados, e fornecem informações sobre a distribuição destes. Para definir estes parâmetros apresenta-se a definição da função densidade de probabilidade.

A função densidade de probabilidade (PDF) de uma variável x' é definida por

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x') dx' = 1 \quad 2.2$$

Onde a PDF, por definição, é um valor real e positivo.

O conhecimento da PDF é importante para determinação dos momentos estatísticos (Arya, 1999), pois

$$\overline{x^n} = \int_{-\infty}^{\infty} x^n P(x) dx \quad 2.3$$

Dessa forma, o primeiro momento será definido na forma

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x) dx \quad 2.4$$

E por definição o primeiro momento estatístico é nulo.

O segundo momento estatístico é chamado de variância. A variância é uma boa medida da dispersão de uma amostra de dados. Este parâmetro é definido por (Stull, 1988)

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=0}^{n-1} (x_i - \overline{x})^2 \quad 2.5$$

Quando é grande, $1/(n-1) \cong 1/n$.

O terceiro momento pode ser expresso por

$$M = \sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^3 \quad 2.6$$

Do ponto de vista estatístico, o terceiro momento define o skewness.

$$S_w = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^3}{\sigma_x^{3/2}} \quad 2.7$$

O skewness é uma medida da assimetria da forma da distribuição. Isso porque está associado ao quanto a curva de frequência se desvia ou se afasta da posição simétrica. Esta grandeza estatística pode ser interpretada a partir das curvas de distribuição de frequência

De modo geral, caracteriza-se as distribuições de frequência em:

- Assimétrica à direita ou terceiro momento positivo (Figura 1).

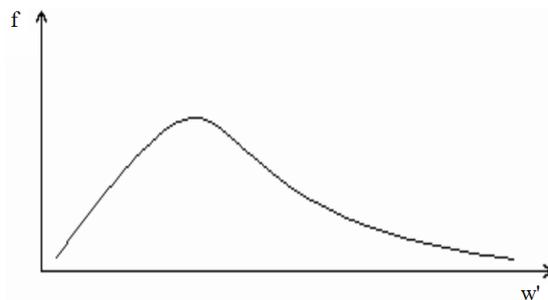


Figura 1– Distribuição de frequência.

Como se pode observar na figura 1 para uma curva de distribuição de frequência positiva a cauda da curva é mais alongada a direita da ordenada máxima.

-Assimétrica à esquerda ou terceiro momento negativo (Figura 2).

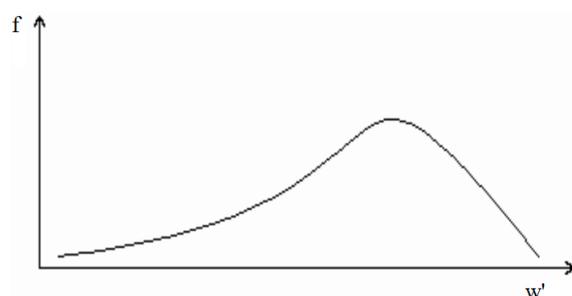


Figura 2 - Distribuição de frequência com terceiro momento negativo

Observando-se a Figura 2 pode-se notar que cauda da curva é mais alongada a esquerda da ordenada máxima.

- Assimetria nula ou simétrica, terceiro momento nulo (Figura 3).

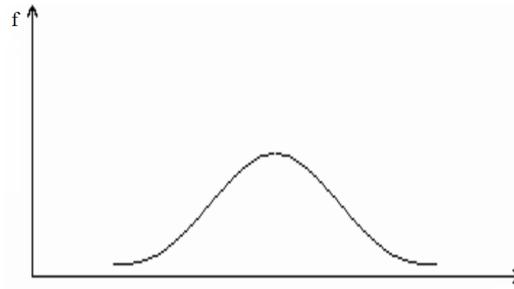


Figura 3 - Distribuição de frequência com terceiro momento nulo.

Na figura 3, que apresenta a distribuição de frequência com terceiro momento nulo, observa-se que a curva é simétrica em relação à ordenada máxima.

2.6 Teoria de Difusão Estatística de Taylor

O modelo de difusão estatística de Taylor é um modelo que se aplica a um campo de turbulência homogêneo e estacionário, para descrever a turbulência a partir do movimento contínuo dos elementos de fluido.

Considerando-se o modelo de difusão estatística de Taylor, assume-se que o movimento das partículas de um fluido, em um campo de escoamento turbulento, por flutuações de velocidades (Degazia et al., 2010). Dessa forma, se a componente turbulenta da velocidade é v_i , a posição do elemento de fluido que deixa a origem no tempo $t = 0$, é

$$X_i(t) = \int_0^t v_i(t') dt' \quad 2.8$$

onde $i = (u, v, w)$.

Multiplicando-se a Eq.(2.8) por $v_i(t)$

$$X_i(t)v_i(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} X_i^2 \right) \quad 2.9$$

e fazendo-se a média sobre o ensemble, obtém-se

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}X_i^2\right) &= X_i(t)v_i(t) \\ \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}X_i^2\right) &= \int_0^t v_i(t')dt'\end{aligned}\tag{2.10}$$

Uma vez que a teoria de difusão estatística de Taylor descreve a turbulência cujas propriedades estatísticas não variam no tempo e possuem a mesma estrutura em todas as partes (Palandi, 2005), define-se a função de correlação R_{Li}

$$R_{Li} = \overline{v_i(t')v_i(t'+\tau)} = v_i^2 \rho_{Li}(\tau)\tag{2.11}$$

onde $\tau = t - t'$

Reescrevendo-se Eq.(2.8) em função da função de correlação

$$X_i^2 = 2\overline{u_i^2} \int_0^t \left[\int_0^{t'} \rho_{Li}(\tau) d\tau \right] dt'\tag{2.12}$$

onde $\rho_{Li}(\tau)$ é o coeficiente de correlação que para $\tau = 0$ tem valor 1.

Integrando-se por partes a Eq.(2.12)

$$\overline{X_i^2} = 2\overline{u_i^2} \int_0^t (t-\tau)\rho_{Li} d\tau\tag{2.13}$$

Definindo-se t^* e T_{Li} por

$$T_{Li} = \int_0^a \rho_{Li}(\tau) d\tau\tag{2.14}$$

Então, para longos períodos de tempo ($t^* \gg T_{Li}$), Eq.(2.12) pode ser escrita como

$$\overline{X_i^2} = 2\overline{v_i^2(t)}T_{Li} \quad 2.15$$

Para $\tau \gg T_{Li}$, o coeficiente de difusão turbulento será dado por

$$\frac{d}{dt}(\overline{X_i^2}) = \sigma_i^2 \int_0^\infty \rho_{Li}(\tau) d\tau \quad 2.16$$

ou seja,

$$\frac{d}{dt}(\overline{X_i^2}) = \sigma_i^2 T_{Li} \quad 2.17$$

onde $\sigma_i^2 \equiv v_i^2$, é variância de flutuação da velocidade. Definindo a escala de tempo lagrangiana por

$$l = \sigma_i T_{Li} \quad 2.18$$

E reescrevendo-se Eq.(2.17), encontra-se

$$\frac{d}{dt}(\overline{X_i^2}) = \sigma_i T_{Li} \quad 2.19$$

Observa-se a partir da Eq.(2.19) que o coeficiente de difusão é expresso em termos da variância e da escala de tempo lagrangiana (Degrazia et al., 2010).

2.7 Teoria de transferência de energia de Heisenberg

A base física da teoria de transferência de energia de Heisenberg está no fato de que os efeitos dos turbilhões com números de onda maiores do que certo número de onda K , que absorvem a energia dos turbilhões com números de onda menores do que K , são equivalentes aos efeitos de uma viscosidade (Palandi, 2005; Degrazia et al., 2007).

A equação que descreve o espectro de energia como uma função do espaço e do tempo pode ser derivada a partir da conservação do momentum, para uma turbulência homogênea e isotrópica esta pode ser escrita na forma (Hinze, 1975)

$$\frac{\partial \bar{E}(k,t)}{\partial t} = \bar{F}(k,t) - 2\nu k^2 E(k,t) \quad 2.20$$

onde $E(k,t)$ é a função de espectro, t é o tempo, k é o número de onda e ν é a viscosidade cinemática.

Pode-se reescrever a Eq.(2.20) na forma

$$\frac{\partial \bar{E}(k,t)}{\partial t} = W(k,t) + \frac{g}{T} H(k,t) - 2\nu k^2 E(k,t) \quad 2.21$$

onde g é a aceleração da gravidade, $W(k,t)$ descreve a transferência de energia, T é a temperatura absoluta, e o último termo representa dissipação de energia pela viscosidade molecular.

DESCRIÇÃO DO MODELO LES

A simulação dos grandes turbilhões (LES) tornou-se uma ferramenta muito importante para investigar o escoamento turbulento na camada limite planetária (CLP). A base física deste modelo é a separação do escoamento em escalas. Esta separação é feita por meio de filtros e, como resultado, tem-se componentes resolvidas e componentes de subgrade. As componentes resolvidas são as que têm escala de comprimento maior que a largura do filtro (grandes escalas dentro do escoamento turbulento) e as componentes de subgrade estão associadas aos pequenos turbilhões (Puhales, 2008).

O código LES usado neste trabalho é baseado nos trabalhos de Moeng (1984) e Sullivan et al (1994). A versão do modelo LES desenvolvida por Moeng (1984) é composta por seis equações. Destas seis equações, cinco são denominadas prognósticas e determinam a evolução temporal e espacial das componentes médias da velocidade do vento e da temperatura potencial na escala resolvida, e da energia cinética turbulenta na escala de subgrade. Enquanto que a sexta equação, denominada diagnóstica, determina o campo espacial das flutuações de pressão na escala resolvida (Marques Filho, 2004). Além disso, no código utilizado, todas as derivadas espaciais horizontais são obtidas por meio do método pseudo-espectral, e as derivadas espaciais verticais pelo método das diferenças finitas (Sullivan; McWilliams; Moeng, 1994).

3.1 LES um modelo do tipo média de volume

O principal modelo numérico utilizado para estudar as características aleatórias do escoamento turbulento é o modelo do tipo média de volume. O modelo LES é um modelo do tipo média de volume que resolve equações médias para o escoamento. Este modelo é baseado no processo de filtragem das equações de conservação, de modo que os turbilhões

mais energéticos são simulados diretamente e os menores têm sua energia parametrizada por meio de um modelo de subfiltro (Marques Filho, 2004; Puhales, 2008).

Matematicamente, a operação média sobre volume de uma variável u_i é definida por Deardorff (1973) como

$$\{u_i\}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z} \int_{z-(1/2)\Delta z}^{z+(1/2)\Delta z} \int_{y-(1/2)\Delta y}^{y+(1/2)\Delta y} \int_{x-(1/2)\Delta x}^{x+(1/2)\Delta x} u_i(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta \quad 3.1$$

onde o símbolo $\{ \}$ é o operador média sobre volume.

3.2 Principais equações do modelo LES

Para escrever as principais equações do modelo LES, parte-se da equação do movimento de Navier-Stokes. A equação do movimento de Navier-Stokes pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + g_i - 2\varepsilon_{ijk} \Omega_j u_k \quad 3.2$$

onde ε é o tensor permutação, Ω_j é a velocidade angular de rotação da Terra e ν é a viscosidade cinemática.

Considerando-se que o fluido seja incompressível, pode-se escrever

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad 3.3$$

Assim, pode-se reescrever a Eq.(3.2) na forma

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} + g_i - 2\varepsilon_{ijk} \Omega_j u_k \quad 3.4$$

Aplicando-se o operador média sobre volume na Eq.(3.4) e fazendo algumas substituições, chega-se na principal equação do modelo LES

$$\frac{\partial \{u_i\}}{\partial t} = -\varepsilon_{ikj} \{ \{ \zeta_k \} \{ U_j \} \} - \frac{\partial P^*}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - f U_{gi} + g_i - 2\varepsilon_{ijk} \Omega_j u_k \quad 3.5$$

onde P^* é a pressão modificada, ζ é a vorticidade, f é o parâmetro de Coriolis e U_{gj} representa o vento geostrófico.

As equações que descrevem a evolução espacial e temporal das componentes da velocidade do vento ($\bar{u} = (u, v, w)$) são obtidas a partir da Eq.(3.5) e podem ser escritas na forma (Puhales, 2008)

$$\frac{\partial \{v\}}{\partial t} = \{ \{ \zeta_x \} \{ W \} \} - \{ \{ \zeta_x \} \{ U \} \} - \frac{\partial P^*}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{vu}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{vv}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{vw}}{\partial z} - f(U_g - \{u\}) \quad 3.6$$

$$\frac{\partial \{u\}}{\partial t} = \{ \{ \zeta_z \} \{ V \} \} - \{ \{ \zeta_y \} \{ W \} \} - \frac{\partial P^*}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{uu}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{uv}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{uw}}{\partial z} - f(V_g + \{v\}) \quad 3.7$$

$$\frac{\partial \{w\}}{\partial t} = \{ \{ \zeta_y \} \{ U \} \} - \{ \{ \zeta_x \} \{ V \} \} + \frac{\{\theta\}_g}{\theta_0} - \frac{\partial P^*}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{wu}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{wv}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{ww}}{\partial z} - \left\langle \frac{\partial \{w\}}{\partial t} \right\rangle \quad 3.8$$

onde $\langle \rangle$ representa a média no plano horizontal, θ_0 é a temperatura potencial de referência, θ é a temperatura potencial e τ_{ij} são os tensores de Reynolds modificados na escala de subfiltro.

O campo de pressão modificada é determinado a partir da equação de Poisson

$$\nabla^2 P^* = \frac{\partial H_x}{\partial x} + \frac{\partial H_y}{\partial y} + \frac{\partial H_z}{\partial z} \quad 3.9$$

E a equação da temperatura potencial, dada por (Gioia, 2003; Marques, 2004; Puhales, 2008) é

$$\frac{\partial \{\theta\}}{\partial t} = -\{ \{ U \} \frac{\partial \{\theta\}}{\partial x} \} - \{ \{ V \} \frac{\partial \{\theta\}}{\partial y} \} - \{ \{ W \} \frac{\partial \{\theta\}}{\partial z} \} - \{w\} \frac{\partial \theta_0}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{\theta u}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{\theta v}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{\theta w}}{\partial z} \quad 3.10$$

onde $\tau_{\theta j}$ é o fluxo turbulento de energia na forma de calor sensível de subgrade. Os tensores τ_{ij} e $\tau_{\theta j}$ são parametrizados pelo modelo LES utilizando-se um modelo de subgrade ou subfiltro. As incertezas nas soluções geradas pelo modelo estão associadas à parametrização destes tensores.

3.3 Modelo de subgrade (viscosidade turbulenta)

Para parametrizar a energia dos turbilhões das menores escalas é utilizado um modelo de subgrade. Neste trabalho, discute-se o modelo de subgrade de Sullivan et al. (1994). Neste modelo, o tensor SGS que representa os fluxos cinemáticos turbulentos de momento é escrito na forma (Sullivan et al, 1994)

$$\tau_{ij} = -2\nu_t \gamma S_{ij} - 2\nu_{\langle r \rangle} \langle S_{ij} \rangle \quad 3.11$$

onde ν_t é o coeficiente de difusividade turbulenta de momento isotrópica, ν_T é a difusividade turbulenta de momento não homogêneo, γ é o fator isotropia e S_{ij} é tensor de deformação do escoamento.

O tensor de deformação S_{ij} é definido por

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \{u_i\}}{\partial x_j} + \frac{\partial \{u_j\}}{\partial x_i} \right) \quad 3.12$$

onde u_i representa as componentes resolvidas da velocidade (u, v, w) nas direções (x, y, z).

O tensor SGS, que representa o fluxo cinemático turbulento de energia na forma de calor, pode ser escrito como

$$\tau_{\theta i} = -\nu_\theta \frac{\partial \{\theta\}}{\partial x_i} \quad 3.13$$

onde ν_θ é coeficiente de difusividade turbulenta de energia na forma de calor.

Para parametrizar a energia dos turbilhões, escreve-se os coeficientes de difusão como um produto da escala de comprimento (ℓ) e da escala de velocidade associada à subgrade.

Assim

$$v_t = c_k \ell e^{1/2} \quad 3.14$$

e

$$v_\theta = \left(1 + \frac{2\ell}{\Delta}\right) v_t \quad 3.15$$

Nas equações 3.14 e 3.15 respectivamente, c_k é uma constante e e é a energia cinética turbulenta de subgrade.

DERIVAÇÃO DA VISCOSIDADE DE SUBFILTRO DE LES

Nesta seção, apresenta-se a derivação da nova viscosidade de subfiltro, que é baseada na teoria da difusão estatística de Taylor. Para derivar a viscosidade de subfiltro de Taylor, considera-se a estrutura tridimensional do espectro nos escoamentos geofísicos turbulentos (número de Reynolds muito grandes). Em tais situações, o espectro de energia turbulenta pode ser subdividido em três grandes regiões espectrais: subintervalo contendo a maior energia do escoamento turbulento, subintervalo inercial e de dissipação, como observa-se na Figura 4.

No subintervalo contendo a energia principal, os turbilhões contendo a maior quantidade de energia do escoamento fazem as principais contribuições para a energia cinética turbulenta, e o espectro de densidade de energia mostra seu máximo. Assim, é possível escolher uma frequência (n_e) para caracterizar o tempo de evolução dos turbilhões mais energéticos.

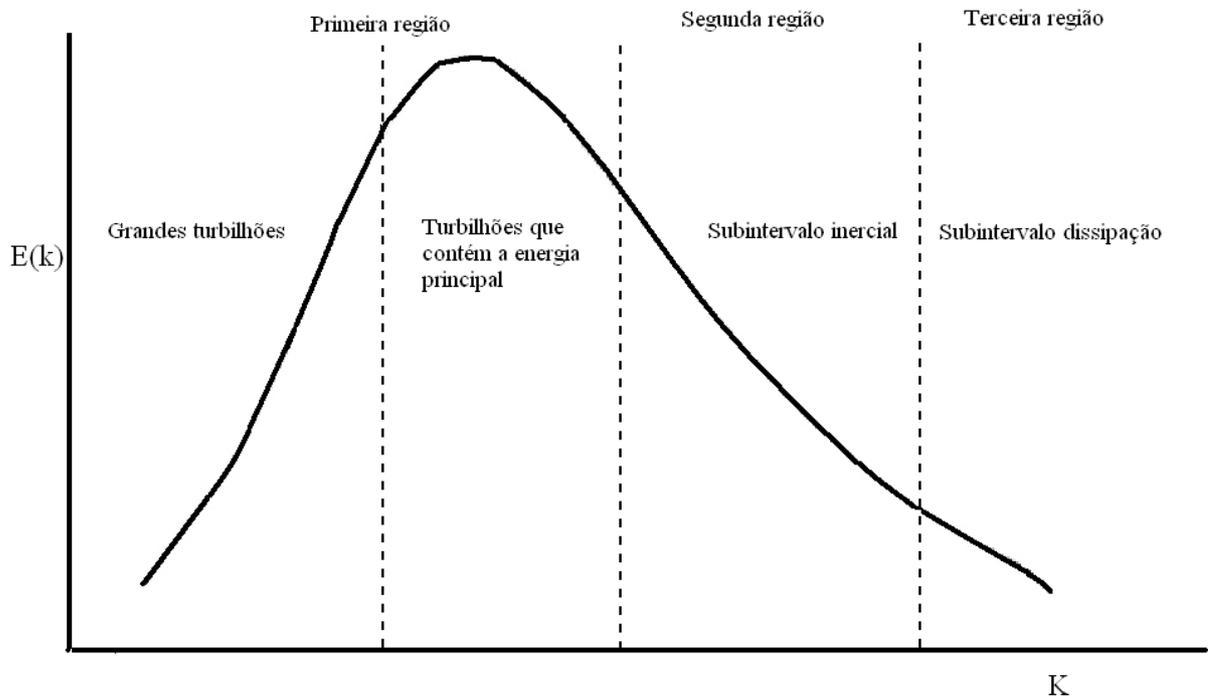


Figura 4 - O espectro de energia turbulenta subdividido em três grandes regiões espectrais

No subintervalo de dissipação, onde a viscosidade molecular desempenha um papel importante, também é possível associar uma frequência n_d , com a escala de tempo que fornece a principal contribuição para a dissipação. No subintervalo inercial, os efeitos da viscosidade molecular podem ser desprezados ($\nu_T \gg \nu$). Como consequência, pode-se associar uma frequência n_c , que é uma frequência limite ou de corte para o subintervalo inercial, com a escala dos turbilhões que fornece a principal contribuição para este fluxo de energia inercial. A partir destas considerações, a seguinte desigualdade é válida

$$n_e \ll n_c \ll n_d \quad 4.1$$

Com esse pressuposto, a turbulência no subintervalo inercial é estatisticamente independente do subintervalo contendo a energia principal, e uma relação de viscosidade turbulenta de subfiltro pode ser obtida. Parte-se da teoria de difusão estatística de Taylor e considera-se a seguinte formulação geral para a viscosidade turbulenta de subfiltro ou subgrade

$$\nu_T = \sigma_l^2 T_c \quad 4.2$$

onde T_c é a escala de tempo lagrangiana associada à frequência n_c , σ_l^2 é a variância da velocidade turbulenta para o subintervalo inercial. A escala de tempo lagrangiana é apresentada por (Hanna, 1981) na forma

$$T_c = \frac{1}{6} \frac{\beta}{n_c} \quad 4.3$$

onde β é definido como a razão entre as escalas de tempo lagrangiana e euleriana. Considera-se uma turbulência isotrópica, de modo que β pode ser escrito na forma

$$\beta = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{u}{\sigma_l} \quad 4.4$$

onde u é a velocidade média do vento.

Substituindo-se a Eq.(4.4) na Eq. (4.3) e empregando-se o resultado na Eq.(4.2), encontra-se

$$\nu_T = \frac{\sqrt{\pi} u \sigma_I}{24 n_c} \quad 4.5$$

e n_c pode ser escrito em função do número de onda de corte k_c ($k_c = 2\pi n_c / u$) para o subintervalo inercial. Logo

$$n_c = \frac{u k_c}{2\pi} \quad 4.6$$

A expressão (4.5) pode ser reescrita substituindo-se a Eq.(4.6) na Eq.(4.5)

$$\nu_T = \frac{\pi^{3/2} \sigma_I}{12 k_c} \quad 4.7$$

Considera-se, também, o espectro de energia de Kolmogorov (Kolmogorov, 1941), dado por

$$E(k) = \alpha_k \varepsilon^{3/2} k^{-5/3} \quad 4.8$$

onde ε é a taxa de dissipação turbulenta, $\alpha_k = 1.4$ é a constante de Kolmogorov e σ_I é dado pela seguinte relação (Sagaut, 1998)

$$\sigma_I = (3\alpha_k)^{1/2} \left(\frac{\varepsilon}{k_c} \right)^{1/3} \quad 4.9$$

Fazendo-se a substituição da Eq.(4.9) na Eq.(4.7) resulta em

$$\nu_T = 0,95 \varepsilon^{1/3} k_c^{-4/3} \quad 4.10$$

A Eq.(4.10) fornece a viscosidade de subfiltro de Taylor. Nota-se que esta expressão apresenta uma forma funcional idêntica a uma viscosidade turbulenta de subfiltro baseada na teoria de transferência de energia de Heisenberg, expressa por (Degrazia et al., 2007).

$$v_T = 0,44\varepsilon^{1/3}k_c^{-4/3} \quad 4.11$$

Observa-se ainda que a diferença entre a Eq.(4.10) e a Eq.(4.11) é um coeficiente numérico que aumenta por um fator superior a cem por cento para a viscosidade de subfiltro de Taylor.

RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA COM O MODELO LES

5.1 Experimento numérico com a utilização da viscosidade de subfiltro de Taylor e Heisenberg

Nesta seção, apresenta-se uma descrição do emprego das parametrizações dadas pela Eq.(4.10) e Eq.(4.11) no código LES desenvolvido por Moeng (1984) e Sullivan (1994). Nas simulações, utiliza-se o espaçamento de grade vertical variável Δz , proposto por Degrazia (2009) $z < 0,1z_i$. As soluções numéricas apresentadas neste estudo são obtidas em pontos grade localizados em um domínio de (4,4,2) Km, empregando-se 256 pontos de grade (caracterizando uma simulação de alta resolução). Nesta simulação, foi mantido um fluxo de calor turbulento cinemático constante com magnitude de $0,24 \text{ Kms}^{-1}$ e um vento geostrófico fixado em 10 ms^{-1} . O valor inicial para a camada limite convectiva foi de $(z_i)_0 = 1000 \text{ m}$ e a temperatura potencial da superfície foi de $\theta_s = 300 \text{ K}$. Os parâmetros internos utilizados nas simulações são apresentados nas Tabelas 2 e 3.

Tabela 2 - Parâmetros internos do LES

Tipo de camada	N^3	L_x, L_y, L_z	U_g	$(z_i)_0$
CLC	256	(4,4,2) Km	10 ms^{-1}	1000

Tabela 3 - Parâmetros internos para as simulações

Tipo de camada	w_*	z_i
CLC (Taylor)	$2,06 \text{ ms}^{-1}$	1138 m
CLC (Heisenberg)	$2,01 \text{ ms}^{-1}$	1064 m

O número de onda k_c na Eq.(4.11) pode ser definido a partir da razão π / Δ , em que Δ é o comprimento característico do filtro (Sagaut, 1998).

A largura do filtro passa baixa é definido por (Moeng; Wyngaard, 1988)

$$\Delta = \left[\left(\frac{3}{2} \right)^2 \Delta x \Delta y \Delta z \right]^{1/3} \quad 5.1$$

onde Δx , Δy e Δz representam o tamanho da malha computacional.

E para condições neutras ($\overline{w'\theta'} = 0$) ou instáveis ($\overline{w'\theta'} > 0$), ℓ é igual a largura do filtro passa-baixa ($\ell = \Delta$) (Weil, 2004).

Considera-se, ainda, a função dissipação turbulenta ε , que é parametrizada por (Moeng, 1984)

$$\varepsilon = c_\varepsilon \frac{e^{3/2}}{\Delta} \quad 5.2$$

onde c_ε é uma constante igual a 0,93.

Agora, substituindo-se a Eq.(5.2) na Eq.(4.10) e na Eq.(4.11), obtêm-se

$$\nu_T = 0,2e^{1/2}\Delta \quad 5.3$$

onde a Eq.(5.3) fornece a viscosidade de subfiltro de Taylor. E

$$\nu_T = 0,093e^{1/2}\Delta \quad 5.4$$

onde a Eq.(5.4) fornece a viscosidade de subfiltro de Heisenberg.

5.2 Variância da velocidade vertical turbulenta

As variâncias da velocidade fornecem informações diretas sobre a energia cinética turbulenta. O perfil vertical destas compõe as parametrizações para o momento terceiro da velocidade vertical turbulenta, um dos parâmetros de entrada para os diferentes modelos de dispersão atmosférica. As Figuras 5 e 7 mostram, respectivamente, o perfil da variância da

velocidade vertical (normalizada por w_*) para as simulações LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg.

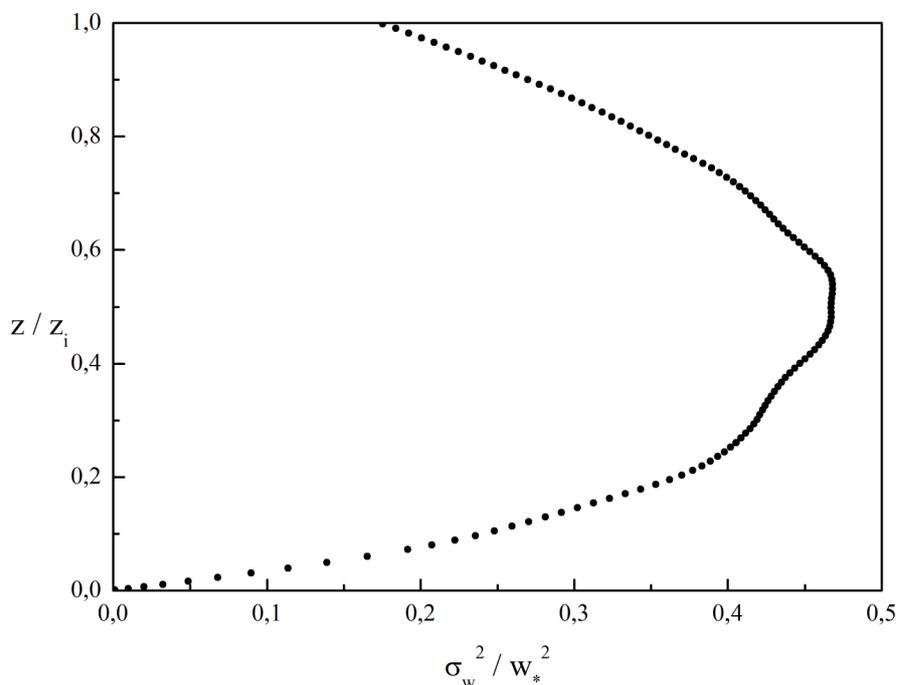


Figura 5 - Perfil da variância da velocidade vertical (normalizada) a partir da viscosidade de subfiltro de Taylor

A variância da velocidade vertical normalizada, para ambas as simulações, apresenta uma forma parabólica, com valores de $\sigma_w^2 / w_*^2 \approx 0,4$ (no intervalo de altura de $0,2 < z / z_i < 0,6$). Este resultado está de acordo com os dados de Lenschow et al. (1980), como pode ser observado na Figura 6. Nesta figura apresenta-se, também, os perfis da variância da velocidade vertical de Deardorff e Willis (1974) e os perfis derivados da simulação LES empregando viscosidade de subfiltro de Heisenberg e Taylor.

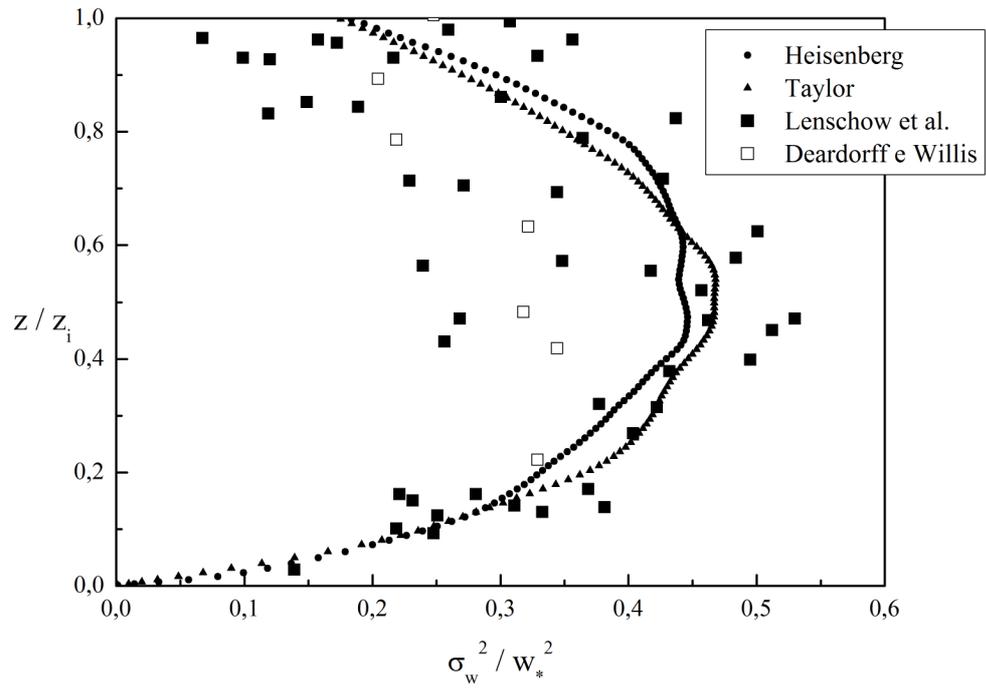


Figura 6 - Perfis da variância da velocidade vertical

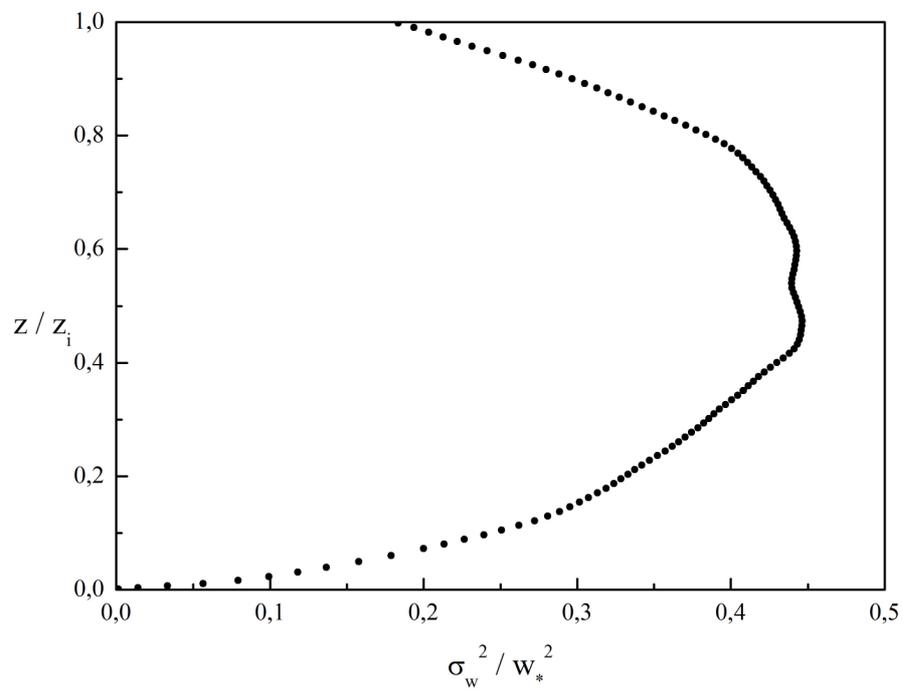


Figura 7 - Perfil da variância da velocidade vertical (normalizada) a partir da viscosidade de subfiltro de Heisenberg

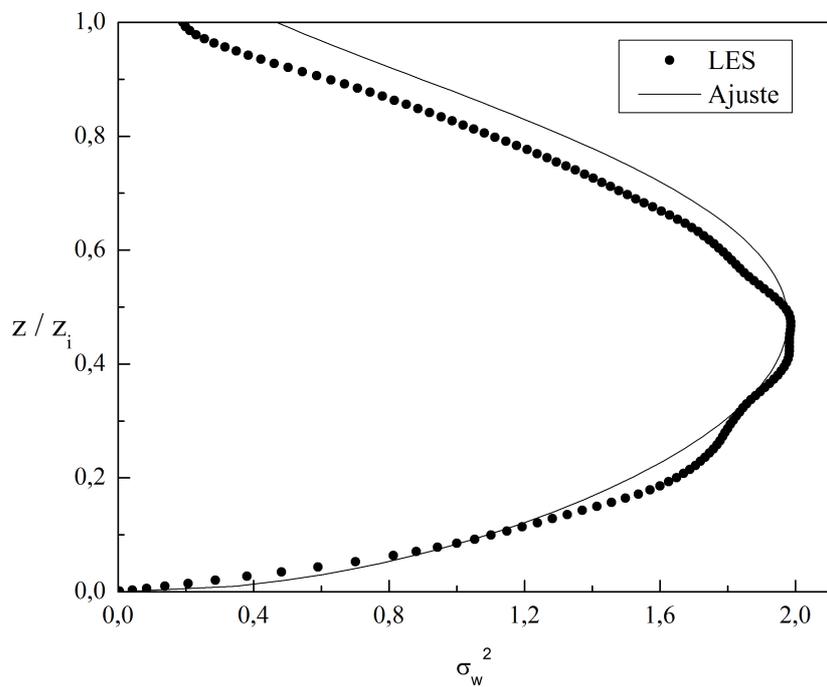


Figura 8 - Perfil da variância da velocidade vertical a partir da viscosidade de subfiltro de Taylor

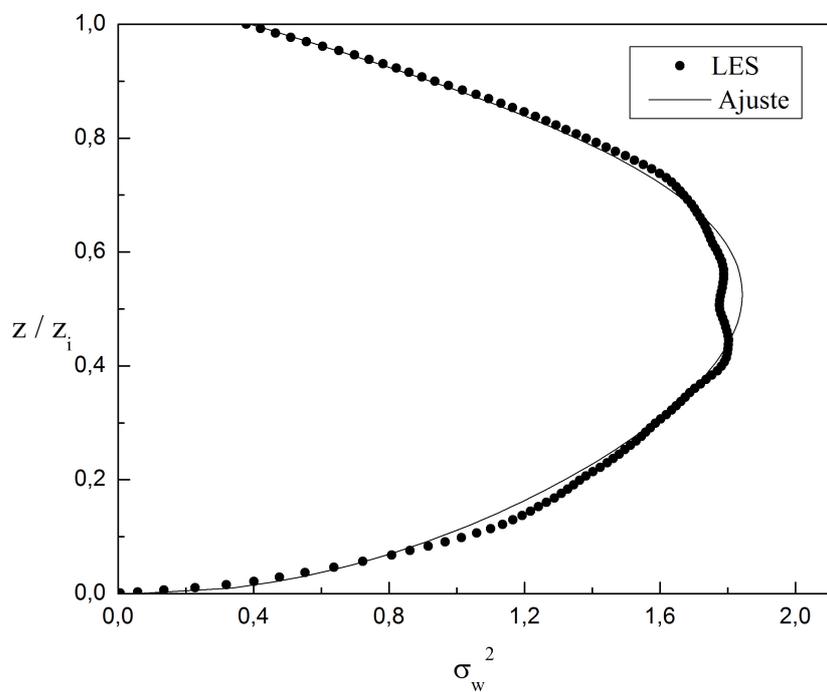


Figura 9 - Perfil da variância da velocidade vertical a partir da viscosidade de subfiltro de Heisenberg

Os pontos nas Figuras 8 e 9 representam os dados numéricos de LES e a linha contínua é um ajuste reproduzindo estes pontos.

A linha contínua na Figura 8 (simulação LES empregando viscosidade de subfiltro de Taylor) é representada pelo seguinte ajuste algébrico

$$\sigma_w^2 = a1 \left(\frac{z}{z_i} \right)^2 + a2 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{0.5} + a3 \left(\frac{z}{z_i} \right)^8 + a4 \left(\frac{z}{z_i} \right)^3 \quad 5.5$$

E a linha contínua na Figura 9 (simulação LES empregando viscosidade de subfiltro de Heisenberg) é representada pelo seguinte ajuste algébrico:

$$\sigma_w^2 = a1 + a2 \left(\frac{z}{z_i} \right)^4 + a3 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{0.5} + a4 \left(\frac{z}{z_i} \right)^6 \quad 5.6$$

Os valores das constantes presentes nas equações 5.5 e 5.6 são apresentados na Tabela 4.

Tabela 4 - Valores das constantes para ambos os ajustes algébricos

Constante	Ajuste Taylor	Ajuste Heisenberg
a1	-0,21	0,05
a2	3,47	-3,99
a3	0,64	2,85
a4	-3,43	1,48

5.3 Terceiro momento e skewness da velocidade vertical

O skewness da velocidade vertical turbulenta é um parâmetro estatístico fundamental para a investigação da difusão de contaminantes (Weil, 1990; Rotach, 1996; Arya, 1999). Este parâmetro é definido por

$$S_w = \frac{\overline{w'^3}}{(\sigma_{w'}^2)^{3/2}} \quad 5.7$$

onde w' é a flutuação de velocidade vertical e σ_w^2 é a variância da velocidade vertical.

O skewness da velocidade vertical turbulenta em uma camada limite convectiva (CLC) representa a razão da área (em diferentes alturas) coberta por movimentos de ar

ascendentes (termas) para a área coberta por movimentos de ar descendentes (movimento vertical divergente). Do ponto de vista físico, o skewness da velocidade vertical é um indicativo da estrutura do movimento vertical. Quando este skewness é positivo, as colunas de ar ascendentes são mais estreitas do que o movimento de ar descendente (Moeng; Rotunno, 1990). A Figura 10 mostra a estrutura do campo de velocidade vertical gerada pela simulação LES empregando viscosidade de subfiltro de Taylor (na horizontal, plano x-y). Nesta figura observa-se um escoamento vertical com coerência espacial, a área de regiões de movimentos ascendentes e descendentes cresce com a distância da superfície. Os contornos da velocidade vertical em planos horizontais mostram que a partir da superfície para regiões mais elevadas da CLC, os movimentos downdrafts ocupam uma área maior do que os movimentos updrafts (movimentos downdrafts dominantes). Em níveis mais baixos da camada limite superficial ($z/z_i = 0,025; 0,05$), há uma configuração irregular de movimentos downdrafts. Observa-se, ainda, que para uma altura de $z/z_i = 0,025$, os movimentos downdrafts são levemente dominantes, apresentando velocidades negativas com baixas magnitudes. Por outro lado, para as regiões mais elevadas da CBL ($z/z_i = 0,1; 0,2; 0,5; 0,9$) há células updraft/ downdraft bem definidas caracterizadas por grandes valores de skewness.

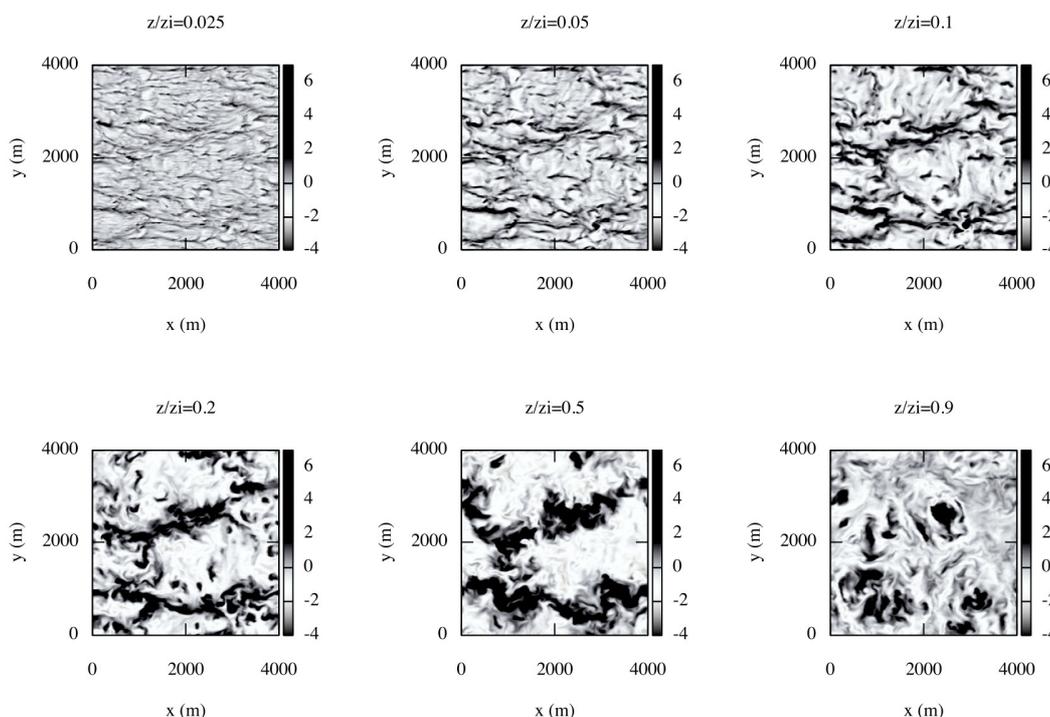


Figura 10 - Os contornos da velocidade vertical em planos horizontais

Na camada convectiva, a velocidade vertical tem valor médio zero, mas o modo da velocidade é fortemente negativo (o valor mais provável da velocidade vertical). Isso indica que, dentro da camada limite convectiva, a função densidade de probabilidade tem um skewness positivo.

O skewness da velocidade vertical turbulenta gerada pelo modelo LES, empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg, é apresentado nas Figuras 11 e 12.

Os pontos nas Figuras 11 e 12 representam os dados numéricos de LES e a linha contínua é um ajuste reproduzindo estes pontos. Nota-se que o skewness da velocidade vertical é positivo ao longo da maior parte da camada limite convectiva e tem um máximo (valor) próximo ao topo da camada ($z/z_i \approx 0,9$). Os valores positivos desta grandeza estatística indicam que os movimentos updrafts são mais estreitos do que os movimentos downdrafts. O skewness de Taylor atinge um valor máximo (1,1) próximo ao topo da camada ($z/z_i \approx 0,9$), enquanto que o skewness de Heisenberg atinge seu valor máximo (0,9) muito antes da camada de inversão ($z/z_i \approx 0,55$), possuindo um máximo mais alongado.

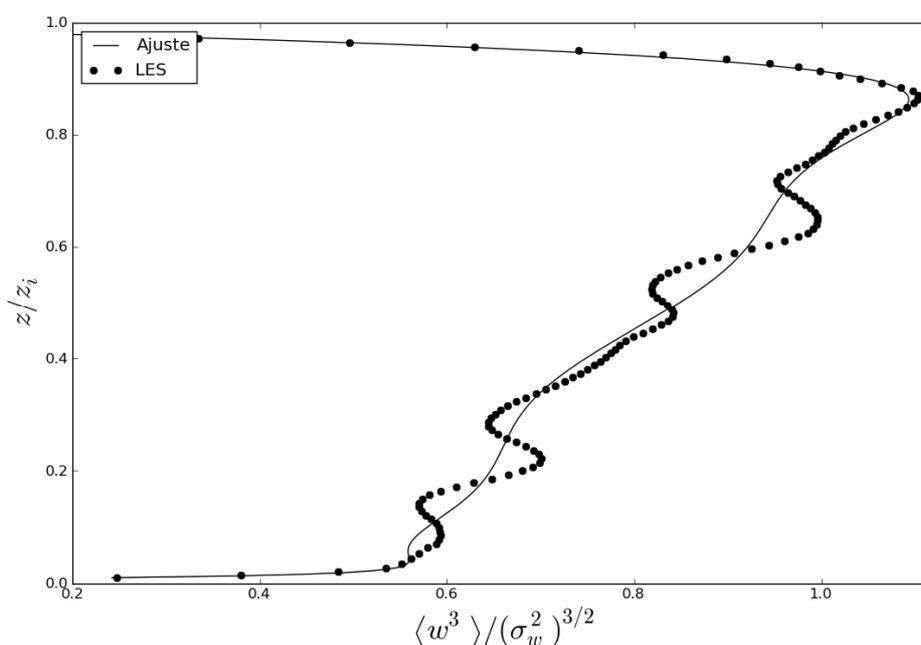


Figura 11 - Skewness da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Taylor

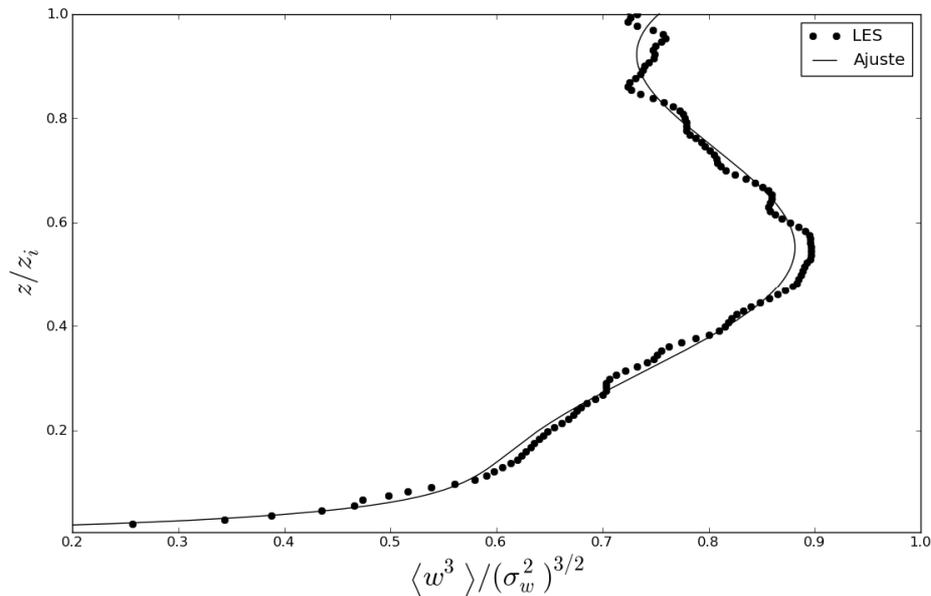


Figura 12 - Skewness da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg

A Figura 12 indica também que o skewness da velocidade vertical torna-se positivo em níveis mais altos e aumenta em níveis superiores. Este aumento no skewness pode ser explicado seguindo Moeng e Rotunno (1990): embora a área associada aos movimentos ascendentes individuais de ar permaneça constante com a altura, existe, em níveis superiores, uma presença pequena de movimentos ascendentes em comparação com os níveis mais baixos. A linha contínua na Figura 11 é representada pelo seguinte ajuste algébrico

$$S_w \left(\frac{z}{z_i} \right) = a1 \left(\frac{z}{z_i} \right) + a2 \left(\frac{z}{z_i} \right)^2 + a3 \left(\frac{z}{z_i} \right)^4 + a4 \left(\frac{z}{z_i} \right)^5 + a5 \exp \left(\left(\frac{z}{z_i} \right)^2 \right) + a6 \left(\frac{z}{z_i} \right)^6 + a7 \left(\frac{z}{z_i} \right)^7 \quad 5.8$$

E a linha contínua na Figura 12 é representada pelo seguinte ajuste algébrico

$$S_w \left(\frac{z}{z_i} \right) = a1 \left(\frac{z}{z_i} \right) + a2 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{0.5} + a3 \left(\frac{z}{z_i} \right)^2 + a4 \left(\frac{z}{z_i} \right)^3 + a5 \left(\frac{z}{z_i} \right)^4 + a6 \left(\frac{z}{z_i} \right)^6 + a7 \cos \left(\frac{z}{z_i} \right) \quad 5.9$$

Os valores das constantes presentes nas equações 5.8 e 5.9 são apresentados na Tabela 5.

Tabela 5 - Valores das constantes para ambos os ajustes algébricos

Constante	Ajuste Taylor	Ajuste Heisenberg
a1	3,84	-19,94
a2	-18,77	9,32
a3	234,57	38,28
a4	-643,94	-50,53
a5	0,39	26,92
a6	677,10	-2,91
a7	-254,22	-0,72

A figura 13 apresenta os perfis do skewness da velocidade vertical turbulenta obtidos pela simulação LES, o perfil de skewness da simulação de túnel de vento da CLC de Fedorovich et al. (1996) e dados de LES de Schmidt e Schumann (1989). Nesta figura observa-se que o perfil do skewness da velocidade vertical gerado pela simulação LES com a viscosidade de subfiltro de Taylor apresenta forma e padrão semelhante aos skewness obtidos por simulação de túnel de vento da camada limite convectiva (Fedorovich et al., 1996).

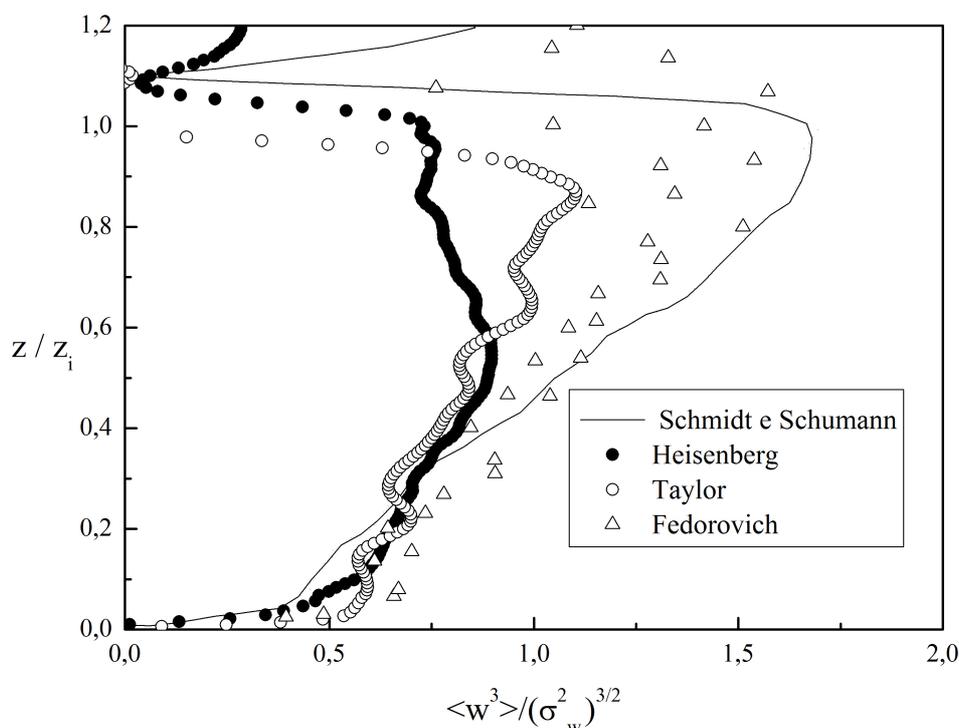


Figura 13 - Perfis do skewness da velocidade vertical turbulenta

O skewness representa uma medida da assimetria da função de densidade probabilidade de uma variável aleatória e, portanto, estabelece uma relação de probabilidade de ocorrência entre os grandes valores positivos e negativos da variável aleatória. Assim, o skewness da velocidade vertical é positivo e cresce continuamente com a altura (Figura 11).

Nas Figuras 14 e 19, apresenta-se o perfil do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta gerado pelo modelo LES com a viscosidade de subfiltro de Taylor e Heisenberg e nas figuras 15 e 16 os perfis normalizados por w_* .

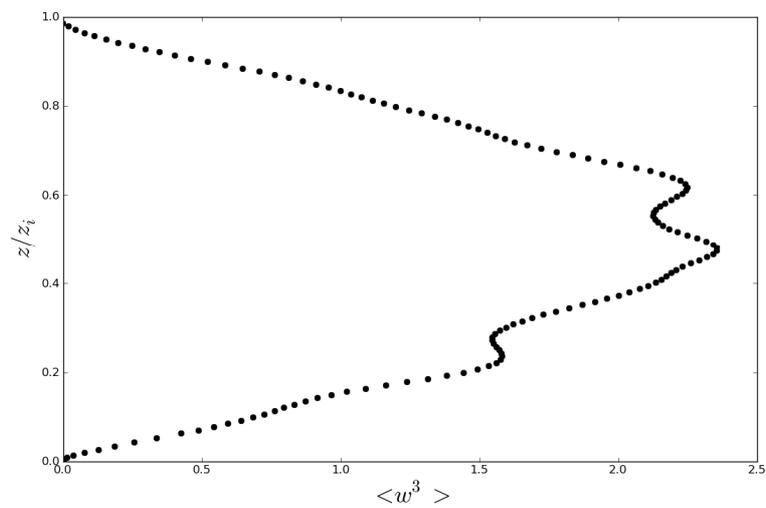


Figura 14 - Terceiro momento da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Taylor

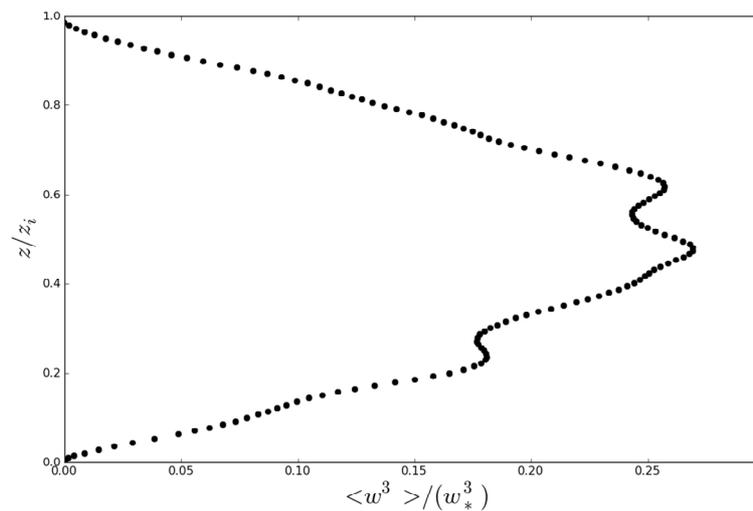


Figura 15 - Terceiro momento da velocidade vertical turbulenta (normalizado por w_*) com a viscosidade de subfiltro de Taylor

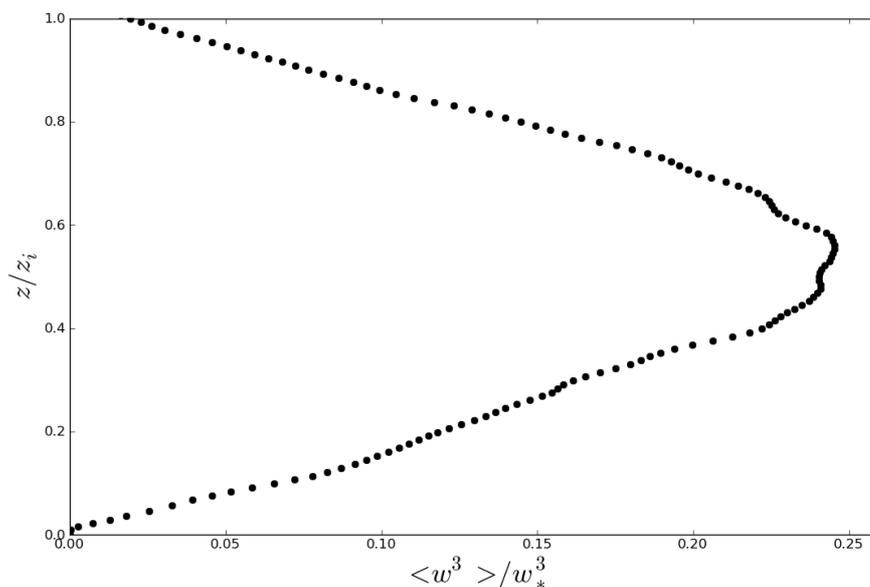


Figura 16 - Terceiro momento da velocidade vertical turbulenta (normalizado por w_*) com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg

O perfil do terceiro momento gerado pela simulação LES com a viscosidade de subfiltro de Taylor apresenta forma e padrão semelhante ao terceiro momento obtido por Mason (1989), Park et al. (1998) e Fedorovich et al. (1996). Na simulação de Mason (1989) observa-se que, o terceiro momento normalizado por w_* , atinge um valor máximo de $\approx 0,20$ próximo ao meio da camada. Park et al. (1998), baseado nos trabalho de Mason (1989), realizou uma simulação da CLC a partir do LES de Moeng (1984). Na simulação de Park et al. (1998) o terceiro momento normalizado simulado atinge um valor máximo de $\approx 0,23$. A simulação de túnel de vento da camada limite convectiva (Fedorovich, 1996) apresenta um terceiro momento da ordem de $\approx 0,6$. Embora, o perfil do terceiro momento de Taylor apresente forma e padrão semelhante ao terceiro momento simulado por Fedorovich (1996), o valor máximo do terceiro momento obtido pela simulação LES empregando viscosidade de subfiltro de Taylor é 0,27. Dessa forma, o perfil obtido pelo modelo LES (empregando a teoria de difusão estatística de Taylor) concorda com as simulações de Mason (1989), Park et al. (1998) e com os dados de LES de Schmidt e Shumann (1989) (valor máximo do $\overline{w^3}/w_*^3 \approx 0,20$), como pode ser observado na Figura 17. Hunt et al. (1988), a partir de observações na Camada Limite Superficial, mostra que o terceiro momento aumenta com

z/z_i próximo a superfície e atinge um máximo de 0,25 próximo ao meio da camada. Os resultados numéricos da simulação de Taylor estão próximos deste valor.

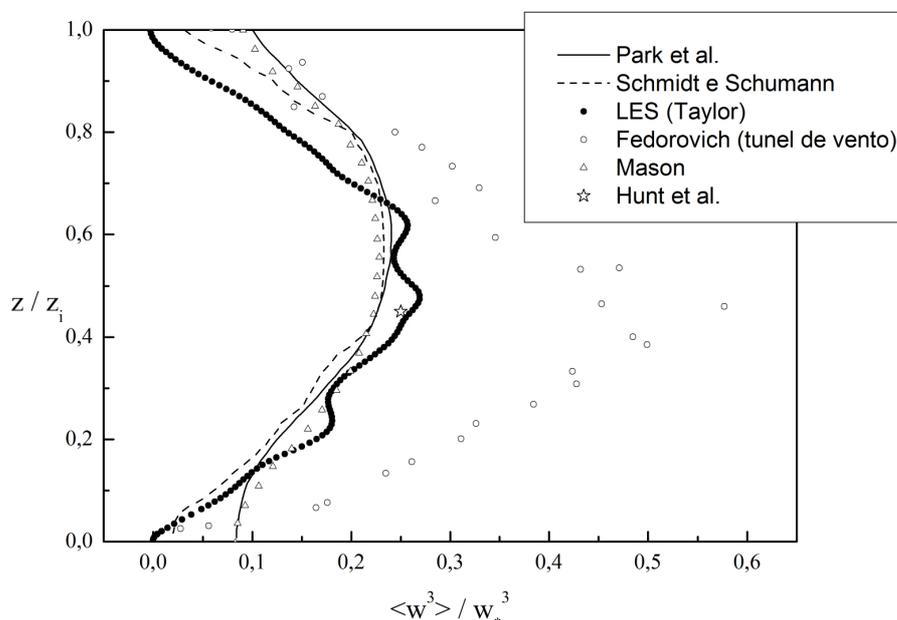


Figura 17 - Perfis do terceiro momento da velocidade vertical

Comparando-se os resultados gerados por ambas as simulações com os dados observacionais de AMTEX (Lenschow et al., 1980), pode-se observar que o modelo LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg reproduz razoavelmente bem a parte inferior da camada limite convectiva (Figura 18). Esta concordância também está presente próxima à superfície, onde as simulações LES normalmente são mal-definidas e apresentam resultados contraditórios (Sullivan et al., 2003).

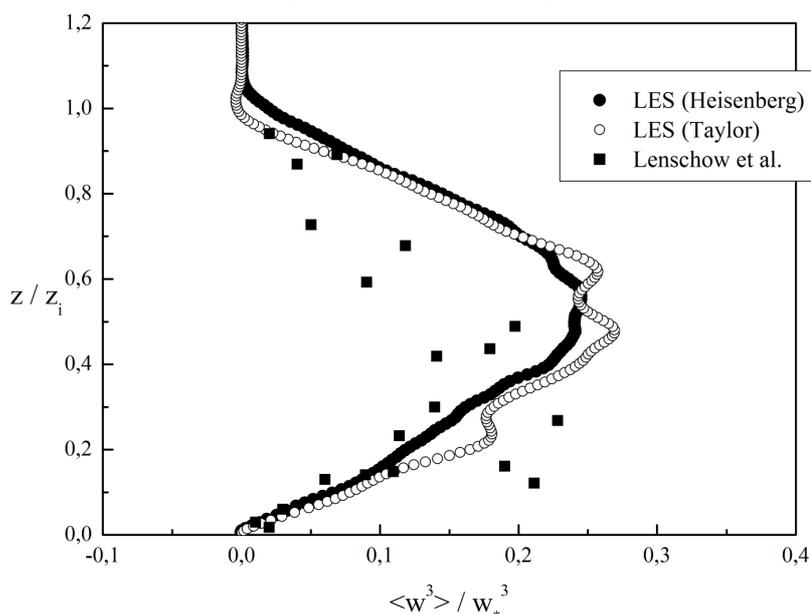


Figura 18 - Comparação entre o terceiro momento de LES e os dados de Lenschow et al. (1980).

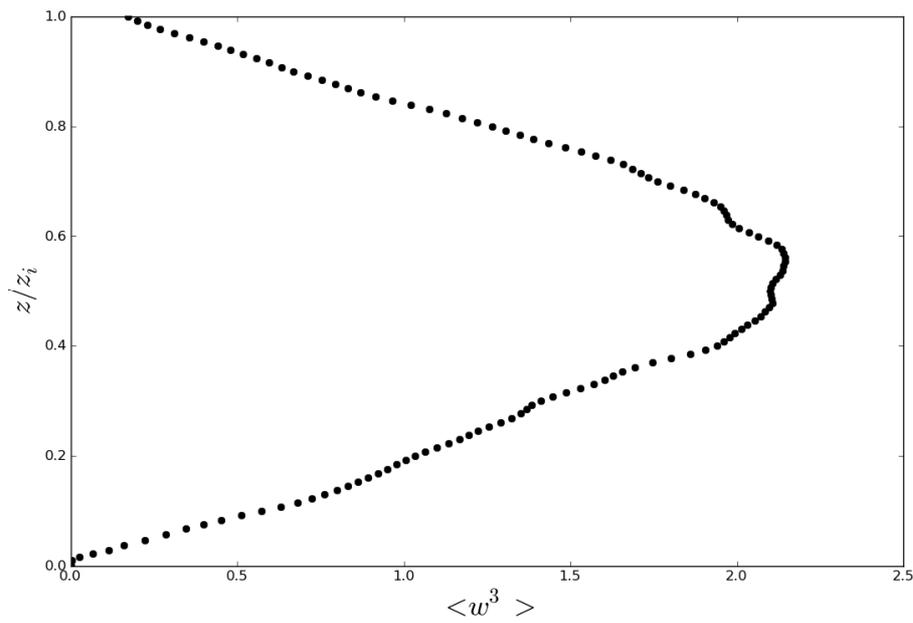


Figura 19- Terceiro momento da velocidade vertical turbulenta com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg

5.4 Parametrizações para o terceiro momento

O terceiro momento da velocidade vertical turbulenta é obtido a partir da definição de skewness

$$S_w = \frac{\overline{w^3}}{(\sigma_w^2)^{3/2}} \quad 5.10$$

$$\overline{w^3} = S_w (\sigma_w^2)^{3/2}$$

Dividindo-se os dois lados da Eq.(5.10) por w_*^3

$$\frac{\overline{w^3}}{w_*^3} = \frac{S_w (\sigma_w^2)^{3/2}}{w_{*L}^3} \quad 5.11$$

E substituindo a expressão para o skewness da velocidade vertical turbulenta e variância da velocidade vertical derivados a partir da teoria estatística Taylor em (5.11), obtém-se

$$\overline{w^3} = S_w \left(\frac{z}{z_i} \right) (\sigma_w^2)^{3/2}$$

$$a = \left(\frac{z}{z_i} \right)$$

$$\overline{w^3} / w_*^3 = (a1a+a2a^2+a3a^4+a4a^5+a5\exp(a^2)+a6a^6+a7a^7)(a1a^2+a2a^{0.5}+a3a^8+a4a^3)^{3/2}/((2,06)^3) \quad 5.12$$

Substituindo Eq.(5.6) e Eq.(5.9) na Eq.(5.11) chega-se ao terceiro momento da velocidade vertical derivado a partir da teoria de transferência de energia de Heisenberg

$$\frac{\overline{w^3}}{w_*^3} = \frac{S_w (\sigma_w^2)^{3/2}}{w_{*L}^3}$$

$$a = \left(\frac{z}{z_i} \right)$$

$$\overline{w^3} / w_*^3 = (a1a+a2a^{0.5}+a3a^2+a4a^3+a5a^4+a6a^6+a7\cos(a))(a0+a1a^4+a2a^{0.5}+a3a^6)^{3/2}/((2,01)^3) \quad 5.13$$

Empregando-se a relação de similaridade $\sigma_w^2 / w_*^2 = 1,8(z/z_i)^{2/3}(1-0,8z/z_i)$ de Lenschow et al. (1980) na Eq.(5.11) pode-se derivar outras duas expressões para o perfil do terceiro momento da velocidade vertical. Empregando-se a relação de similaridade $\sigma_w^2 / w_*^2 = 1,8(z/z_i)^{2/3}(1-0,8z/z_i)$ de Lenschow et al. (1980) na Eq.(5.11) pode-se derivar outras duas expressões para o perfil do terceiro momento da velocidade vertical. Empregando-se a teoria da similaridade e o perfil do skewness de Taylor na Eq.(5.11), encontra-se

$$S_w \left(\frac{z}{z_i} \right) = \frac{\overline{w^3}}{(\sigma_w^2)^{3/2}}$$

$$\overline{w^3} / w_*^3 = S_w \left(\frac{z}{z_i} \right) (\sigma_w^2)^{3/2}$$

$$\overline{w^3} / w_*^3 = S_w (z/z_i) (1,8)^{3/2} z/z_i (1-0,8z/z_i)^{3/2}$$

$$\overline{w^3} / w_*^3 = (a1a+a2a^2+a3a^4+a4a^5+a5\exp(a^2)+a6a^6+a7a^7)(1,8)^{3/2} z/z_i (1-0,8z/z_i)^{3/2} \quad 5.14$$

Utilizando-se o perfil do skewness de Heisenberg encontra-se a seguinte formulação para o terceiro momento

$$\begin{aligned} \overline{w'^3} / w_*^3 &= S_w(z/z_i)(1,8)^{3/2} z/z_i (1-0,8z/z_i)^{3/2} \\ \overline{w'^3} / w_*^3 &= (a_1 a + a_2 a^{0.5} + a_3 a^2 + a_4 a^3 + a_5 a^4 + a_6 a^6 + \\ & a_7 \cos(a))(1,8)^{3/2} z/z_i (1-0,8z/z_i)^{3/2} \end{aligned} \quad 5.15$$

5.5 Parametrizações do $\overline{W^3}$ aplicadas a problemas de dispersão

Há na literatura diferentes parametrizações para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta. Nas próximas seções serão apresentadas as expressões mais comumente empregadas.

5.5.1 Modelo de De Baas

Um modelo para dispersão de contaminantes em condições não-homogêneas foi proposto por De Baas et al. (1986). O modelo foi baseado na equação de Langevin e assim denominado Modelo de Langevin. Neste modelo considerou-se o movimento individual das partículas do fluido (modelo lagrangiano).

Os modelos baseados na equação de Langevin simulam a dispersão em termos da equação diferencial estocástica (De Baas, 1986):

$$dW = -\left(\frac{W}{T_L}\right) dt + d\mu \quad 5.16$$

onde W é a velocidade da partícula, T_L é a escala de tempo lagrangiana e $d\mu$ é o incremento ou elemento diferencial de velocidade.

A expressão (5.16) pode ser modificada para descrever a turbulência não-homogênea. Para isso utilizou-se outro modelo também baseado na equação de Langevin para a velocidade vertical dividida pelo desvio padrão da velocidade turbulenta (De Baas,1986):

$$d\left(\frac{W}{\sigma}\right) = -\frac{W}{\sigma} \frac{dt}{T_L} + d\chi(z) \quad 5.17$$

De Baas et al. (1986) observou que durante o dia o ar se encontrava a uma temperatura maior na superfície, de modo que a camada limite tornava-se instável. Assim a estrutura vertical para a turbulência tornava-se organizada em um padrão de updraft e downdraft. Como a velocidade vertical, em média, ao longo de uma grande superfície deve ser zero, os downdrafts ocupavam uma área maior do que os updrafts em cada nível da camada limite. Assim, para descrever o comportamento do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta, de Baas realizou uma simulação com 2×10^4 partículas, mantendo um passo de tempo constante (0,05s). Comparou os valores simulados com valores experimentais obtidos por aeronaves e a partir disso buscou uma função que descrevesse o comportamento do terceiro momento. A equação encontrada pode ser escrita na forma (De Baas et al., 1986):

$$\frac{\overline{w^3}}{w_*^3} = 1,4 \left(\frac{z}{z_i}\right) \exp\left(-2,5 \frac{z}{z_i}\right) \quad 5.18$$

5.5.2 Modelo de Rotach

Rotach et al. propôs em 1996 um modelo para dispersão de escalares passivos na atmosfera. O modelo ficou conhecido modelo de Rotach.

O modelo de Rotach assume que a velocidade de uma partícula (u) e a posição de uma partícula evoluem como um processo Markoviano. A evolução de (u, x) pode ser descrita por (Rotach,1996):

$$\begin{aligned} du_i &= a_i(x, u, t)dt + \sqrt{C_0} \varepsilon d\xi_i \\ dx &= udt \end{aligned} \quad 5.19$$

onde $d\xi_i$ é o incremento do vetor processo de Wiener.

A partir deste modelo e de sua investigação sobre estrutura vertical para a turbulência considerando-se a relação entre os movimentos updraft e downdraft Rotach et al.(1996) propôs uma formulação para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta. A expressão pode ser escrita na forma

$$\frac{\overline{w^3}}{w_*^3} = 1,3 \left(\frac{z}{z_i} \right) \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \quad 5.20$$

5.5.3 Modelo de Weil

Como a dispersão vertical de um escalar passivo em uma atmosfera não-homogênea é uma função de altura, Weil em 1990 investigou o comportamento do terceiro momento da velocidade vertical a partir de dados de LES de Moeng e Wyngaard (1989), dados AMTEX (Lenshow et al., 1980). A partir dos dados simulados e de suas parametrizações concluiu que o terceiro momento é uma função de z/z_i (Weil, 1990):

$$\frac{\overline{w^3}}{w_*^3} = 0,84 \left(\frac{z}{z_i} \right) \left(1 - \frac{z}{z_i} \right) \quad 5.21$$

5.5.4 Terceiro momento de Kastner-Klein para dados de túnel de vento

Kastner-Klein et al. propôs em 2001 uma expressão para o terceiro momento baseado em dados de simulação de túnel de vento. Kastner-Klein et al. (2001) comparou dados de simulação de túnel de vento com os resultados do modelo dispersão de partículas estocástico Lagrangeano 3-D (LPDM). A partir do perfil do terceiro momento de Rotach et al. (1996), fez um ajuste dos dados de túnel de vento. As parametrizações resultantes do ajuste são apresentadas abaixo

$$\frac{w'^2}{w_*^2} = \left(0,27 + 14 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{1,6} \right) \exp \left\{ -4,4 \frac{z}{z_i} \right\}$$

$$\frac{\overline{w^3}}{w_*^3} = 2 \left(\frac{z}{z_i} \right) \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^{1,2} \quad 5.22$$

5.5.5 Terceiro momento de Franzese

Franzese et al. (1999) baseado nos dados experimentais de Lenschow et al. (1980), Luhar et al. (1996), Baerentsen e Berkowicz (1984), Willis e Deardorff (1974) e Young (1988), ajustou uma curva para descrever o perfil do segundo e do terceiro momento da velocidade vertical. As expressões algébricas obtidas por Franzese et al. (1999) são

$$\frac{\overline{w^2}}{w_*^2} = 0,05 + 1,7 \left(\frac{z}{z_i} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)$$

$$\frac{\overline{w^3}}{w_*^3} = 1,1 \left(\frac{z}{z_i} \right) \left(1 - \frac{z}{z_i} \right)^2 \quad 5.23$$

Na figura 20 pode-se observar os diferentes perfis do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta empregados no modelo LAMBDA.

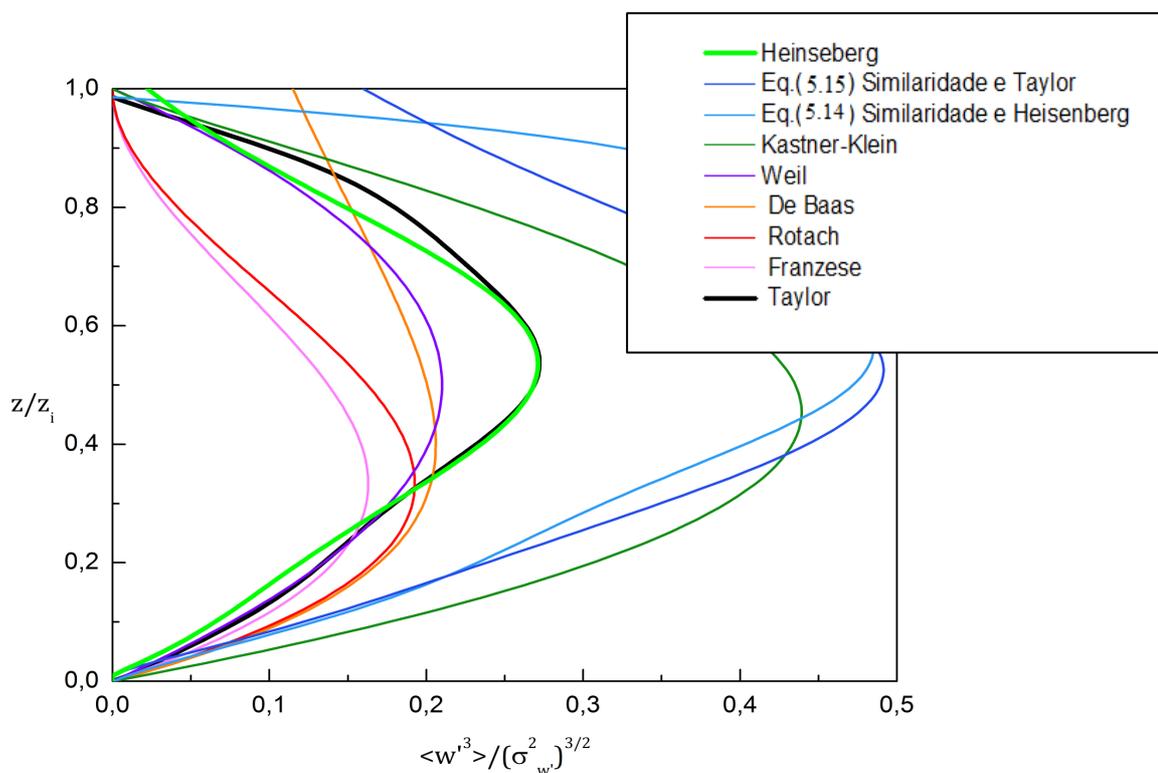


Figura 20 - Perfis do terceiro momento empregados no modelo LAMBDA

Na Figura 20 a linha rosa é o perfil do terceiro momento proposto de Franzese et al (1999), a linha vermelha é o perfil de Rotach et al. (1996), a linha laranja é o perfil de De Baas et al. (1986), a linha roxa é o perfil de Weil (1990), a linha verde mais espessa é o perfil derivado do LES a partir da viscosidade de subfiltro de Heisenberg, a linha preta é o perfil obtido da simulação LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor, a linha verde menos espessa é o perfil obtido por Kastner-Klein et al. (2001), a linha azul é o perfil dado pela Eq.(5.15) e a linha azul claro é o perfil dado pela Eq.(5.14).

ANÁLISE DOS RESULTADOS NUMÉRICOS E COMPARAÇÃO COM DADOS OBSERVACIONAIS

Neste capítulo, apresenta-se os resultados obtidos com a simulação LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg e comparações com valores de skewness observados no sítio experimental de Candiota.

6.1 Descrição do sítio experimental e cálculo do skewness

Neste trabalho, investiga-se a magnitude do skewness e do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta na camada limite superficial convectiva. Os dados utilizados nesta análise são provenientes da campanha micrometeorológica do projeto PAMPA07, realizado no município de Candiota, no extremo sul do Brasil (estes dados foram disponibilizados pelo grupo de micrometeorologia da Universidade Federal de Santa Maria). Uma torre de 8 metros com sensores de resposta rápida coletou dados com frequências de 10 Hz no sítio experimental de Três Lagoas durante o mês de setembro de 2007.

Para análise dos dados observacionais do sítio mencionado acima, desenvolveu-se um aplicativo em linguagem de programação Fortran e Python. Este aplicativo remove a tendência linear dos dados, faz a rotação do vetor vento segundo Kaimal e Finnigan (1994) e realiza os cálculos de skewness e terceiro momento a partir de uma média móvel de trinta minutos. Os dados utilizados neste estudo foram selecionados de acordo com o comprimento de Monin-Obukhov ($-25 < L < -5$) e com o módulo da velocidade do vento (menor do que 5 m/s). Os gráficos apresentados neste trabalho foram construídos utilizando-se a ferramenta Pylab, que é um pacote do Python.

6.2 Resultados encontrados

Neste estudo, foram comparados dados numéricos de skewness e de terceiro momento (de alta resolução gerados por um modelo LES) em uma camada limite fortemente convectiva

e dados experimentais de skewness medidos na camada limite superficial convectiva. A comparação entre os valores de skewness obtidos no sítio experimental de Três Lagoas e os gerados por Simulação de Grandes Turbilhões mostra que, para uma altura de 10 m, a simulação LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor descreve razoavelmente bem o comportamento do skewness da velocidade vertical turbulenta na camada limite superficial (ver Tabelas 6 e 7). A Tabela 6 apresenta os valores de skewness obtidos a partir da simulação LES empregando viscosidade de subfiltro de Taylor e Heisenberg. A Tabela 7 mostra os valores de skewness observados na torre micrometeorológica do projeto PAMPA07.

Tabela 6-Valores de skewness simulados na camada limite superficial

Simulação	h	skewness
Viscosidade de subfiltro de Taylor	10,93 m	0,25
Viscosidade de subfiltro de Heisenberg	10,93 m	0,01

Tabela 7 - Valores de skewness da velocidade vertical turbulenta observados

- L (m)	5,38	14,83	22,78	10,62	11,32	23,02	8,48	24,04	13,01	5,57	11,82
Skewness	0,56	0,15	0,43	0,29	0,23	0,28	0,23	0,21	0,22	0,21	0,26

Comparando-se os valores simulados de skewness com os valores observados na torre micrometeorológica de 8 m, observa-se que o modelo LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor fornece, em uma região próxima à superfície, valores de skewness da ordem de 10^{-1} , ou seja, da mesma ordem de grandeza dos valores experimentais. Por outro lado, o modelo LES empregando a viscosidade de subfiltro de Heisenberg, fornece valores da ordem 10^{-2} .

As Tabelas 8 e 9 mostram os valores do terceiro momento simulados e observados na camada limite superficial. Pode-se observar que o terceiro momento simulado pelo modelo

LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor é da ordem de 10^{-2} , da mesma ordem do terceiro momento superficial observado.

Tabela 8 - Valores do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta observados

- L (m)	5,38	14,83	22,78	10,62	11,32	23,02	8,48	24,04	13,01	5,57	11,82
Terceiro momento	0,06	0,02	0,05	0,01	0,03	0,04	0,01	0,09	0,01	0,02	0,01

Tabela 9 - Valores do Terceiro momento Simulados e Observados na Camada Limite Superficial

Terceiro momento	h	Terceiro momento
Simulação com Viscosidade de subfiltro de Heisenberg	≈ 10.93 m	$\approx 10^{-3}$
Simulação com Viscosidade de subfiltro de Taylor	≈ 10.93 m	$\approx 10^{-2}$
Valor do terceiro momento observado	8 m	$\approx 10^{-2}$

DESCRIÇÃO DO MODELO ESTOCÁSTICO LAGRANGIANO

Os modelos estocásticos lagrangianos são ferramentas importantes na descrição da dispersão de contaminantes na atmosfera. Neste trabalho utilizou-se o modelo de partículas estocástico Lagrangiano (LAMBDA) proposto por Ferrero et al. (1995). O LAMBDA é um modelo baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para velocidade aleatória. Neste modelo as equações que fornecem a posição e velocidade de cada partícula, em cada passo de tempo são, respectivamente (Siqueira; Roberti; Moraes, 2004; Afonssi, 2005):

$$dx = (\mathbf{U} + \mathbf{u})dt \quad 7.1$$

e

$$du_i = a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dt + b_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)dW_j(t) \quad 7.2$$

onde $i, j = 1, 2, 3, 4, \dots$, \mathbf{U} é o vetor velocidade Euleriano, \mathbf{u} é o vetor velocidade Lagrangiano, \mathbf{x} é o vetor posição, a_i é a força atrito que atua na partícula devido ao escoamento. Este termo também é denominado termo determinístico, b_{ij} é um termo estocástico e dW é o processo de Wiener.

Para determinar o termo determinístico, a_i , Thomson (1987), considerou a equação de Fokker-Planck como um complemento Euleriano da equação de Langevin. Assim, a equação de Fokker-Planck pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i P_E) = -\frac{\partial}{\partial u_i}(a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j} \left(\frac{1}{2} b_{ij} b_{jk} P_E \right) \quad 7.3$$

Onde $P_E(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ é uma PDF (Função densidade de probabilidade) não condicional da flutuação da velocidade Euleriana. Como o termo $a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ está relacionado à PDF da velocidade turbulenta $P_E(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$, (Afonssi, 2005) pode-se determiná-lo por

$$\frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{u}(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \rangle = -\frac{\partial}{\partial x} \langle a_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \rangle + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{u}_i \partial \mathbf{u}_j} \langle b_{ij}^2(\mathbf{x}) P(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \rangle \quad 7.4$$

Na direção vertical, (Thomson, 1987), a Eq.(7.4) pode ser separada em

$$a(z, w) = \frac{1}{P(z, w)} \left(\frac{C_0 \varepsilon}{2} \frac{\partial P(z, w)}{\partial \mathbf{u}} + \phi(z, W) \right) \quad 7.5$$

E

$$\phi(z, w) = -\frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^u u P(z, w) du \quad 7.6$$

Onde $\phi \rightarrow 0$ com $|u| \rightarrow \infty$.

Quando a PDF apresenta formato gaussiano, a Eq.(7.2) torna-se

$$du = -\frac{u}{T_{Li}} dt + \sigma_u \left(\frac{2}{T_{Li}} \right)^{1/2} d\mu \quad 7.7$$

Para a condição de estabilidade convectiva, por exemplo, a turbulência é não-homogênea e a PDF da velocidade vertical é assimétrica (Afonssi, 2005). Assim, para esta situação é necessário considerar o momento de terceira ordem (terceiro momento da velocidade vertical) para descrever o transporte de contaminantes na atmosfera.

- Parametrização Utilizada

Degrazia et al. (2000) a partir do conhecimento da estrutura e característica da Camada Limite Planetária (CLP) propõe uma parametrização para a variância da velocidade do vento (σ_i^2) e para escala de tempo Lagrangiana (τ_{L_i}).

$$\sigma_i^2 = \frac{1,06c_i \left[\Psi_{\varepsilon}^c \frac{z}{h} \right]^{2/3} w_*^2}{\left[(f_m^*)_i \right]^{2/3}} + \frac{2,32c_i \left[\phi_{\varepsilon}^{n+s} \right]^{2/3} u_*^2}{\left[(f_m^*)^{n+s} \right]^{2/3}}, \quad 7.8$$

$$\tau_L = \frac{z}{\sqrt{c_i}} \left\{ \frac{0.14 \left[\frac{-L}{h-L} \right]^{1/2}}{\left[(f_m^*)^c \right]^{2/3} w_* \left[\psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{1/3}} + \frac{0.059}{\left[(f_m^*)^{n+s} \right]^{2/3} \left[\phi_\varepsilon^{n+s} \right]^{1/3} u_*} \right\} \quad 7.9$$

Onde h é a altura da CLP, L é o comprimento de Monin-Obukhov, w_* é a escala de vento convectiva, u_* é a velocidade local de fricção, $\psi_\varepsilon^c = \varepsilon h / w_*^3$ e $\phi_\varepsilon^{n+s} = (\varepsilon \kappa z) / u_*^3$, são funções adimensionais das taxas de dissipação associadas com o empuxo e a produção mecânica, respectivamente, $(f_m^*)^c$ representa o pico de frequência espectral convectivo, $-L/h$ é o parâmetro de estabilidade da camada limite planetária convectiva, κ é a constante de von Karman e $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi\kappa)^{-2/3}$ com $\alpha_u = 0.5 \pm 0.05$ e $\alpha_i = 1.4/3.4/3$ para as componentes u, v e w respectivamente.

As parametrizações Eq.(7.8) e Eq.(7.9) foram obtidas da teoria estatística da difusão de Taylor, propriedades espectrais observadas, onde uma combinação dos dois forçantes é assumido (térmico + mecânico) (Frisch, 1995), e o valor do comprimento de onda associado aos vórtices que contem energia. Esta parametrização fornece valores contínuos para CLP em toda a sua elevação ($z_0 \leq z \leq h$) e em todas as condições de estabilidade (Carvalho et al., 2002). Dessa forma, empregamos estas expressões na simulação numérica com o modelo LAMBDA, pois investiga-se situações fortemente convectivas. Na simulação numérica a variância da velocidade do vento e a escala de tempo Lagrangiana (τ_L) são utilizadas para determinar o termo estocástico $b_{ij}(x, u, t)$. Enquanto que a velocidade do vento é obtida a partir da teoria de Monin-obukhov e do modelo de Berkowicz et al. 1986

$$U(z) = c \left\{ \frac{u_*}{\kappa} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z}{L} \right) + \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \right\} \quad \text{se } z < z_b \quad 7.10$$

$$U(z) = c \{ U(z_b) \}$$

Onde $z_b = \min[L, 0.1h]$, e Ψ_m é a função estabilidade dada por (Paulsen, 1975):

$$\Psi_m = 2 \ln\left(\frac{1+A}{2}\right) + \ln\left(\frac{1+A^2}{2}\right) - 2 \tan^{-1} A + \frac{\pi}{2} \quad 7.11$$

- **Parte Computacional**

O modelo LAMBDA utilizado nas simulações numéricas é composto por três programas em linguagem FORTRAN. O primeiro programa a ser executado é denominado Meteorologia. Este programa contém as parametrizações da turbulência. Este programa gera o arquivo METE4.dat, este arquivo contém os valores de Tlw, Tlu..., que são dados de entrada do programa LAMBDA. O LAMBDA o segundo programa a ser executado utiliza quatro arquivos de entrada: o METE4.dat que é gerado pelo Meteorologia, o METE.dat que é um arquivo que contém os dados meteorológicos do experimento de Prairie Grass, o SF. Dat que contém os dados de concentração de poluentes destes experimentos, o arquivo EMISS.dat que possui informações gerais associadas a dados de emissão e da fonte e o arquivo PARAMETER.dat que contém o método numérico e o passo de tempo.

O último programa a ser executado é o Concentração. Este fornece os valores de concentração integrado ao nível do solo.

O modelo simula uma fonte que libera uma quantidade de partículas pré-determinadas para o estudo da dispersão de poluentes. Para o cálculo da concentração divide-se o domínio computacional em células, e a concentração é obtida pelo número de partículas em cada célula.

Neste trabalho foram considerados somente os experimentos em que o módulo da velocidade do vento médio foi menor que 6m/s. O passo no tempo foi mantido constante, $\Delta t = 1s$, e a cada passo de tempo foram liberadas cem partículas. O tamanho da célula utilizada foi de 20m x 20m x 2m. Na simulação empregou-se a função densidade de probabilidade Gram-Charlier (PDF Gram-Charlier) de terceira ordem.

7.1 Desempenho do Modelo LAMBDA

Uma forma de avaliar o desempenho do modelo LAMBDA é comparar os resultados observados e previstos pelo modelo. Para verificar o desempenho do modelo numérico utilizou-se o modelo estatístico de Hanna (1989). O modelo de Hanna faz uma comparação entre os valores de concentração simulados e observados a partir dos conceitos de: coeficiente de correlação, erro quadrático médio normalizado, fator de dois, desvio fracional e desvio fracional padrão.

Hanna (1989) define os índices estáticos mencionados acima da seguinte maneira:

- Coeficiente de correlação (COR, do inglês Correlation Coefficient)

O coeficiente de correlação estabelece o nível de relação entre duas variáveis. Este parâmetro é definido como

$$COR = \frac{(C_{obs} - C_{pre})(C_{obs} - C_{pre})}{\sigma_{obs}\sigma_{pre}} \quad 7.12$$

Onde *obs* representa o valor observado e *pre* o valor previsto pelo modelo.

- Erro quadrático médio normalizado (NMSE, do inglês Normalized Mean Square Error)

O erro quadrático médio normalizado está associado aos desvios entre concentração prevista e observada. O índice estatístico NMSE é definido como

$$NMSE = \frac{(C_{obs} - C_{pre})^2}{C_{obs}C_{pre}} \quad 7.13$$

- Fator de Dois (FA2, do inglês Factor 2)

O fator de dois indica a fração de dados no intervalo $0,5 \leq C_{pre} / C_{obs} \leq 2$.

- Desvio Fracional (FB, do inglês Fractional Bias)

O desvio fracional é o índice estatístico relacionado à tendência do modelo subestimar ou superestimar os valores das concentrações. Assim, valores negativos de FB indicam que o modelo superestima os valores observados e valores positivos que subestima. O FB é definido por

$$FB = \frac{(\overline{C_{obs}} - \overline{C_{pre}})}{0.5(\overline{C_{obs}} + \overline{C_{pre}})} \quad 7.14$$

- Desvio Padrão Fracional (FS)

O desvio padrão fracional informa o quanto o modelo consegue simular a dispersão de contaminantes quando comparado os valores observados e previsto pelo modelo. O FS é definido por

$$FS = \frac{2(\sigma_{obs} - \sigma_{pre})}{(\sigma_{obs} + \sigma_{pre})} \quad 7.15$$

Capítulo 8

RESULTADOS DA SIMULAÇÃO NUMÉRICA COM O MODELO LAMBDA

Neste capítulo apresenta-se os resultados obtidos com o modelo LAMBDA com a inclusão de diferentes formulações para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta e comparações com dados de concentração observados durante o experimento de Prairie Grass. O Projeto Prairie Grass foi implementado, durante período de verão, na cidade de Nebraska, nos Estados Unidos (Barad, 1958). Pequenas quantidades de poluentes (SO_2) foram liberadas de uma altura de 0,5 m acima do solo e coletadas por amostradores de concentração a uma altura de 1,5 m em diferentes distâncias: 50, 100, 200, 400 e 800 m. O local onde foi realizado o experimento era aproximadamente plano e o solo estava coberto por gramíneas, assim a rugosidade associada foi de 0,006 m. Metade dos experimentos de Prairie Grass foram realizados durante condições instáveis (convectivas) e o restante em noites com inversão de temperatura (McHugh, 1999).

Os parâmetros meteorológicos medidos durante a execução do projeto Prairie Grass (ver Tabela 10) foram utilizados para criar arquivos de entrada para inicialização do modelo LAMBDA (Carvalho et al., 2004). No presente trabalho, utilizam-se os dados dos experimentos cuja velocidade média do vento seja menor do que 6m/s (condição instável /convectiva).

Tabela 10 - Parâmetros meteorológicos medidos durante a execução do projeto Prairie Grass

Exp	-L (m)	h(m)	W*(m/s)	U(m/s)	Q(g/s)
1	9	260	0,84	3,2	82
7	10	1340	2,27	5,1	90
8	18	1380	1,87	5,4	91
10	11	950	2,01	5,4	92
15	8	80	0,70	3,8	96
16	5	1060	2,03	3,6	93
25	6	650	1,35	3,2	104

8.1 Comparação com os dados do experimento de Prairie Grass

Além das equações para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta obtidas a partir da simulação LES com a utilização da viscosidade de subfiltro de Taylor e Heisenberg, existem outras formulações muito utilizadas na literatura. Fazem parte destas a de Weil (1990), De Baas et al. (1986), e Rotach et al. (1996), Franzese (1999), Kastner-Klein (2001) entre outras. Todas estas expressões para o terceiro momento foram obtidas para situações de estabilidade instável. Neste seção, faz-se uma análise do desempenho do modelo LAMBDA com cada uma das formulações para o terceiro momento comparando-se os resultados simulados e observados no experimento Prairie Graas.

8.2 Simulação com o terceiro momento de LES com viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg

Os resultados das simulações do modelo LAMBDA com a inclusão do skewness da velocidade vertical turbulenta obtido por simulação com a viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg são apresentados nas Tabelas 11 e 12. A tabela 11 mostra uma comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) quando utiliza-se viscosidade de subfiltro de Taylor. A tabela 12 apresenta os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) quando se utiliza viscosidade de subfiltro de Heisenberg.

Analisando os valores de concentrações de poluentes apresentadas nas Tabelas 11 e 12, observa-se que o modelo LAMBDA com a inclusão do terceiro momento obtido por simulação com viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg simula razoavelmente bem as concentrações de contaminantes observadas no experimento clássico de Prairie Grass. O que se confirma ao se realizar a análise estatística a partir dos parâmetros de Hanna (1989). O erro quadrático médio normalizado, o desvio fracional e o desvio fracional padrão apresentam resultados próximo de zero e os valores simulados e observados estão bem correlacionados (COR=0,99) para simulação empregando o skewness de Taylor (ver Tabela 13).

Tabela 11 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento obtido por simulação com viscosidade de subfiltro de Taylor. Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 6,98	2,30 2,45	0,51 0,93	0,16 0,36	0,062 0,15
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 4,11	2,20 1,32	1,00 0,66	0,40 0,37	0,18 0,22
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 5,10	2,60 1,82	1,10 0,93	0,39 0,48	0,14 0,26
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 4,92	1,80 1,74	0,71 0,82	0,20 0,42	0,032 0,25
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 7,07	3,40 2,98	1,35 1,32	0,37 0,70	0,11 0,42
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,96	1,80 1,57	0,48 0,88	0,10 0,57	0,017 0,33
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 7,85	2,70 2,47	0,75 1,37	0,30 0,83	0,063 0,54

Tabela 12 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se skewness obtido por simulação com viscosidade de subfiltro de Heisenberg. Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 10,35	2,30 4,95	0,51 2,17	0,16 0,98	0,062 0,37
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 4,27	2,20 1,20	1,00 0,51	0,40 0,24	0,18 0,12
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 5,84	2,60 2,29	1,10 1,14	0,39 0,55	0,14 0,24
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 5,60	1,80 2,06	0,71 0,91	0,20 0,39	0,032 0,16
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 8,36	3,40 4,50	1,35 2,09	0,37 0,94	0,11 0,31
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,69	1,80 0,96	0,48 0,43	0,10 0,19	0,017 0,07
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 7,67	2,70 1,83	0,75 0,79	0,30 0,31	0,063 0,08

Tabela 13 – Resultados da análise estatística realizada a partir do modelo de Hanna para ambas as simulações.

Modelo LAMBDA	<i>NMSE</i>	<i>R</i>	<i>FA2</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
Heisenberg	0,21	0,95	0,77	-0,16	-0,17
Taylor	0,03	0,99	0,74	-0,03	0,04

Uma avaliação do desempenho do modelo LAMBDA a partir dos parâmetros de Hanna (1989) indica que a simulação lagrangiana com o terceiro momento, derivado do LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor, apresentou valores de concentração mais próximas dos valores observados durante o experimento de Prairie Grass. Isso pode ser confirmado observando-se os valores do NMSE, FB e FS na Tabela 13.

8.3 Simulação com o terceiro momento Weil 1990

Os resultados das simulações do modelo LAMBDA com a inclusão do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta proposto por Weil (1990) são apresentados na Tabela 14. A Tabela 14 mostra a comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) quando utiliza-se o terceiro momento da velocidade vertical de Weil (1990).

Tabela 14 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento de Weil (1990). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 6,63	2,30 2,12	0,51 0,78	0,16 0,31	0,062 0,13
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 4,04	2,20 1,25	1,00 0,64	0,40 0,36	0,18 0,23
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 4,86	2,60 1,68	1,10 0,85	0,39 0,46	0,14 0,25
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 4,87	1,80 1,68	0,71 0,80	0,20 0,43	0,032 0,24
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 6,72	3,40 2,7	1,35 1,18	0,37 0,63	0,11 0,35
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,79	1,80 1,48	0,48 0,85	0,10 0,53	0,017 0,32
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 8,93	2,70 3,07	0,75 1,55	0,30 0,93	0,063 0,59

8.4 Simulação com o terceiro momento Rotach

Os resultados das simulações do modelo LAMBDA com a inclusão do terceiro momento velocidade vertical turbulenta proposto por Rotach et al. (1996) são apresentados na Tabela 15. Nesta tabela é apresentada uma comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) quando utiliza-se o terceiro momento Rotach.

Tabela 15 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se terceiro momento de Rotach (1996). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.

Exp	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00	2,30	0,51	0,16	0,062
						8,22	3,29	1,51	0,80	0,47
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00	2,20	1,00	0,40	0,18
						3,96	1,25	0,62	0,36	0,22
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10	2,60	1,10	0,39	0,14
						4,99	1,79	0,91	0,46	0,26
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50	1,80	0,71	0,20	0,032
						4,75	1,63	0,81	0,42	0,25
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10	3,40	1,35	0,37	0,11
						6,67	2,58	1,09	0,60	0,36
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00	1,80	0,48	0,10	0,017
						4,70	1,44	0,84	0,54	0,33
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90	2,70	0,75	0,30	0,063
						7,38	2,33	1,24	0,81	0,51

8.5 Simulação com o terceiro momento de De Baas

Os resultados das simulações do modelo LAMBDA com a inclusão do momento terceiro da velocidade vertical turbulenta proposto por De Baas et al. (1986) são apresentados na Tabela 16. Esta tabela apresenta uma comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) LAMBDA quando emprega-se o terceiro momento da velocidade vertical de De Baas et al. (1986).

Tabela 16 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento de De Baas et al. (1986). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U_{10} m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 6,33	2,30 1,82	0,51 0,64	0,16 0,23	0,062 0,10
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 3,95	2,20 1,22	1,00 0,64	0,40 0,36	0,18 0,21
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 4,76	2,60 1,65	1,10 0,83	0,39 0,45	0,14 0,24
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 4,72	1,80 1,64	0,71 0,80	0,20 0,41	0,032 0,24
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 6,53	3,40 2,58	1,35 1,04	0,37 0,56	0,11 0,31
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,61	1,80 1,39	0,48 0,82	0,10 0,52	0,017 0,34
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 8,68	2,70 2,97	0,75 1,52	0,30 0,92	0,063 0,57

8.6 Simulação com o terceiro momento de Franzese (1999)

Os resultados das simulações numéricas com o modelo LAMBDA com o emprego do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta proposto por Franzese et al. (1999) são apresentados na Tabela 17. Esta tabela mostra a comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) LAMBDA quando emprega-se o terceiro momento da velocidade vertical de Franzese et al. (1999).

Tabela 17 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento obtido por Franzese et al. (1999). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha.

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U_{10} m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 6,51	2,30 1,99	0,51 0,71	0,16 0,28	0,062 0,12
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 3,97	2,20 1,27	1,00 0,65	0,40 0,36	0,18 0,21
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 5,04	2,60 1,81	1,10 0,91	0,39 0,47	0,14 0,26
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 4,78	1,80 1,64	0,71 0,80	0,20 0,43	0,032 0,25
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 6,75	3,40 2,66	1,35 1,13	0,37 0,60	0,11 0,34
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,63	1,80 1,41	0,48 0,80	0,10 0,53	0,017 0,32
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 7,51	2,70 2,36	0,75 1,33	0,30 0,83	0,063 0,53

8.7 Simulação com o terceiro momento obtido por LES e pela relação de similaridade

Os resultados das simulações numéricas com o modelo LAMBDA com o emprego do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta proposto na seção 5.3, utilizando-se o perfil do skewness de Heisenberg e Taylor e a relação de similaridade são apresentados aqui. A tabela 18 mostra a comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) LAMBDA com emprego da parametrização dada pela Eq.(5.14) . Os resultados apresentados na Tabela 19 foram obtidos com emprego da parametrização dada pela Eq.(5.15) no modelo LAMBDA.

Tabela 18 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento dado pela Eq.(5.14). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 6,97	2,30 2,42	0,51 0,91	0,16 0,40	0,062 0,35
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 3,38	2,20 0,50	1,00 0,09	0,40 0,01	0,18 0,003
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 5,60	2,60 1,95	1,10 0,74	0,39 0,17	0,14 0,03
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 4,98	1,80 1,33	0,71 0,31	0,20 0,05	0,032 0,01
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 7,03	3,40 2,32	1,35 0,46	0,37 0,12	0,11 0,13
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 3,09	1,80 0,11	0,48 0,03	0,10 0,007	0,017 0,002
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 4,45	2,70 0,18	0,75 0,04	0,30 0,01	0,063 0,003

Tabela 19 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento dado pela Eq.(5.15). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 6,52	2,30 2,04	0,51 0,73	0,16 0,26	0,062 0,11
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 4,03	2,20 1,27	1,00 0,64	0,40 0,38	0,18 0,22
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 4,83	2,60 1,67	1,10 0,87	0,39 0,47	0,14 0,25
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 4,8	1,80 1,68	0,71 0,82	0,20 0,43	0,032 0,25
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 6,61	3,40 2,59	1,35 1,12	0,37 5,98	0,11 0,35
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,77	1,80 1,46	0,48 0,85	0,10 0,54	0,017 0,34
25	6	650	1,35	3,2	104	7,90 8,79	2,70 2,97	0,75 1,56	0,30 0,96	0,063 0,59

8.8 Simulação com o terceiro momento Kastner-Klein (2001)

Os resultados das simulações numéricas com o modelo LAMBDA com o emprego do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta proposto por Kastner-Klein et al. (2001) são apresentados na Tabela 20. Nesta Tabela apresenta-se uma comparação entre os dados do experimento de Prairie Grass (C_{obs}) e os valores de máxima concentração ao nível da superfície previstos pelo modelo (C_{prev}) LAMBDA com emprego da parametrização dada pela Eq.(5.22).

Tabela 20 - Parâmetros meteorológicos e concentração integrada ao nível da superfície (C_y) medida durante o experimento Prairie Grass e simulada pelo modelo LAMBDA utilizando-se o terceiro momento dado pela Eq.(5.22). Concentrações observadas na primeira linha e concentrações previstas na segunda linha

Exp.	$-L$ (m)	h (m)	w_* (ms^{-1})	U 10 m (ms^{-1})	Q (gs^{-1})	50 m (gm^{-2})	100 m (gm^{-2})	200 m (gm^{-2})	400 m (gm^{-2})	800 m (gm^{-2})
1	9	260	0,84	3,2	82	7,00 5,96	2,30 1,49	0,51 0,47	0,16 0,17	0,062 0,07
7	10	1340	2,27	5,1	90	4,00 3,79	2,20 1,15	1,00 0,60	0,40 0,33	0,18 0,21
8	18	1380	1,87	5,4	91	5,10 4,88	2,60 1,70	1,10 0,87	0,39 0,46	0,14 0,24
10	11	950	2,01	5,4	92	4,50 4,57	1,80 1,54	0,71 0,75	0,20 0,40	0,032 0,23
15	8	80	0,70	3,8	96	7,10 6,44	3,40 2,39	1,35 0,95	0,37 0,52	0,11 0,30
16	5	1060	2,03	3,6	93	5,00 4,37	1,80 1,31	0,48 0,77	0,10 0,50	0,017 0,33

8.9 Comparação entre os resultados obtidos

Nesta seção faz-se uma comparação entre os resultados obtidos com a simulação numérica utilizando o modelo LAMBDA empregando diferentes parametrizações para o terceiro momento.

A análise dos resultados gerados pelo modelo LAMBDA é realizado a partir dos índices estatísticos de Hanna (1989). Uma comparação entre os valores de concentração de contaminantes observados durante o experimento de Prairie Grass e os previstos pelo LAMBDA mostra que o modelo com o emprego das parametrizações dadas pelas equações

(5.12, 5.21 e 5.23), simula razoavelmente bem as concentrações de poluentes observadas. Nota-se, ainda, que os resultados simulados que tiveram melhor concordância com os dados observacionais foram obtidos pelo emprego da parametrização dada pela Eq.(5.12), conforme pode ser observado na Tabela 21.

Tabela 21 - Desempenho do modelo LAMBDA a partir do índices estáticos de Hanna(1989)

Parametrização utilizada	<i>NMSE</i>	<i>R</i>	<i>FA2</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
Eq.(5.13)	0,21	0,95	0,77	-0,16	-0,17
Eq.(5.12)	0,03	0,96	0,74	-0,03	0,04
Eq.(5.14)	0,28	0,89	0,74	-0,09	-0,01
Eq.(5.15)	0,37	0,93	0,40	0,31	0,08
Eq.(5.18)	0,06	0,98	0,77	0,02	0,05
Eq.(5.20)	0,07	0,97	0,71	-0,04	0,04
Eq.(5.23)	0,04	0,99	0,80	0,02	0,08
Eq.(5.22)	0,08	0,99	0,83	0,11	0,14
Eq.(5.21)	0,05	0,98	0,74	-0,02	0,02

Para avaliar o desempenho do modelo LAMBDA em regiões próximas da fonte de emissão empregou-se a análise estatística de Hanna (1989) para todos os experimentos a uma distancia de 50 metros da fonte, conforme consta na Tabela 22.

Tabela 22 - Desempenho do modelo LAMBDA em regiões próximas da fonte

Parametrização utilizada	<i>NMSE</i>	<i>R</i>	<i>FB</i>	<i>FS</i>
Eq.(5.13)	0,05	0,83	-0,14	-0,37
Eq.(5.12)	0,0007	0,99	0,009	0,06
Eq.(5.14)	0,08	0,55	0,13	-0,04
Eq.(5.15)	0,006	0,95	0,006	0,09
Eq.(5.18)	0,007	0,95	0,02	-0,08
Eq.(5.20)	0,008	0,92	0,002	-0,06
Eq.(5.23)	0,003	0,99	0,03	0,13
Eq.(5.22)	0,01	0,98	0,09	0,26
Eq.(5.21)	0,006	0,95	-0,006	-0,12

Observando-se a Tabela 22 pode-se concluir que a concentração de contaminantes emitida por uma fonte baixa, nas regiões próximas, é melhor descrita pela modelo LAMBDA empregando o terceiro momento dado pela Eq.(5.12). O fato da parametrização dada pela Eq.(5.12) descrever um pouco melhor a concentração de contaminantes nas proximidades da

fonte é de extrema importância na descrição dos fenômenos de dispersão, pois permite avaliar situações de risco e impactos ocasionados pelas fontes poluentes em regiões próximas desta (Szinvelski, 2004).

De acordo com os resultados apresentados, o modelo LAMBDA com o emprego das parametrizações para o terceiro momento que crescem com z/z_i reproduz de forma satisfatória as concentrações observadas durante o experimento de Prairie Grass. Assim, buscando avaliar a sensibilidade do modelo ao emprego de diferentes parametrizações para o terceiro momento, utilizou-se um valor constante para o terceiro momento (como apresentado por Sawford; Guest, 1988). A simulação utilizando-se o terceiro momento de Sawford e Guest (1988) ($\overline{w^3}/w_*^3 = 0,8$) apresentou valores de NMSE de 1,31, uma correlação de sessenta e cinco por cento, e o desvio fracional (FB) foi de 0,14. Evidenciando que expressões constantes para o terceiro momento tendem a diminuir o valor das concentrações calculadas pelo modelo e não reproduzem adequadamente a concentração de contaminantes observada.

De modo geral, todas as parametrizações apresentadas na Tabela 22 descrevem razoavelmente bem a distribuição de contaminantes para regiões próximas, intermediárias e distantes da fonte. Dessa forma, as parametrizações discutidas podem ser utilizadas para reproduzir o processo dispersivo turbulento presente numa CLP. Salienta-se, entretanto, que algumas delas apresentam resultados um pouco melhores do que as demais.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste estudo, foram realizadas simulações LES com diferentes viscosidades de subfiltro (viscosidade de subfiltro de Taylor e de Heisenberg). Comparando-se os valores simulados de skewness com os valores observados na torre micrometeorológica de 8 m, observa-se que a simulação LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor descreve razoavelmente bem o comportamento do skewness e do terceiro momento da velocidade vertical turbulenta na camada limite superficial.

O skewness da velocidade vertical turbulenta é um indicador da distribuição de movimentos updrafts e downdrafts. O seu perfil vertical compõe a parametrização para o terceiro momento da velocidade vertical turbulenta nos modelos lagrangianos. Assim, as expressões para o skewness resultantes da simulação LES foram empregadas no modelo LAMBDA e comparadas com outras encontradas na literatura.

A análise dos resultados mostra que o emprego do terceiro momento derivado da simulação LES empregando a viscosidade de subfiltro de Taylor apresentou os melhores resultados. Cabe ressaltar que a diferença entre os resultados foi pequena, e do ponto de vista estatístico todas as parametrizações apresentadas reproduzem de forma satisfatória as concentrações observadas.

Verificou-se que valores constantes para o terceiro momento (como apresentados por Sawford; Guest, 1988), tendem a diminuir o valor das concentrações calculadas. Por outro lado, as expressões para o terceiro momento que crescem com z/z_i fornecem valores de concentração próximos dos observados.

No caso dos valores do parâmetro de assimetria ou skewness medidos em torres micrometeorológicas foi observado que para uma altura de 8 m, o valor do skewness é da ordem de 10^{-1} e o terceiro momento da ordem de 10^{-2} . A simulação LES empregando viscosidade de subfiltro de Taylor fornece um valor de skewness da ordem de 10^{-1} e a simulação com a viscosidade de subfiltro de Heisenberg é da ordem de 10^{-2} . Dessa forma, os resultados numéricos de LES estão de acordo com os valores medidos nas observações do

projeto PAMPA07 e concordam com as medidas de skewness na camada limite superficial de Hunt et al. (1988).

A análise apresentada acima mostra que as simulações LES de alta resolução fornecem valores adequados do terceiro momento e do skewness da velocidade vertical turbulenta e seus perfis podem ser usados em modelos lagrangianos para simular a dispersão de contaminantes na atmosfera.

Capítulo 10

REFERÊNCIAS

AFONSSI, D. Dispersão Lagrangiana na Camada Limite Planetária. **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. Editora da UFRGS, Porto Alegre, 2005, p.81-98.

ARYA, S. P. **Air pollution meteorology and dispersion**. New York: Oxford, 1999. 310 p.

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

BULIGON, L. **Solução da equação de Difusão Unidimensional Transiente para o Estudo da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária** . 2004. 101f. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada), UFRGS, Porto Alegre, 2003.

CARVALHO, J.C. et al. Lagrangian stochastic dispersion modelling for the simulation of the release of contaminants from tall and low sources. **Meteorologische Zeitschrift**, v.11, p.89-97, 2002.

CARVALHO, J.C. et al. Uma Solução Alternativa Da Equação De Langevin Usando A Função Densidade De Probabilidade Gram-Charlier. Congresso Brasileiro de Meteorologia, 2004, Fortaleza. **Anais do XIII CBMET**. , 2004.

CAUGHEY, S. **Observed characteristics of the atmospheric boundary layer**. 1982.

DE BAAS, A.F.; VAN DOP, H.; NIEUWSTADT, F.T.M. An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, John Wiley & Sons, v. 112, p. 165-180, 1986.

DEARDORFF, J.W. Prediction of convective mixed-layer entrainment for realistic capping inversion structure. **Journal Atmospheric Science**, v.36, p.424-436, 1979.

DEARDORFF, J. The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. **American Society of Mechanical Engineers**, Applied Mechanics and Fluids Engineering Conference, Atlanta,1973.

DEARDORFF, J.; WILLIS, G.; STOCKTON, B. Laboratory studies of the entrainment zone of a convectively mixed layer. **J. Fluid Mech**, v. 100, n. 1, p. 41-64, 1980.

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

DEGRAZIA, G. et al. Turbulence and Dispersion of Contaminants in the Planetary Boundary Layer. **Air Pollution and turbulence: modeling and applications**, CRC Press, 2010, 354 p.

DEGRAZIA, G. et al. Employing Heisenberg's turbulent spectral transfer theory to parameterize sub-Filter scales in LES models. **Atmospheric Environment**, Elsevier, v. 41, n. 33, p. 7059-7068, 2007.

DEGRAZIA, G. et al. A variable mesh spacing for large-eddy simulation models in the convective boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, Springer, v. 131, n. 2, p. 277-292, 2009.

FEDOROVICH, E. et al. Wind tunnel study of turbulent flow structure in the convective boundary layer capped by a temperature inversion. **Journal of the Atmospheric Sciences**, American Meteorological Society, v. 53, n. 9, p. 1273-1289, 1996.

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

FRANZESE, P.; LUHAR, A.K.; BORGAS, M.S. An efficient Lagrangian stochastic model of vertical dispersion in the convective boundary layer. **Atmospheric environment**, Oxford [England]; New York: Pergamon, v.33, n. 15, p. 2337-2346, 1999.

FRISCH, U. **Turbulence**, Cambridge University Press, 1995, 296 p..

GIOIA, G. **Study of the Dispersion Properties of Planetary Boundary Layer by Means of Large-Eddy Simulation**. 2003. 138f. Tese (Doutorado em Geofísica) – Consorzio Interuniversitario Lecce-Messina-Palermo, Lecce, 2003.

HANNA, S.R., 1989, Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jackknife resampling methods, **Atmospheric environment**, v. 23, p. 1385-1395.

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

HUNT, JCR AND KAIMAL, JC AND GAYNOR, JE, Eddy structure in the convective boundary layer-new measurements and new concepts. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, John Wiley & Sons, v. 114, p. 827-858, 1988.

KAIMAL, JC; FINNIGAN, JJ. **Atmospheric boundary layer flows: Their structure and measurement**. Oxford Univ. Press, New York, 1994, 289 p.

KASTNER-KLEIN, P; FEDOROVICH, E. Gaseous pollutant dispersion around urban-canopy elements: wind tunnel case studies. **International Journal of Environment and Pollution**, v. 8, p. 727-737, 1997.

KOLMOGOROV, A. N. On degeneration (decay) of isotropic turbulence in an incompressible viscous liquid. **Dolk. Akad. Nauk. RSSS**, v. 31, p. 538-540, 1941.

LENSHOW, D. H.; WYNGAARD, J. C.; PENNELL, W. T. Mean- field and second-moment budgets in a baroclinic, convective boundary layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, 37, p.1314-1326, 1980.

LESIEUR, M.; METAIS, O. New trends in large-eddy simulations of turbulence. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 28, n. 1, p. 45-82, 1996.

MARQUES, E. P. **Investigação da camada limite planetária convectiva com modelo LES aplicado à dispersão de poluentes**. 2004. 139f. Tese (Doutorado em Meteorologia)– Universidade de São Paulo, São Paulo, 2004

MASON, P. Large-eddy simulation: A critical review of the technique. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, Bracknell: Royal Meteorological Society, v. 120, n. 515, p. 1-26, 1994.

MCHUGH, CA. et al. Comparison of model evaluation methodologies with application to ADMS 3 and US models. 6th international conference on harmonisation within atmospheric dispersion modelling for regulatory purposes, Rouen, France, 1999. p. 1-7.

MOENG, C.; ROTUNNO, R. Vertical-velocity skewness in the buoyancy-driven boundary layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, American Meteorological Society, v. 47, n. 9, p. 1149-1162, 1990.

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. **Ambient. soc**, SciELO Brasil, p. 159-172, 2004.

PALANDI, J. **Modelo espectral de Heisenberg aplicado ao decaimento da camada residual**. Santa Maria: UFSM, 2005. 179 p. Tese (Doutorado)- Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2005.

PARK, J.H.; Cho, C.J.; Lee, J.J. Large eddy simulation model of turbulent flow in PBL. **KSCE Journal of Civil Engineering**, Springer, v. 2, p. 451-459, 1998.

PAULSEN, C.A. The mathematical representation of wind and temperature profiles in a unstable atmospheric surface layer. **J. Appl. Met.**, 9, 857-861, 1975.

PUHALES, F. S. **Estudo do Ciclo Diário Da Camada Limite Planetária Através da Simulação dos Grandes Turbilhões**. Santa Maria: UFSM, 2008. 179 p. Dissertação (Mestrado)- Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2008

RIZZA, U.; GIOIA, G.; MANGIA, C. Dispersão euleriana em uma camada limite planetária gerada por LES. **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. Editora da UFRGS, Porto Alegre, 2005, p. 161-180.

ROTACH, M.; GRYNING, S.; TASSONE, C. A two-dimensional Lagrangian stochastic dispersion model for daytime conditions. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, Bracknell: Royal Meteorological Society, v. 122, n. 530, p. 367-390, 1996

SAGAUT, P. Introduction a la simulation des grandes echelles pour les ecoulements de fluide incompressible. **Springer**, 1998.

SAWFORD, B. L., GUEST, F. M., Lagrangian stochastic analysis of fluxgradient relationships in the convective boundary layer, **J. of the Atmos. Sci.**,v. 44, pp. 1152–1165, 1987.

SCHMIDT, H. and SCHUMANN, U. Coherent structure of the convective boundary layer derived from large-eddy simulations. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge Univ Press,v. 200, p. 511-562, 1989.

SEINFELD, J.; PANDIS, S. **Atmospheric chemistry and physics**. New York, 1998.

SIQUEIRA, A.C. ; ROBERTI, D.R; MORAES, O.L.L. Estudo Do Transporte E Dispersão De Poluentes Próximo À Usina Presidente Medice, Candiota-Rs, Utilizando Modelagem Lagrangeana. Congresso Brasileiro de Meteorologia, 2004, Fortaleza. **Anais do XIII CBMET.** , 2004.

SMAGORINSKY, J. S. general circulate on experiments with primitive equations. **Monthly Weather**.Rev:91, p.99-164., 1963.

STULL, R. **An introduction to boundary layer meteorology**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1988. 666 p.

SZINVELSKI, C.R.P. **Solução Semi-Analítica da Equação de Langevin Assimptótica para o Deslocamento Aleatório pelo Método de Picard**. 2004. 92f. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada), UFRGS, Porto Alegre, 2004.

SULLIVAN, P.; MCWILLIAMS, J.; MOENG, C. A subgrid-scale model for large-eddy simulation of planetary boundary-layer ows. **Boundary-Layer Meteorology**, Springer, v. 71, n. 3, p. 247-276, 1994.

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

WEIL, JC. A diagnosis of the asymmetry in top-down and bottom-up diffusion using a Lagrangian stochastic model. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v. 47,1990.