

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

**ESTUDO DA DIFUSÃO TURBULENTA  
EMPREGANDO MODELOS ESTOCÁSTICOS  
LAGRANGEANOS**

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**Andréa Ucker Timm**

**Santa Maria, RS, Brasil  
2007**

**ESTUDO DA DIFUSÃO TURBULENTA EMPREGANDO  
MODELOS ESTOCÁSTICOS LAGRANGEANOS**

**por**

**Andréa Ucker Timm**

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Física, Área de Concentração em Áreas Clássicas da Fenomenologia e suas Aplicações, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS), como requisito parcial para obtenção do grau de  
**Mestre em Física**

**Orientador: Gervásio Annes Degrazia  
Co-Orientadora: Débora Regina Roberti**

Santa Maria, RS, Brasil

2007

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

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

**ESTUDO DA DIFUSÃO TURBULENTA EMPREGANDO MODELOS  
ESTOCÁSTICOS LAGRANGEANOS**

elaborada por  
**Andréa Ucker Timm**

como requisito parcial para obtenção do grau de  
**Mestre em Física**

**COMISSÃO EXAMINADORA:**

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

**Prof. Dr. Jonas da Costa Carvalho (UFPel)**

**Prof. Dr. Antônio Goulart (UNIPAMPA/UFSM)**

Santa Maria, 09 de Março de 2007.

**Aos meus pais, pela educação dada e pelo  
apoio constante, e ao Jardel.**

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço, de forma especial, ao Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazia, pelo seu trabalho como orientador, pela oportunidade de compartilhar da sua experiência profissional, também pelo grande incentivador e amigo que tem sido.

À co-orientadora Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Débora Regina Roberti pelo conhecimento transmitido, principalmente na manipulação dos modelos computacionais utilizados, pela grande amizade e apoio.

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

À Coordenação e funcionários do Curso que sempre estiveram a disposição para solucionar eventuais problemas surgidos.

A todos os amigos do Laboratório de Micrometeorologia, pelo convívio e amizade com que me acolheram.

Aos meus pais, em especial, pelo incentivo e apoio, não somente durante a realização desta dissertação, mas no decorrer de toda a minha vida.

Ao Jardel, pelo amor, carinho e compreensão, mesmo nos momentos em que estive ausente.

Aos meus amigos que em vários momentos ajudaram-me com palavras ou simplesmente com sua presença.

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

À Deus.

## **RESUMO**

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

### **ESTUDO DA DIFUSÃO TURBULENTA EMPREGANDO MODELOS ESTOCÁSTICOS LAGRANGEANOS**

**AUTORA: ANDRÉA UCKER TIMM**

**ORIENTAÇÃO: Dr. GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA e Dr<sup>a</sup>. DÉBORA  
REGINA ROBERTI**

**Data e Local da Defesa: Santa Maria, 09 de Março de 2007.**

Neste trabalho é utilizado o modelo de partículas estocástico Lagrangeano LAMBDA para simular a dispersão e o transporte de contaminantes sob diferentes condições atmosféricas. A análise emprega três diferentes experimentos de difusão atmosférica: o experimento de Copenhague, que foi realizado sob condições convectivas, o experimento de Prairie Grass, em que foram considerados somente os casos de estabilidade neutra (velocidades do vento médio maiores que 6m/s) e o experimento de INEL realizado em condições estáveis com velocidade do vento fraco e apresentando o fenômeno de meandro do vento. LAMBDA é um modelo tridimensional para simular a dispersão de poluentes sobre terreno plano. O modelo resolve a forma generalizada da Equação de Langevin e pode usar os momentos de ordem superior da função densidade de probabilidade Euleriana das flutuações da velocidade do vento. O principal objetivo deste trabalho é testar uma nova parametrização dos parâmetros  $p$  e  $q$  que representam as frequências associadas ao fenômeno de meandro do vento. Esta nova parametrização é descrita em termos de  $m$ , uma quantidade adimensional que controla a frequência de oscilação do meandro e  $T$ , uma escala de tempo associada às estruturas coerentes em uma turbulência bem desenvolvida. As simulações demonstram que o modelo LAMBDA incorporando esta nova parametrização reproduz corretamente a difusão de escalares passivos em uma camada limite atmosférica estável com velocidade do vento fraco.

## **ABSTRACT**

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

### **STUDY OF TURBULENT DIFFUSION EMPLOYING LAGRANGIAN STOCHASTIC MODELS**

AUTORA: ANDRÉA UCKER TIMM

ORIENTAÇÃO: Dr. GERVÁSIO ANNES DEGRAZIA e Dr<sup>a</sup>. DÉBORA  
REGINA ROBERTI

Data e Local da Defesa: Santa Maria, 09 de Março de 2007.

In this work, the Lagrangian stochastic particle model LAMBDA is utilized to simulate the dispersion and the transport of contaminants under different atmospheric conditions. The analysis employs three different field experiments of atmospheric diffusion: the Copenhagen experiment, which was accomplished in unstable conditions, the Prairie Grass experiment in which was considered only neutral stability cases (mean wind velocity higher than  $6\text{ms}^{-1}$ ) and the INEL experiment occurring in low wind stable conditions and presenting wind meandering phenomenon. LAMBDA is a tridimensional model to simulate the pollutants dispersion over flat terrain. The model solves the generalized form the Langevin Equation and it can use the higher moments of Eulerian probability density function of the wind velocity fluctuations. The main aim of this work is to test a new parameterization for the parameters  $p$  and  $q$  which represent the frequency associated to the meandering phenomenon. The new parameterization is expressed in terms of  $m$ , a non-dimensional quantity that controls the meandering oscillation frequency, and  $T$ , a time scale associated to the coherent structures in a fully developed turbulence. The simulations show that the LAMBDA model incorporating this new parameterization reproduces correctly the enhanced diffusion of passive scalars in a low wind speed stable atmospheric boundary layer.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Estrutura da CLP. Fonte: adaptada de Stull, 1998 .....	18
Figura 4.1 – Área do experimento de Copenhagen. O eixo $x$ está apontando para Leste, o eixo $y$ para norte e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos em três arcos concêntricos em relação à fonte. O contaminante foi liberado de uma altura de 115m na posição $(x, y) = (0,0)$ . Foram instalados e distribuídos aproximadamente 20 sensores ao longo de cada arco. A linha cheia indica o litoral de Øresund (extraído de Gryning e Lyck, 1998) .....	54
Figura 4.2 – Área do experimento de INEL. Os amostradores são representados por ( $\bullet$ ), as torres ( $\Delta$ ) e as torres meteorológicas a 61m por ( $\star$ ) sobre a grade de localização (extraído de de Sagendorf e Dickson, 1974) .....	59
Figura 4.3 – Diagrama de espalhamento entre os valores de concentração integradas ao nível do solo ( $C_y$ ) simuladas e observadas para o conjunto de dados de Copenhagen .....	66
Figura 4.4 – Isolinhas de concentração de $SF_6$ ao nível do solo com os dados do modelo LAMBDA simulando o experimento de Copenhagen para os números de experimentos 1, 2 e 7, respectivamente, com diferentes valores do parâmetro $L$ : (a) $L = -37m$ , (b) $L = -292m$ e (c) $L = -104m$ . O * em vermelho representa a posição da fonte .....	67
Figura 4.5 – Diagrama de espalhamento entre os valores de concentração integradas ao nível do solo ( $C_y$ ) simuladas e observadas para o conjunto de dados de Prairie Grass .....	70
Figura 4.6 – Concentração ao nível do solo normalizada ( $m^{-2}$ ) em função dos ângulos para o experimento 8 a 200m. As figuras plotadas referem-se ao (a) modelo LAMBDA implementado e (b) modelo LAMBDA tradicional. A linha em azul indica concentração observada e a linha vermelha indica concentração simulada .....	72

Figura 4.7 – Como Figura 4.6 mas para o experimento 4 a 100m .....	72
Figura 4.8 – Como Figura 4.6 mas para o experimento 11 a 400m .....	73
Figura 4.9 – Como Figura 4.6 mas para o experimento 12 a 100m .....	73
Figura 4.10 – Concentração máxima calculada com o (a) modelo LAMBDA implementado para vento fraco e (b) modelo LAMBDA tradicional. O eixo $x$ mostra os valores observados e o eixo $y$ os valores simulados .....	76
Figura 4.11 – Como Figura 4.10 mas para top5 .....	76
Figura 4.12 – Como Figura 4.10 mas para $C_y$ .....	77
Figura 4.13 – Como Figura 4.10 mas para $S_y$ .....	77

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Copenhagen ...	55
Tabela 4.2 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Prairie Grass ..	57
Tabela 4.3 – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de INEL .....	60
Tabela 4.4 – Valores de concentração integrada ao nível do solo ( $C_y$ ) observadas e simuladas para o experimento de Copenhagen .....	65
Tabela 4.5 – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de Copenhagen obtidos através do modelo simulado, por Carvalho et al. (2002) e por Ferrero et al. (1995) .....	66
Tabela 4.6 – Valores de concentração integrada ao nível do solo ( $C_y$ ) medidas durante o experimento de Prairie Grass. Concentrações observadas estão na primeira linha e concentrações simuladas na segunda linha .....	69
Tabela 4.7 – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de Prairie Grass obtidos através do modelo simulado e por Carvalho et al. (2002) somente para os experimentos com condição de estabilidade neutra (velocidade do vento maior que 6m/s) .....	69
Tabela 4.8 – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de INEL obtidos pelo modelo simulado, por Sagendorf e Dickson (1974), por Sharan e Yadav (1998) e por Oettl et al. (2001) .....	74

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	12
2. DISPERSÃO ATMOSFÉRICA	17
2.1. Camada Limite Planetária .....	17
2.2. Modelos matemáticos da dispersão de poluentes .....	20
2.2.1. Modelos Lagrangeanos .....	21
2.2.2. Modelos estocásticos Lagrangeanos .....	22
2.3. Estudos da dispersão com modelos Lagrangeanos .....	23
2.3.1 Revisão de parametrizações da turbulência .....	25
2.4. Estudos da dispersão sob condições de vento fraco .....	28
3. MODELOS ESTOCÁSTICOS LAGRANGEANOS	36
3.1. Movimento Browniano .....	36
3.2. O modelo de Langevin .....	37
3.2.1. Turbulência não-homogênea e Gaussiana .....	38
3.2.2. Turbulência não-homogênea e não-Gaussiana .....	41
3.2.3. Função densidade de probabilidade (FDP) Gram-Chalier .....	43
3.3. Modelo de vento fraco .....	44
3.4. Cálculo da concentração em um modelo estocástico Lagrangeano .....	47
4. SIMULAÇÃO DOS MODELOS ESTOCÁSTICOS LAGRANGEANOS	49
4.1. Parâmetros utilizados nas simulações .....	49
4.2. Experimento de Copenhagen .....	52
4.3. Experimento de Prairie Grass .....	55

4.4. Experimento de INEL .....	57
4.4.1. Implementação do modelo LAMBDA .....	60
4.5. Resultados obtidos .....	61
4.5.1. Copenhagen .....	63
4.5.2. Prairie Grass .....	67
4.5.3. INEL .....	70
5. CONCLUSÃO .....	78
5.1. Trabalhos futuros .....	80
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	81

## Capítulo 1

### INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, a dispersão de poluentes na atmosfera tornou-se um assunto bastante estudado, e a importância do tema tornou-se ainda maior com o aumento do número de emissões de contaminantes na atmosfera. Um fator decisivo que tem motivado o estudo detalhado do transporte e da dispersão de poluentes na atmosfera são as exigências de uma geração sempre maior de energia em sociedades modernas que desenvolvem inovações tecnológicas e apresentam uma rápida industrialização. Concomitantemente, o aumento da população em áreas primitivamente ocupadas por florestas fizeram com que a poluição do ar representasse um grande problema para países em desenvolvimento. Recentemente, um relatório preparado pela ONU alerta para os efeitos do aquecimento global na terra. Um grande número de cientistas de vários países, que fazem parte do IPCC, Painel Intergovernamental de Mudanças Climáticas, chegaram a conclusão que o problema está no acúmulo de poluentes lançados na atmosfera, provocado pela queima de petróleo e derivados, carvão e queima de florestas. Estima-se que a temperatura média do planeta subirá de 1,8 a 4 graus até 2100, provocando um aumento no nível dos oceanos de 18 a 59 centímetros. De acordo com o relatório, o Brasil é o quarto país que mais contribui para o aumento do efeito estufa no mundo, principalmente por causa do desmatamento das florestas.

Analisando-se os argumentos acima se conclui que a determinação do transporte de poluentes na atmosfera é um fator importante no gerenciamento ambiental, envolvendo o conhecimento detalhado da evolução temporal e espacial da Camada Limite Planetária (CLP). Face às dificuldades existentes, principalmente associadas aos altos custos, na caracterização observacional através de campanhas de medidas, o transporte de poluentes na atmosfera é normalmente avaliado através de modelos matemáticos.

Os modelos matemáticos que determinam as propriedades da atmosfera e os seus efeitos sobre os poluentes são denominados modelos de dispersão, os quais representam uma importante ferramenta de investigação dos transportes de poluentes na atmosfera. Devido à estrutura complexa da CLP, onde os campos de vento e a turbulência são não-homogêneos e

não-estacionários, a aplicação destes modelos para a dispersão de poluentes é uma tarefa que encontra inúmeras dificuldades. A aplicação de modelos de partículas estocásticos Lagrangeanos tem sido normalmente aconselhada devido à natureza Lagrangeana do movimento das partículas, uma vez que elas se movem seguindo o escoamento.

Nos modelos estocásticos Lagrangeanos a concentração de poluentes na atmosfera é determinada através do acompanhamento da trajetória de um conjunto de partículas fictícias liberadas continuamente, ou instantaneamente, em um escoamento turbulento. Essas partículas comportam-se como os elementos do fluido e viajam com a velocidade dos elementos que compõem o escoamento turbulento. As trajetórias descritas pelas partículas são simuladas numericamente a partir do campo de velocidade e das propriedades físicas do escoamento. Assim, a concentração do poluente é determinada através da distribuição espacial das partículas em um dado volume a cada instante de tempo.

Devido ao bom entendimento da estrutura turbulenta da Camada Limite Planetária (CLP) durante condições de ventos fortes, a dispersão de poluentes sobre estas condições tem sido modelada satisfatoriamente. Por outro lado, em situações de ventos fracos e especialmente durante condições estáveis, a estrutura turbulenta da CLP é deficientemente conhecida (Sharan et al., 1995). Como resultado, a ocorrência de velocidades do vento fraco é geralmente considerada a situação mais crítica para a dispersão de poluentes em distâncias próximas e médias da fonte de emissão (Cirillo e Poli, 1992). A difusão de poluentes liberados sob tais condições é considerada irregular e indefinida, pois a pluma de contaminantes fica sujeita a grandes oscilações horizontais do vento, as quais são chamadas de meandro do vento. No entanto, a dispersão de poluentes na CLP é fortemente influenciada pela estabilidade da atmosfera próxima a superfície. A estrutura da camada limite e a dispersão de contaminantes do ar tornam-se complexos com o grau de estabilidade e enfraquecimento dos ventos (Sharan e Gopalakrishnan, 2003).

A estabilidade da atmosfera pode ser definida como sendo a sua capacidade de resistir ou intensificar os movimentos verticais (Moraes, 2004). Quando ela resiste aos movimentos verticais é chamada de atmosfera estável, quando intensifica estes movimentos é dita atmosfera instável ou convectiva, e quando é indiferente a qualquer tipo de movimento vertical é chamada de atmosfera neutra. Através do perfil de temperatura potencial  $\theta$  na vertical pode-se determinar o grau de estabilidade da atmosfera, e cada tipo de estabilidade atmosférica irá proporcionar uma melhor ou pior dispersão dos poluentes. A temperatura potencial pode ser definida como a temperatura que uma parcela de ar teria se fosse trazida adiabaticamente de um determinado nível onde a pressão é de 1000mb (Arya, 1999):

$$\theta = T \left( \frac{p_0}{p} \right)^{R/c_p} \quad (1.1)$$

onde  $T$  é a temperatura ao nível de pressão,  $p_0 = 1000\text{mb}$ ,  $R$  é a constante do gás,  $c_p$  é o calor específico a pressão constante, sendo  $R/c_p \cong 0.286$ . Em um escoamento adiabático a temperatura potencial é conservada, isto é, a temperatura das parcelas de ar que não trocam calor com o ambiente é conservada ou permanece constante.

Deste modo, o perfil vertical de temperatura próximo ao solo é um dos fatores que mais influenciam a dispersão de poluentes na atmosfera. Condições neutras são caracterizadas pela ocorrência de um perfil vertical de temperatura aproximadamente constante com a altura. Estas condições ocorrem geralmente durante as transições do dia para a noite e vice-versa, em dias nublados ou com fortes ventos (com velocidades maiores do que  $\sim 6\text{m/s}$ ). Condições instáveis ou convectivas ocorrem durante o dia, com forte entrada de radiação solar. Estas condições proporcionam uma forte mistura vertical dos poluentes, provocada por movimentos convectivos organizados gerados pelo aquecimento solar da superfície.

Condições estáveis são caracterizadas por um perfil sub-adiabático (aumento da temperatura com a altura). Quando a parcela de ar ao elevar-se na atmosfera encontra ar quente sua tendência é descer. Em situações estáveis qualquer movimento vertical é inibido. Logo, a turbulência causada por efeitos convectivos não está presente, e a única turbulência existente é a mecânica (ventos). Sob estas condições, com ventos fracos, o poluente pode viajar a grandes distâncias mantendo altas concentrações. Modelar o transporte e dispersão de poluentes na camada estável ainda é um dos grandes desafios da micrometeorologia, pois uma atmosfera estável na presença de ventos fracos, por exemplo, é uma das situações onde se torna mais difícil prever a dispersão de poluentes (Degrazia et al., 1998; Brusasca et al., 1992).

A estabilidade atmosférica pode ainda ser definida a partir do comprimento de Monin-Obukhov ( $L$ ). O comprimento de Monin-Obukhov é uma escala de altura acima da superfície onde os efeitos da turbulência mecânica se impõem sobre os efeitos da turbulência térmica, tal que:

$$L = -\frac{\overline{\theta} u_*^3}{kg(\overline{w\theta})} \quad (1.2)$$

onde  $\bar{\theta}$  é a temperatura potencial,  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $k \cong 0.4$  (constante de von Karman),  $g$  é a aceleração da gravidade e  $\overline{w\theta}$  é o fluxo turbulento de calor sensível na vertical.

Quando  $L$  é positivo o fluxo turbulento de calor sensível é negativo e, neste caso, prevalecem condições estáveis, para  $L$  negativo temos que o fluxo vertical turbulento de calor sensível é positivo e, portanto, a camada é instável ou convectiva (convecção térmica e mecânica) e quando  $L$  tende para infinito o fluxo é nulo, logo temos condições neutras.

O objetivo deste trabalho é utilizar um modelo de dispersão estocástico Lagrangeano para simular a dispersão e o transporte de poluentes sob diferentes condições atmosféricas testando parâmetros turbulentos que descrevem a capacidade de mistura da CLP. Para isto utilizam-se três diferentes experimentos de dispersão: o experimento de Copenhagen realizado sob condições de estabilidade convectiva, o experimento de Prairie Grass, do qual foram considerados somente os casos de estabilidade neutra, ou seja, velocidades do vento médio maiores que 6m/s e, por último, o experimento de INEL realizado sob condições estáveis apresentando magnitudes baixas da velocidade do vento. A principal contribuição deste trabalho é testar, para condições estáveis, uma nova parametrização dos parâmetros  $p$  e  $q$ , que representam as frequências associadas ao fenômeno de meandro do vento e estão presentes nas equações de Langevin para as componentes do vento horizontal (Anfossi et al., 2005b). Esta nova parametrização é descrita em termos dos valores de  $m$  e  $T$ , onde  $m$  é uma quantidade adimensional que controla a frequência de oscilação do meandro e  $T$  é a escala de tempo associada aos turbilhões que compõem uma turbulência bem desenvolvida. Esse conjunto de equações de Langevin para as componentes horizontais do vento tem sido testado recentemente por Anfossi et al. (2006). Eles utilizaram valores de  $p$  e  $q$  extraídos diretamente dos experimentos, enquanto aqui será apresentado uma nova parametrização para essas variáveis físicas.

Este trabalho está estruturado em cinco capítulos: no Capítulo 2 apresentaremos uma descrição geral da parte mais baixa da atmosfera, da qual é apresentada uma breve revisão das condições de estabilidade atmosférica e dos modelos de dispersão. No capítulo seguinte é feita uma descrição do modelo de dispersão estocástico Lagrangeano seguindo o esquema proposto por Thomson (1987) para a difusão na camada atmosférica planetária e, ainda, é apresentado um novo sistema de equações para as componentes longitudinais da equação de Langevin dado por Anfossi et al. (2005b) para a dispersão em condições de vento fraco. No Capítulo 4 são apresentadas as simulações dos modelos de partículas estocásticas

Lagrangeanos para os três conjuntos de experimentos propostos nesta dissertação para as diferentes condições de estabilidade, bem como os dados de concentração obtidos através das simulações e a aplicação dos índices estatísticos sobre os valores simulados, juntamente com os resultados obtidos. No Capítulo 5 são realizadas as conclusões e sugestões de trabalhos futuros.

## Capítulo 2

# DISPERSÃO ATMOSFÉRICA

### 2.1 Camada Limite Planetária

A atmosfera terrestre é um dos locais utilizados por diferentes tipos de fontes industriais para lançar seus resíduos. Assim, o conhecimento das condições meteorológicas locais e dos fenômenos que regem a atmosfera torna-se indispensáveis na adoção de medidas para diminuir a poluição.

A troposfera é a camada mais baixa da atmosfera, a qual é caracterizada por apresentar uma diminuição da temperatura com a altura, podendo atingir cerca de 11 km. A troposfera pode ser dividida em duas partes, sendo a parte mais baixa chamada de Camada Limite Planetária (CLP), e a parte restante de atmosfera livre.

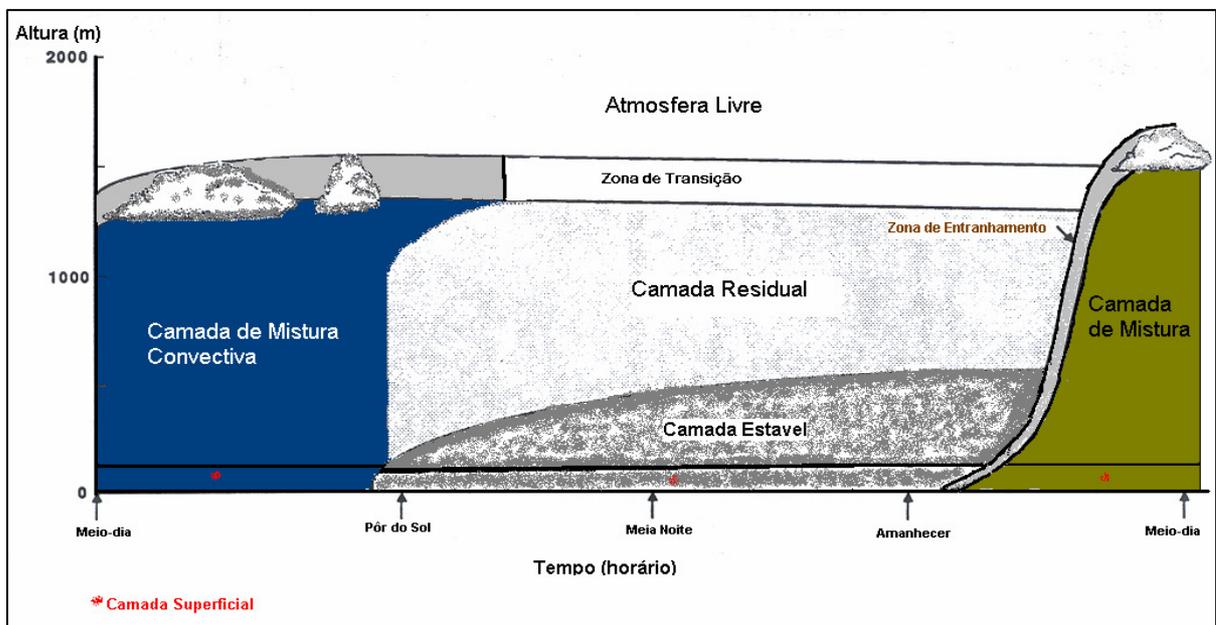
A CLP é definida como a região da atmosfera que sofre influências diretas da superfície e responde a forçantes superficiais com uma escala de tempo de aproximadamente uma hora ou menos (Stull, 1988). A espessura dessa camada é muito variável podendo atingir desde algumas centenas de metros a poucos quilômetros. Como a CLP está em contato com a superfície nela se encontram a maior parte das fontes naturais e antropogênicas, sendo, portanto, onde os poluentes lançados sofrem as primeiras transformações ao serem transportados pelo vento e pela turbulência.

A turbulência na CLP é fortemente influenciada pelo ciclo diurno de aquecimento e resfriamento da superfície, que absorve 90% da radiação incidente. O processo de aquecimento da CLP ocorre por transferência turbulenta, que é um dos mais importantes processos de transporte e é usado muitas vezes para definir a camada limite (Stull, 1988).

A evolução da CLP é controlada pelo transporte turbulento induzido pela diferença de temperatura entre a atmosfera e a superfície da Terra (produção térmica) e pelos ventos nos níveis baixos (produção mecânica). Ela desenvolve importante papel na dinâmica da atmosfera, já que muitos processos de trocas entre a atmosfera e o solo e processos de dissipação de energia ocorrem dentro dela.

Na CLP o transporte de espécies escalares é controlado na horizontal pelo efeito advectivo, que é realizado pelo vento médio, e na vertical pelo mecanismo associado ao processo de difusão turbulenta. A turbulência é constituída por vórtices de diferentes tamanhos, os quais se sobrepõem, e a soma das contribuições de todos esses turbilhões constitui o espectro de energia turbulenta.

A CLP, em um período de 24 horas, pode ser classificada quanto aos seus forçantes em Camada Limite Convectiva (CLC), Camada Residual (CR) e Camada Limite Estável (CLE), como podem ser visto na Figura 2.1.



**Figura 2.1** – Estrutura da CLP. Fonte: adaptada de Stull, 1988.

Na Camada Limite Convectiva (CLC), a turbulência é gerada pelo fluxo de calor da Terra para a atmosfera, e pelos campos de ventos constantes. Nas primeiras horas da manhã, os turbilhões convectivos que surgem devido ao aquecimento do solo, preenchem todo o espaço vertical, até a altura da camada de inversão. O fluxo de calor sensível é positivo, pois a radiação solar aquece a superfície da Terra antes de aquecer a atmosfera, logo o aquecimento da superfície gera as termas, que são massas de ar quente que se elevam a partir do solo, enquanto o resfriamento gera as chamadas termas de ar frio, que descem do topo em direção à superfície. Ambas podem ocorrer simultaneamente (Stull, 1988). A CLC é dividida ainda em três camadas (Deardorff, 1979), sendo elas: superficial, de mistura e interfacial.

A Camada Superficial (CS) é a região da CLP onde os fluxos turbulentos variam menos de 10% de sua magnitude (Stull, 1988). Esta camada compreende cerca de 10% da CLC e é caracterizada pela existência de intensa turbulência e pelo fato dos fluxos turbulentos serem aproximadamente constantes com a altura. Além disso, a CS também é caracterizada por intenso gradiente vertical de temperatura.

A Camada de Mistura (CM), localizada logo acima da CS, estende-se aproximadamente até uma base de inversão térmica, que funciona como um “tampão”. Esta camada surge em situações de forte aquecimento sobre a Terra, quando se instala uma convecção intensa, logo forma-se uma camada bastante homogênea através da qual a temperatura potencial e o vento praticamente não variam.

A Camada Interfacial ou de Entranhamento, localizada no topo da CLP, é a camada onde ocorrem as trocas de calor e quantidade de movimento com a atmosfera livre, ou seja, onde os efeitos do solo, como atrito e aquecimento, são desprezados. O limite superior desta camada não é bem definido, dependendo da penetração dos vórtices turbulentos na atmosfera livre.

Aproximadamente meia hora antes do pôr-do-sol, com a diminuição da turbulência térmica, o ar próximo a superfície começa a se resfriar, diminuindo a produção térmica e em compensação aumentando a produção mecânica. A camada de ar resultante é denominada Camada Residual (CR) porque inicialmente as variáveis meteorológicas e de concentração são as mesmas da CLC recentemente existente. A CR não tem contato direto com a superfície terrestre, porém tem sua base modificada pelo avanço da CLE durante o decorrer da noite (Stull, 1988).

A Camada Limite Estável (CLE) ou Noturna (CLN) surge durante a noite, sendo fortemente influenciada pela taxa de resfriamento radioativo e pela taxa de advecção da turbulência mecânica. O fluxo vertical de calor muda de sinal (deixa de ser positivo) e a superfície terrestre começa a resfriar-se por perda de radiação. Desta forma, a atmosfera é que passa a ceder calor sensível para a superfície terrestre. Com isso, a turbulência começa a decair e passa a ser dominada por pequenos turbilhões isotrópicos, que extraem energia cinética dos turbilhões de grande comprimento de onda, resultando em uma estrutura turbulenta estável estratificada, a qual é fortemente influenciada pela taxa de resfriamento radioativo e pela taxa de advecção da turbulência mecânica. Poluentes emitidos por uma fonte dentro da CLE se dispersam mais rapidamente na direção horizontal do que na direção vertical (Stull, 1988). Quanto mais desenvolvida estiver a CLE, maior será a sua profundidade, e, portanto, menor será a espessura da CR.

## 2.2 Modelos matemáticos da dispersão de poluentes

Os modelos matemáticos que descrevem as propriedades da atmosfera e os seus efeitos sobre os poluentes são denominados de modelos de dispersão, e representam uma importante ferramenta de investigação dos transportes de poluentes na atmosfera. Na literatura, existem inúmeros modelos matemáticos de difusão de poluentes na atmosfera, notavelmente diferentes uns dos outros, sendo que a principal subdivisão, de um ponto de vista físico, é feita entre modelos Eulerianos e Lagrangeanos.

➤ Eulerianos: o sistema de coordenadas é fixo no espaço. As propriedades do fluido como densidade, temperatura e velocidade são calculadas em um ponto  $(x, y, z)$  fixo no espaço num dado tempo  $t$ .

➤ Lagrangeanos: o sistema de coordenadas é baseado na posição  $(x, y, z)$  de uma partícula em um tempo  $t$ , relativo à sua posição  $(x_o, y_o, z_o)$  em um tempo de referência  $t_o$ .

Em outras palavras, na aproximação Euleriana o sistema de referência é fixo em relação à terra, enquanto na Lagrangeana o sistema de referência segue o movimento das parcelas de ar ou partículas de poluentes.

Nos modelos Eulerianos a concentração do poluente em um determinado ponto do espaço e no tempo é representada através do valor da concentração dos elementos de fluido que está ocupando a posição do espaço no instante em questão, sem levar em conta a sua origem. Assim, no caso Euleriano, a taxa de variação temporal da concentração do poluente é representada pela taxa de variação temporal (local) da concentração do poluente.

Nos modelos Lagrangeanos cada elemento que compõe o escoamento é identificado através da sua posição no instante inicial e a evolução temporal e espacial da concentração do poluente é obtida através da determinação da trajetória de cada elemento de fluido que compõe o escoamento. As partículas movem-se aleatoriamente seguindo os vórtices turbulentos.

Além disso, dentro dos modelos Eulerianos existe outra categoria que são os modelos Gaussianos. Estes consideram que a concentração do poluente assume uma distribuição normal, com pico de concentração ao longo da linha de centro da pluma, uma dispersão  $\sigma_y$  na direção horizontal e  $\sigma_z$  na direção vertical. Os modelos Gaussianos são baseados em uma fórmula simples que descreve um campo de concentração tridimensional gerado por uma fonte pontual elevada sob condições meteorológicas constantes. As condições de emissão

também são consideradas como sendo constantes neste tipo de modelo (Moreira e Tirabassi, 2004). As várias versões dos modelos Gaussianos se diferenciam essencialmente pela técnica utilizada para calcular o desvio padrão em função da estabilidade atmosférica e da distância da fonte emissora.

Na seção seguinte será apresentada uma breve introdução sobre os modelos Lagrangeanos, sendo este o assunto principal desta dissertação.

### 2.2.1 Modelos Lagrangeanos

Na aproximação Lagrangeana o movimento de um conjunto de partículas que seguem passivamente o escoamento é descrito. Estas partículas movem-se seguindo os vórtices turbulentos, descrevendo trajetórias aleatórias. A equação fundamental para a evolução espacial e temporal da concentração média de um contaminante em uma parcela de fluido,  $C(\vec{x}, t)$ , pode ser escrita como:

$$C(\vec{x}, t) = \int_0^t \int P(\vec{x}, t | \vec{x}_o, t_o) S(\vec{x}_o, t_o) d\vec{x}_o dt_o \quad (2.1)$$

onde  $C(\vec{x}, t)$  é a concentração média em  $\vec{x}$  no tempo  $t$ ,  $S(\vec{x}_o, t_o)$  é o termo de fonte (massa do poluente por unidade de volume e por unidade de tempo) e  $P(\vec{x}, t | \vec{x}_o, t_o)$  é a função densidade de probabilidade da parcela de fluido que está na posição  $\vec{x}_o$  no instante  $t_o$  vir a ocupar  $\vec{x}$  no instante  $t$ .

O parâmetro chave na equação acima é a função densidade de probabilidade (FDP)  $P(\vec{x}, t | \vec{x}_o, t_o)$ . A FDP pode ser estimada numericamente, mediante a determinação da trajetória de um conjunto suficientemente grande de partículas contidas no escoamento (Zannetti, 1990; Baldochi, 1992). A eq. (2.1) representa uma descrição rigorosa dos processos de transporte e difusão expressa em uma notação probabilística. Uma forma de se estimar a trajetória das partículas em um escoamento turbulento é utilizando um modelo de partículas Lagrangeano ou modelo estocástico Lagrangeano.

## 2.2.2 Modelos Estocásticos Lagrangeanos

Os modelos de dispersão estocásticos Lagrangeanos representam uma das ferramentas computacionais mais recente e poderosa para a discretização numérica de um sistema físico (Zannetti, 1990). Estes modelos são baseados na equação de Langevin (Wilson e Sawford, 1996; van Dop, 1995), na qual o movimento das partículas em um escoamento turbulento é descrito de forma análoga ao movimento browniano, permitindo tratar a aceleração sofrida pela partícula, em um escoamento turbulento, como a soma das acelerações do tipo determinística e aleatória. Os modelos de partículas usam um certo número de partículas computacionais (fictícias) para simular a dinâmica de um parâmetro físico selecionado. Estas partículas fictícias permitem compreender os processos físicos que atuam nas partículas reais.

Como descrito acima, os modelos estocásticos Lagrangeanos são baseados na equação de Langevin. A velocidade e a posição de cada partícula, em cada passo no tempo, são obtidas integrando-se numericamente as seguintes equações:

$$\frac{du_i}{dt} = -\alpha u_i + \beta \quad (2.2a)$$

e

$$\frac{dx_i}{dt} = U_i + u_i, \quad (2.2b)$$

onde  $i = 1, 2, 3$ ,  $x_i$  representa a posição das partículas,  $U_i$  é a velocidade média do vento,  $u_i$  é a flutuação da velocidade devido à turbulência e  $\alpha$  e  $\beta$  são os coeficientes de transporte e de difusão. O primeiro termo do lado direito da eq. (2.2a) é o termo determinístico, o qual representa a força de fricção exercida pelo escoamento das partículas, enquanto o segundo termo é o estocástico, o qual representa as acelerações aleatórias ocasionadas pelas flutuações de pressão sobre as partículas. Nestes modelos, duas quantidades físicas são importantes para o desempenho numérico das simulações de dispersão de poluentes: a variância da velocidade  $\sigma^2$  e a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana  $\tau_L$  ou a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta  $\varepsilon$  e a constante de Kolmogorov  $C_o$ .

Os modelos estocásticos Lagrangeanos são capazes de descrever a dispersão de poluentes na CLP levando em conta as propriedades estatísticas do escoamento. Por exemplo, na CLP convectiva as características da turbulência refletem sua origem térmica. Nessa condição, fortes correntes térmicas ascendentes (*updrafts*) ocupam aproximadamente 40% da

área horizontal da CLP, enquanto as correntes descendentes (*downdrafts*), mais fracas, ocupam cerca de 60%. Isso resulta em uma distribuição de probabilidade de velocidade vertical assimétrica. Logo, um contaminante (liberado sem empuxo), emitido continuamente de uma fonte elevada, tem maior probabilidade de ser levado diretamente à superfície. No caso de uma fonte próxima à superfície, o poluente tem uma maior probabilidade de ser transportado para cima. Na CLP neutra ou estável os turbilhões são menores e a velocidade vertical tem uma distribuição de probabilidade Gaussiana.

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

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

### **2.3 Estudos da dispersão com modelos Lagrangeanos**

Muitos trabalhos na abordagem estocástica do processo de difusão em um fluido começaram no início do século XX por Einstein (1905 apud Pereira et al., 2001), Langevin (1908 apud Pereira et al., 2001) e outros. Einstein publicou a primeira explicação satisfatória do movimento Browniano considerando-o como um processo de caminho aleatório. Langevin introduziu a abordagem estocástica Lagrangeana considerando o movimento browniano como resultante da ação de forças aleatórias e de arraste sobre um conjunto de partículas imersas em um fluido em repouso. Taylor (1921) foi o primeiro a aplicar a abordagem estatística Lagrangeana para a dispersão turbulenta. Obukhov (1959) propôs uma descrição da evolução da posição e da velocidade de uma partícula através das respectivas funções densidade de

probabilidade (FDP) descritas pela equação de Fokker-Planck. A partir da década de 70, considerável progresso foi feito na teoria e nas aplicações de modelos estocásticos Lagrangeanos para descrever a dispersão de poluentes na atmosfera. A seguir é apresentada uma breve revisão de alguns importantes trabalhos disponíveis na literatura.

Lamb (1978) desenvolveu um modelo numérico que utilizava a equação da difusão Lagrangeana para simular a dispersão de partículas não flutuantes liberadas, sem empuxo, a partir de uma fonte pontual elevada. Ele utilizou dados quantitativos fornecidos pelo modelo numérico de Deardorff (1974) para a turbulência na Camada Limite Convectiva (CLC).

Thomson (1987) comparou os vários critérios existentes para selecionar o caminho para modelar a difusão de escalares em um fluxo turbulento usando uma forma generalizada e não-linear da equação estocástica de Langevin para a velocidade da partícula. O principal critério é a condição de boa mistura ou *well-mixed*, se a distribuição das partículas de um contaminante é inicialmente uniforme, em um escoamento turbulento, permanecerá desta maneira. No entanto, a aproximação de Thomson (1987) não apresentava uma única solução para os escoamentos bidimensionais e tridimensionais.

Um modelo estatístico Lagrangeano (Monte Carlo) para a dispersão de poluentes foi apresentado por Brusasca et al. (1989). Neste tipo de modelo (também conhecido como modelo de partículas ou modelo de caminho aleatório) a difusão da pluma é simulada segundo uma estrutura Lagrangeana usando as trajetórias de um grande número de partículas cujo movimento é assumido de acordo com as estatísticas do vento Euleriano. No trabalho proposto pelos autores, o modelo, originalmente desenvolvido por Zannetti (1984), foi usado para simular a dispersão na atmosfera real na CLP, ou seja, nos casos de turbulência não-homogênea e estacionária. As variâncias da velocidade do vento  $\sigma_i^2$  e escalas de tempo Lagrangeana  $\tau_{Li}$  foram utilizadas de acordo com Hanna (1982), já que eram funções da altura. Os resultados numéricos obtidos foram verificados com os dados experimentais para os experimentos traçantes de Karlsruhe Nuclear Research Center (KNRC) (Thomas et al., 1983). O modelo foi aplicado ao problema de previsão da concentração ao nível do solo de dois diferentes traçantes liberados simultaneamente de duas alturas (160 e 195 m). Prevaleceram condições instáveis e neutras durante os dois experimentos simulados. Os resultados obtidos para a concentração ao nível do solo foram comparados com simulações anteriores não Lagrangeanas. Das comparações a simulação de Brusasca et al. (1989) forneceu melhor desempenho.

Ferrero et al. (1995) desenvolveram um modelo de partículas Lagrangeano tridimensional para a dispersão em terreno plano denominado LAMBDA. O modelo LAMBDA é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin. Neste modelo características importantes do fluxo e campos turbulentos (tais como os perfis verticais da velocidade e direção do vento, desvios padrões e momentos de ordem mais alta da flutuação da velocidade do vento) podem ser incluídas, gerando simulações mais precisas sem consumir um tempo computacional excessivo. Os conjuntos de dados dos experimentos de Copenhagen (Gryning and Lyck, 1984) e Lillestrøm (Cuvelier, 1994) foram utilizados para testar o desempenho do modelo proposto. No experimento de Copenhagen condições de estabilidade neutra foram assumidas em todas as simulações, ainda que, em alguns casos, o valor do comprimento de Monin-Obukhov pareça corresponder a condições instáveis. Velocidades do vento a 10 e 115 m foram usadas para calcular o coeficiente para o perfil vertical do vento. Os perfis verticais dos desvios padrões do vento foram calculados de acordo com a parametrização de Hanna (1982), assim como as escalas de tempo Lagrangeanas. Já no segundo conjunto de dados considerados, o de Lillestrøm, condições estáveis ocorreram em todos os experimentos. Como no experimento anterior, foram usadas velocidades do vento a 10 e 36 m para calcular o coeficiente para o perfil vertical da velocidade e a parametrização de Hanna (1982) para obter os perfis verticais dos desvios padrões da velocidade do vento e das escalas de tempo Lagrangeanas. Os resultados das simulações foram comparados com os conjuntos de dados de Copenhagen e Lillestrøm demonstrando que o modelo LAMBDA produz resultados razoavelmente precisos. Nesta dissertação usaremos este modelo para testar parametrizações da turbulência em diferentes condições de estabilidade. A seguir faremos uma breve revisão de algumas parametrizações da turbulência aplicada a modelos de dispersão Lagrangeanos.

### **2.3.1 Revisão de parametrizações da turbulência**

Ferrero e Anfossi (1998a) utilizaram seis modelos unidimensionais baseados na equação estatística resolvida pelo método de Ito. Quatro destes levaram em conta o momento de quarta ordem das flutuações da velocidade vertical, enquanto dois a terceira ordem do momento. Quatro modelos fizeram uso de uma FDP bi-Gaussiana e outros dois foram baseados em uma expansão em série Gram-Chalier truncada para a terceira e quarta ordem.

Com relação ao momento de quarta ordem duas diferentes parametrizações foram utilizadas. Assim, o objetivo do estudo foi encontrar os modelos que fornecem maior confiabilidade na aplicação em estudos de dispersão e verificar a importância de considerar o momento de quarta ordem. Sendo que, os modelos testados por eles referem-se à turbulência não-homogênea e pode ser aplicado em qualquer condição de estabilidade. O desempenho dos modelos considerados foi comparado com os valores de concentração obtidos por Willis e Deardorff (1976, 1978 e 1981) no experimento de tanque de água na CLC. As principais conclusões encontradas por eles foram: os resultados das simulações dependem fortemente da parametrização da turbulência escolhida; a FDP Gram-Chalier forneceu a melhor concordância com as observações; algumas combinações de modelos e parametrizações da turbulência desenvolvem bem a forma da concentração ao nível do solo, mas reprovam em simular corretamente a forma da pluma; no caso da FDP Gram-Chalier, o momento de quarta ordem reproduz a largura da pluma vertical melhor que o de terceira ordem, onde os dois esquemas produzem distribuições de concentrações ao nível do solo simuladas.

Durante anos, muitos modelos de dispersão estocásticos Lagrangeanos, baseados em Thomson (1987), foram desenvolvidos e testados com sucesso (Luhar e Britter, 1989; Weil, 1990; Rotach et al., 1996; Ferrero e Anfossi, 1997). Porém, um novo método para derivar as escalas de tempo de decorrelação Lagrangeanas ( $\tau_{Li}$ ) para a turbulência não-homogênea e a função estrutura da velocidade Lagrangeana ( $C_o$ ), importantes parâmetros de entrada nos modelos estocásticos Lagrangeanos, foi proposto por Degrazia et al. (1998). A parametrização proposta foi derivada a partir de propriedades espectrais e da teoria da difusão estatística de Taylor. A expressão para as escalas de tempo, derivada para a CLC, foi comparada aos estimados por Hanna (1981), produzindo boa concordância. Os valores da constante de Kolmogorov  $C_o$  e da constante do espectro de velocidade Lagrangeana  $B_i$  (teste adicional do modelo) foram avaliados para os espectros de velocidade Euleriana sob condições instáveis, juntos com as estimativas das escalas de tempo Lagrangeanas. A comparação entre os parâmetros Lagrangeanos e Eulerianos produziram valores que se encontram dentro da faixa de  $C_o$  selecionada para a CLC, de acordo com Rotach et al. (1996).

Franzese et al. (1999) consideraram o caso unidimensional da dispersão vertical na CLC assumindo que o campo turbulento é estacionário e homogêneo horizontalmente. Também assumiram que a evolução da velocidade e da posição de cada partícula é um processo de Markov, governado por uma equação diferencial estocástica. Eles propuseram uma parametrização simples para o termo da aceleração determinística aproximando-a como

uma função quadrática da velocidade. Cada uma das funções demonstrou representar a aceleração sob condições de velocidade moderada observada na CLC. Os coeficientes para a aceleração foram determinados em termos da estatística da turbulência dada pela integração direta da equação de Fokker-Planck. A vantagem desta aproximação foi que, diferente dos modelos estocásticos Lagrangeanos existentes para a CLC, o uso da estatística da turbulência de quarta ordem foi feita sem assumir nenhuma forma pré-definida para a FDP da velocidade. Os resultados de dispersão obtidos para o novo modelo foram comparados com dados de laboratório existentes e, ainda, com dados obtidos para um modelo Lagrangeano mais complexo baseado na FDP da velocidade bi-Gaussiana, demonstrando que o novo modelo desempenha bem a meta proposta.

Carvalho et al. (2002) utilizaram o modelo de partículas Lagrangeano LAMBDA (Ferrero et al., 1995; Ferrero e Anfossi, 1998 a, b) para estudar o transporte e a difusão de poluentes liberados em dois experimentos: Prairie Grass (Barad, 1958) e Copenhagen (Gryning e Lyck, 1984). Sendo que o principal objetivo deles foi testar uma nova parametrização que possa ser empregada para descrever o transporte turbulento de contaminantes liberados simultaneamente por fontes baixa e alta. No modelo LAMBDA, a parametrização da turbulência desenvolvida por Degrazia et al. (2000) foi considerada, a qual foi derivada a partir da teoria da difusão estatística de Taylor e de propriedades espectrais observadas. Esta parametrização da turbulência gera valores contínuos em todas as elevações e em todas as condições de estabilidade na CLP. Os resultados demonstraram que o modelo de partículas estocástico Lagrangeano LAMBDA, com a parametrização da turbulência proposta, produz uma boa concordância das medidas de concentração ao nível do solo integrado lateralmente.

A equação de Langevin foi o primeiro exemplo de uma equação diferencial estocástica e é normalmente integrada de acordo com as regras do cálculo de Ito (Rodean, 1996). Algumas soluções especiais para a equação de Langevin foram apresentadas por Gardiner (1985) e Rodean (1996). Nesse sentido, Carvalho et al. (2005) apresentaram um método numérico alternativo para resolver a equação de Langevin aplicada a dispersão de poluentes em condições de turbulência não-homogênea. O modelo proposto por eles conduz a uma equação diferencial de primeira ordem, cuja solução é bem conhecida e determinada por um fator de integração. O esquema foi aplicado na equação de Langevin considerando a FDP Gram-Chalier da velocidade turbulenta e o processo de cálculo foi baseado em um esquema iterativo através do Método Iterativo de Picard. O Método Iterativo de Picard ou Método das Sucessivas Aproximações é um processo numérico que pode aproximar a solução de um valor

do problema inicial. O método gera uma sequência de funções através de uma fórmula recorrente, que converge para uma solução do valor de problema inicial. Simulações numéricas e comparações com dados de medida dos experimentos de Copenhagen (Gryning e Lyck, 1984) e Prairie Grass (Barad, 1958) foram realizadas demonstrando uma boa concordância entre valores observados e previstos.

O parâmetro de dispersão lateral  $\sigma_y$  é uma quantidade estatística de grande interesse tanto para os modelos de dispersão quanto para a derivação das relações fundamentais associadas ao estudo da turbulência. Deste modo, uma formulação alternativa para a taxa de dissipação turbulenta  $\varepsilon$  foi apresentada por Degrazia et al. (2005). O desenvolvimento desta consistiu de uma expansão binomial de uma relação algébrica para o parâmetro de dispersão lateral  $\sigma_y$ , originada da concordância dos dados experimentais. A nova formulação permaneceu com a premissa física contida na formulação clássica, comumente usada, mas o coeficiente numérico aumentou por um fator de 50%. A nova expressão gerou valores para a taxa de dissipação que demonstraram uma boa concordância com aqueles previamente determinados na CLC. Além disso, foi realizada uma comparação estatística com os dados de concentração do experimento de Copenhagen (Gryning e Lyck, 1984). A partir da comparação foi demonstrado que a relação alternativa para a taxa de dissipação é aceitável em aplicações com modelos de dispersão estocásticos Lagrangeanos. Também foi obtido por Degrazia et al. (2005) uma nova forma para a função de autocorrelação. Os procedimentos que originaram a nova e a clássica formulação foram similares, somente começando de uma diferente expressão para  $\sigma_y$ . Portanto, eles demonstraram que não existe uma forma universal da taxa de dissipação, bem como uma forma exponencial da função de autocorrelação.

#### **2.4 Estudos da dispersão sob condições de vento fraco**

Condições de vento fraco são observadas na maior parte do planeta e ocorrem principalmente durante a noite, quando a CLP está estável. A Camada Limite Estável (CLE) é um dos maiores desafios para as ciências atmosféricas e para a dispersão de poluentes. O estudo da turbulência na CLE e da dispersão atmosférica sob condições de vento fraco é considerado o mais difícil a ser enfrentado. Portanto, a seguir será feita uma breve revisão

sobre alguns estudos existentes na literatura referentes à dispersão de poluentes em condições estáveis com a presença de vento fraco.

Devido à falha da similaridade na camada superficial para descrever os efeitos quando a magnitude da velocidade do vento é muito baixa (Stull, 1988), permanece a desafiante tarefa para desenvolver modelos de dispersão que leve em consideração os fluxos de meandro. Sagendorf e Dickson (1974) descreveram uma série de 14 testes de difusão conduzidos sob condições estáveis com vento fraco sobre terreno plano. Eles utilizaram a equação da pluma Gaussiana para simular os resultados obtidos para velocidades do vento baixo e condições de inversões através de esquemas tais como padrão, *split sigma* e pluma segmentada. Os melhores resultados foram obtidos para o método da pluma segmentada que usa uma relação de regressão desenvolvida anteriormente para o mesmo sítio. No entanto, o fato da difusão na direção do vento ser ignorada na equação de pluma Gaussiana, torna-se uma desvantagem no contexto de vento fraco.

Um modelo de partículas Lagrangeano, previamente desenvolvido e aplicado em simulações de dispersão atmosférica em condições convectivas e neutra com a presença de vento forte, foi modificado por Brusasca et al. (1992) para tratar com condições de velocidade do vento fraco. O desempenho do modelo foi avaliado a partir de comparações de três experimentos traçantes realizados durante condições de velocidade do vento fraco pelo Idaho National Engineering Laboratory em 1974. Os experimentos apresentaram a dispersão da pluma em três diferentes ângulos (48, 138 e 360°, respectivamente, em um arco localizado a 200m a partir da fonte de emissão). Os resultados da comparação das distribuições de concentrações ao nível do solo mostraram um bom grau de confiança. Anfossi et al. (1990) também compararam os resultados obtidos a partir de um modelo de partículas Lagrangeano com os observados pelo Idaho National Engineering Laboratory (INEL) (Sagendorf e Dickson, 1974). Eles demonstraram que o modelo de partículas fornece previsões razoáveis em condições estáveis com vento fraco.

Os coeficientes de difusão, proporcionais a  $\sigma$  e  $\tau_L$ , são parâmetros chaves na maioria dos modelos de qualidade de ar e o uso destes em condições de velocidade do vento fraco envolve alguns graus de incerteza. Funções que obedecem as leis de potências são os métodos mais comumente usados em que os coeficientes de dispersão da pluma são expressos em termos da distância a partir da fonte de emissão e da estabilidade atmosférica. Contudo, os métodos convencionais para a estimação dos parâmetros de dispersão da pluma são menos adequados para a aplicação sob velocidades do vento fraco e condições estáveis. Os coeficientes de dispersão comumente usados têm sido obtidos empiricamente de dados de

difusão de traçantes coletados, na maioria das vezes, sob condições que não incluem ventos fracos e estabilidade estável. Assim, a aplicação de métodos tradicionais tais como a fórmula da pluma Gaussiana com o método usual para a estimação dos parâmetros de dispersão ( $\sigma$ 's) resulta em exagerada superestimação (Kristensen, 1981).

Neste sentido, Sharan et al. (1995) fizeram várias estimativas dos parâmetros de dispersão, incorporados com dados de dispersão representando situações de vento fraco e condições estáveis, tais como: padrão, *split sigma*, *split sigma theta*, pluma segmentada (I) e (II), *short-term averaging* e aproximação de  $U_{\min}$ . A forma da pluma utilizada para esta proposta foi obtida pela resolução da equação da difusão-advecção incluindo o termo de difusão na direção do vento que é ignorado na equação da pluma Gaussiana tradicional. As comparações entre os valores de concentração observados e simulados demonstraram que o esquema pluma segmentada (II) forneceu os melhores resultados em todos os casos. O esquema *short-term averaging* também forneceu bons resultados, mesmo na ausência dos valores de  $\sigma_{\theta}$ , enquanto o esquema padrão, baseado nas observações de rotina, superestimou os picos de concentração e subestimou a dispersão da pluma. Ainda, o esquema *split sigma theta* desempenhou bem os resultados em termos dos picos de concentração e a dispersão lateral requer valores horários de  $\sigma_{\theta}$ .

A suposição de coeficientes de difusão constantes parece ser razoável para grandes distâncias da fonte e torna-se questionável para descrever dispersão próxima da fonte (Taylor, 1921; 1959; Batchelor, 1949; Csanady, 1973). Arya (1995) sugeriu uma simples parametrização do coeficiente de difusão baseado na teoria estatística de Taylor (1921) e em relações de similaridade para usar no modelo teoria-K variável (transporte-gradiente). Ele argumentou que para pequenos tempos de viagem da pluma (isto é, pequenas distâncias com relação à fonte) a difusividade pode ser expressa como uma função linear da distância a partir da fonte e as constantes de proporcionalidade representam os parâmetros turbulentos.

Sharan et al. (1996a) investigaram a dispersão em situações de vento fraco. Eles obtiveram uma solução analítica da equação da difusão com coeficientes variando linearmente com a distância a partir da fonte. Eles resolveram a forma de estado da equação da difusão-advecção (incluindo o termo de difusão na direção do vento) para uma fonte pontual contínua localizada próximo à superfície da terra. Os resultados calculados para os modelos foram encontrados ser consistentemente baixos comparados aos observados nas condições convectivas. No entanto, Sharan et al. (1996b) obtiveram uma solução analítica da equação da difusão assumindo coeficientes de difusão constantes na equação da difusão-advecção, sendo

que a solução se reduziu a uma forma familiar que é a solução padrão do modelo de pluma Gaussiana. Ambos os modelos, com suas respectivas suposições, foram avaliados com dados coletados do experimento conduzido pelo Indian Institute of Technology (IIT), Delhi (Singh et al., 1991).

Uma solução analítica da equação da difusão-advecção tridimensional, incluindo a difusão longitudinal e coeficientes de difusão variáveis, para a dispersão de poluentes foi sugerida por Sharan e Yadav (1998). Os coeficientes de difusão foram parametrizados em termos da distância a partir da fonte de emissão. As previsões do modelo com duas diferentes parametrizações ( $u_*$  e  $\sigma_\theta$ ) dos parâmetros turbulentos e duas diferentes aproximações (horárias e pluma segmentada) foram comparadas com as observações e previsões de soluções de difusividade constante (incluindo a solução da pluma Gaussiana padrão), utilizando os dados de dispersão coletados pelo Idaho National Engineering Laboratory (INEL). Os melhores resultados foram obtidos pela aproximação da pluma segmentada com a parametrização de  $\sigma_\theta$  nos parâmetros turbulentos. Este método utiliza medidas das flutuações do vento turbulento (em termos de  $\sigma_\theta$ ) e uma grande variação na direção do vento com baixa frequência. Os resultados obtidos a partir da parametrização de  $u_*$  nos parâmetros turbulentos não foram satisfatórios devido à estimativa de  $u_*$  ser grosseira e indireta. Ainda, os resultados baseados na análise estatística dos picos e distribuição de concentração demonstraram que o modelo proposto forneceu o melhor desempenho usando a parametrização  $\sigma_\theta$  e o método da pluma segmentada.

Oettl et al. (2001) fizeram observações em um anemômetro sônico 10m acima do nível do solo por um período de 1 ano. A partir destes dados, funções de autocorrelação Euleriana foram calculadas para as flutuações da velocidade do vento horizontal e vertical sob condições de vento fraco. Embora a função de autocorrelação para a componente vertical da velocidade tenha exibido uma forma exponencial, a função para as componentes horizontais da velocidade do vento demonstram um *loop* negativo para todas as condições de estabilidade que apresentaram uma magnitude do vento baixa. Um modelo de dispersão Lagrangeano com passos no tempo aleatórios foi usado para estimar a difusão em condições estáveis com velocidades do vento fraco. Eles assumiram a forma da função de autocorrelação Lagrangeana similar a função de autocorrelação Euleriana calculada a partir das observações feitas no anemômetro sônico. Nos modelos de partículas Lagrangeanos, esse efeito é considerado usando um parâmetro de intercorrelação negativo  $\rho_{u,v}$  e passos no tempo aleatórios para as

flutuações da velocidade. O modelo foi testado com os dados obtidos pelo Idaho National Engineering Laboratory (INEL) (Sagendorf e Dickson, 1974) durante condições estáveis com velocidades do vento fraco e comparado com resultados obtidos por outros modelos. Foi encontrada boa concordância entre os valores de concentrações simulados e observados e comparando-os a outros modelos apresentou resultados ainda melhores em alguns casos.

A fim de estudar as características da turbulência e do vento durante a presença de meandro, dois conjuntos de dados de anemômetro sônico, contendo observações de hora em hora, foram analisados por Anfossi et al. (2005a). O primeiro foi coletado durante 1 ano em Graz na Austrália e foi representativo de terreno complexo, enquanto o segundo contém 27 dias de medidas em uma área bastante plana em Tisby na Suécia. Os principais resultados encontrados por eles foram: movimentos de mesoescala parecem existir sob todas as condições meteorológicas sem levar em conta a estabilidade ou velocidade do vento; quando a velocidade do vento decresce abaixo de um certo valor crítico não é possível definir uma direção precisa para a direção do vento médio; outro peculiar e interessante resultado é que o fenômeno de meandro induz uma importante modificação da função de autocorrelação para as componentes do vento horizontal que exibem um comportamento oscilatório e grandes lobes negativos, tendo um forte efeito sobre modelos de dispersão, especialmente na vizinhança imediata da fonte. Além disso, duas relações, uma obtida por Csanady (1973) e outra por Frenkiel (1953), que levam em conta o aspecto oscilatório das funções de autocorrelação Euleriana foram fitados a partir dos dados. Sendo que estas contêm dois parâmetros: um associado à escala de tempo integral clássica para uma turbulência bem desenvolvida e o segundo associado ao comportamento oscilatório devido ao fenômeno de meandro.

Velocidades do vento fraco são frequentemente associadas com altas concentrações de poluentes na atmosfera próximo de fontes. Atualmente, nenhuma teoria conclusiva está disponível para explicar o fenômeno de meandro encontrado sob diferentes estabilidades, condições meteorológicas e localizações (Oettl et al., 2005). Nessa direção, Oettl et al. (2005) propuseram investigar os processos físicos responsáveis pelo efeito de meandro e derivaram uma expressão para a função de autocorrelação Euleriana a partir das equações básicas de conservação de momentum. A principal motivação veio do trabalho desenvolvido por Anfossi et al. (2005b), os quais encontraram que o fenômeno de meandro induz a uma importante modificação da função de autocorrelação Euleriana das componentes do vento horizontal que exibem um comportamento oscilatório e grandes lobes negativos. Segundo Oettl et al. (2005) estes lobes observados nas funções de autocorrelação são um fenômeno relacionado à estrutura das equações de Navier-Stokes. Eles resultam de uma condição física especial em

que o equilíbrio entre a força de Coriolis e os gradientes de pressão gera uma solução que exhibe comportamento oscilatório. Adicionalmente, um novo conjunto de equações de Langevin para as componentes horizontais foi proposto para simular a dispersão em condições de velocidade do vento fraco.

A importância de modelar a difusão em condições de vento fraco reside no fato de que tais condições ocorrem frequentemente e são cruciais para episódios de poluição. Em tais condições, os poluentes não são hábeis a viajar longas distâncias e assim áreas próximas da fonte são na maioria das vezes afetadas. Deste modo, Moreira et al. (2005) investigaram o problema da modelagem de dispersão de contaminantes de fontes ao nível do solo em situações de vento fraco para condições estáveis e instáveis. Eles propuseram um modelo matemático para a dispersão de contaminantes em condições de vento fraco levando em conta a difusão longitudinal na equação da difusão-advecção. A solução da equação da difusão-advecção para estas condições foi obtida aplicando o método de transformada de Laplace, considerando a CLP como um sistema de multicamadas. Os coeficientes de difusão usados no modelo difusão-K foram derivados a partir da similaridade local e da teoria estatística da difusão de Taylor. Os coeficientes de difusão foram considerados funções da distância da fonte, representando corretamente a difusão próxima da fonte em ventos fracos. O desempenho do modelo foi avaliado com sucesso a partir de dados experimentais obtidos pelo Idaho National Engineering Laboratory (INEL), condições estáveis, e pelo Indian Institute of Technology (IIT), durante condições instáveis.

Um modelo de partículas Lagrangeano semi-analítico para simular a dispersão de poluentes durante condições de velocidade do vento fraco foi apresentado por Carvalho e Vilhena (2005). O método trata de uma equação integral estocástica cuja solução foi obtida, de modo semi-analítico, através do método de sucessivas aproximações ou método iterativo de Picard. O método proposto foi chamado de solução de Langevin iterativa para vento fraco (ILS-LW), o qual pode ser utilizado para simular a dispersão de contaminantes em situações de meandro ou não-meandro independentemente da condição de estabilidade da CLP. Sendo que, para considerar o efeito da velocidade do vento fraco a solução para as componentes horizontais da velocidade turbulenta levou em conta a função de autocorrelação Euleriana como sugerida por Frenkiel (1953). Os dados de velocidade, usados para avaliar o novo método proposto, foram coletados durante condições estáveis no Idaho National Engineering Laboratory (INEL) (Sagendorf e Dickson, 1974) e durante condições convectivas no Indian Institute of Technology (IIT), Delhi (Sharan et al., 1996a). Os resultados concordaram muito bem com os dados experimentais, indicando que o modelo representa o processo de dispersão

corretamente em condições de velocidade do vento fraco. Também a característica analítica da técnica proposta e a inclusão natural da função de autocorrelação Euleriana sugerida por Frenkiel (1953) tornaram o modelo mais exato que os outros modelos.

Carvalho et al. (2006) derivaram uma nova formulação para os parâmetros de meandro para serem usados em um modelo de partículas estocástico Lagrangeano para descrever o transporte turbulento em condições estáveis com velocidade do vento fraco. Adicionalmente, eles introduziram esta nova parametrização em um modelo de partículas Lagrangeano. O modelo de partículas Lagrangeano empregado é baseado na equação integral estocástica cuja solução foi obtida, de modo semi-analítico, através do método de sucessivas aproximações ou método iterativo de Picard. Além disso, este modelo aplicado para descrever a dispersão turbulenta em condições estáveis com a presença de vento fraco emprega nas equações para as velocidades turbulentas horizontais a função de autocorrelação Lagrangeana clássica proposta por Frenkiel (1953). Com base nesta função de autocorrelação, o importante parâmetro  $m$ , que controla a frequência de oscilação do meandro do vento, foi descrito em termos do período de meandro  $T_*$  e da escala de tempo  $T$  para uma turbulência bem desenvolvida, demonstrando que a magnitude de  $T$  controla a existência ou não das oscilações de meandro. O parâmetro  $T$  foi obtido a partir da teoria da difusão estatística de Taylor empregando um valor máximo de um coeficiente de difusão. A parametrização proposta foi avaliada e validada através de comparações com dados experimentais do Idaho National Engineering Laboratory (INEL) e outros diferentes modelos de difusão. Os resultados obtidos pelo modelo de partículas Lagrangeano concordaram muito bem com os dados experimentais, indicando que o modelo representa os processos de difusão corretamente em condições estáveis com vento fraco e também foram superiores aos obtidos por outros modelos.

Um novo sistema de duas equações de Langevin acopladas que leva em conta explicitamente os efeitos do meandro foi proposto por Anfossi et al. (2005b). Este novo sistema de equações foi implementado nos modelos de partículas estocásticos Lagrangeanos LAMBDA e GRAL. Recentemente, Anfossi et al. (2006) apresentaram simulações incluindo este novo sistema de equações e compararam os resultados obtidos por eles com dados de experimentos traçantes em condições de vento fraco do Idaho National Engineering Laboratory (INEL) em 1974 e da Graz University of Technology and CNR-Torino próximo a cidade de Graz em 2003. Concentrações foram registradas ambas ao nível do solo e, no caso do experimento de INEL, também em alguns níveis elevados. Duas séries de simulações foram realizadas com o modelo de partículas estocástico Lagrangeano LAMBDA no caso do

experimento de INEL: na primeira série o código foi modificado para levar em conta a contribuição do fenômeno de meandro para a dispersão, enquanto na segunda série o código original que trata com dispersão em condições de vento forte foi usado. Eles encontraram a partir das comparações realizadas que o novo mecanismo melhora consideravelmente as simulações de ambas as concentrações ao nível do solo e as concentrações para altos níveis. Além disso, demonstraram que a aproximação clássica não foi hábil para dispersar a pluma do traçante em todos os ângulos, sendo que a máxima concentração ao nível do solo para cada arco foi fortemente superestimada.

## Capítulo 3

### MODELOS ESTOCÁSTICOS LAGRANGEANOS

Neste capítulo apresenta-se a teoria relacionada aos modelos estocásticos Lagrangeanos. O capítulo está dividido em quatro seções principais: movimento Browniano, o modelo de Langevin, modelo de vento fraco e cálculo da concentração em um modelo estocástico Lagrangeano. As seções foram escritas seguindo os trabalhos de Rodean (1994, 1996), Carvalho (1999), Pereira (2004) e Roberti (2005).

#### 3.1 Movimento Browniano

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

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

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

suficientemente grandes em relação ao tempo médio entre dois impactos consecutivos com moléculas.

Em 1908, Langevin publicou uma solução alternativa para o movimento Browniano, quando surgiu o primeiro exemplo de equação diferencial estocástica. Essa equação levou o seu próprio nome e foi escrita da seguinte forma:

$$\frac{du}{dt} = -a_1 u + b \xi(t) \quad (3.1)$$

onde  $u$  é a velocidade da partícula,  $t$  é o tempo,  $a$  é um coeficiente *damping* associado ao arraste viscoso sobre as partículas. O produto do coeficiente  $b$  e da função aleatória  $\xi(t)$  é uma componente da aceleração flutuante rápida devido ao bombardeamento molecular irregular e assimétrico sobre a partícula.

Quando se estuda difusão turbulenta uma nova interpretação aos termos da equação (3.1) é apresentada. Neste caso,  $u$  é a flutuação de velocidade Lagrangeana, o primeiro termo do lado direito é um termo determinístico e o segundo é um termo aleatório. O coeficiente  $a$  representa a perda de memória (*fading memory*) da velocidade em um tempo anterior e a correção *drift*, a qual satisfaz a condição de boa mistura (*well-mixed*), ou seja, se a distribuição das partículas de um gás é inicialmente uniforme, em um escoamento turbulento, permanecerá desta maneira. O coeficiente  $b$  representa a difusão turbulenta, enquanto o produto do coeficiente  $b$  e da função aleatória  $\xi(t)$  representa as acelerações aleatórias devido às flutuações de pressão com tempos de correlação curtos, da ordem da escala de tempo de Kolmogorov  $\tau_k$  (a qual define o tamanho dos turbilhões que dissipam energia).

### 3.2 O modelo de Langevin

Nesta seção, apresenta-se a versão tridimensional do modelo de Langevin, sendo que a derivação em três dimensões do modelo está disponível para turbulência não-homogênea e Gaussiana (seção 3.2.1) e para turbulência não-homogênea e não-Gaussiana (seção 3.2.2).

Para a aplicação do modelo de partículas Lagrangeano é interessante entender como a informação da turbulência é considerada pelo modelo de Langevin. A turbulência na CLP pode ser classificada de acordo com a mudança no tempo (estacionária/não-estacionária), no espaço (homogênea/não-homogênea) e de acordo com a distribuição de velocidade

(Gaussiana/não-Gaussiana). Assim, em estudos de dispersão de poluentes considera-se que na direção horizontal a turbulência na CLP é estacionária, homogênea e Gaussiana. Na direção vertical a turbulência é estacionária, não-homogênea e Gaussiana ou não-Gaussiana, dependendo da estabilidade.

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

Quando a turbulência é não-homogênea, o perfil da variância de velocidade vertical sofre mudanças com a altura. As partículas tendem a deslocarem-se para regiões onde as variâncias são baixas, resultando em medidas incorretas dos valores de concentração calculados pelo modelo de partículas. Essas partículas possuem uma velocidade maior do que aquelas que estão deixando esta região, produzindo um fluxo líquido direcionado para as regiões de baixa variância. Logo, torna-se necessário a inclusão de uma correção *drift* nas equações a fim de evitar o acúmulo de partículas em regiões de baixa variância e garantir a condição de boa mistura (*well-mixed*).

Nas próximas seções serão mostradas como a turbulência é caracterizada de acordo com a mudança no espaço e distribuição de velocidade para a direção vertical.

### 3.2.1 Turbulência não-homogênea e Gaussiana

O modelo de Langevin, na forma tridimensional é baseado no trabalho de Thomson (1987). A derivação é realizada considerando-se a equação diferencial estocástica de Langevin (equação 3.1).

Thomson assumiu que a evolução da velocidade e do deslocamento  $(\vec{x}, \vec{u})$  de cada partícula é um processo de Markov (“passado e futuro são estatisticamente independente

quando o presente é conhecido”), e que os vetores  $\vec{x}$  e  $\vec{u}$  são funções do tempo. As equações de Thomson são:

$$du_i = a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)dt + b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)dW_j(t) \quad (3.2a)$$

e

$$dx_i = (U_i + u_i)dt \quad (3.2b)$$

onde  $i, j = 1, 2, 3$ ,  $\vec{x}$  é o vetor deslocamento,  $U_i$  é a velocidade do vento médio e  $\vec{u}$  é o vetor velocidade Lagrangeana. A equação (3.2.a), utilizada para o cálculo da velocidade, consiste de um termo determinístico,  $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)dt$ , e um termo estocástico, dado por  $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)dW_j(t)$ , onde  $dW_j(t)$  são os incrementos do processo de Wiener, um incremento aleatório de distribuição Gaussiana com média zero e variância  $dt$ .

Tendo-se a descrição de  $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$  e  $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)$ , integra-se numericamente a equação (3.2a), encontram-se os valores de velocidade turbulenta e o resultado é substituído na equação (3.2b) para determinar a posição de cada partícula devido aos efeitos combinados da velocidade do vento médio e da velocidade turbulenta. Estas equações determinam as sucessivas posições das partículas no domínio de cálculo utilizando os valores de velocidade média do vento e os valores da turbulência.

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

Primeiro, para determinar o coeficiente  $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$ , é necessário impor a condição de boa mistura ou *well-mixed*. Nesta condição, a trajetória das partículas inicialmente bem misturadas em um escoamento assim deve permanecer. O critério de boa mistura é satisfeito considerando-se que a função densidade de probabilidade da velocidade Euleriana (FDP),  $P_E(\vec{x}, \vec{u}, t)$ , satisfaça a equação de Fokker-Planck correspondente ao sistema (3.2):

$$\frac{\partial P_E}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(u_i P_E) - \frac{\partial}{\partial u_i}(a_i P_E) + \frac{\partial^2}{\partial u_i \partial u_j}(B_{i,j} P_E) \quad (3.3)$$

onde  $B_{i,j} = \frac{1}{2}b_{i,k}b_{j,k}$  e  $P_E = P_E(\vec{x}, \vec{u}, t)$  é a função densidade de probabilidade Euleriana da velocidade turbulenta. A equação (3.3) fornece a relação entre a função  $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$  e as características estatísticas Eulerianas do campo de fluxo, sendo este último representado pela

distribuição de probabilidade  $P_E$ . Ainda, os termos do lado direito representam a advecção, a convecção e a difusão, respectivamente. O coeficiente determinístico  $a_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$  é obtido por:

$$a_i P_E = \frac{\partial}{\partial u_i} (B_{i,j} P_E) + \phi_i(\vec{x}, \vec{u}, t) \quad (3.4a)$$

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_i} = -\frac{\partial P_E}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (u_i P_E) \quad (3.4b)$$

sujeito à condição:

$$\phi_i \rightarrow 0 \text{ quando } \vec{u} \rightarrow \infty. \quad (3.5)$$

O coeficiente determinístico  $a_i$  é obtido a partir da equação (3.4a) como:

$$a_i = -B_{i,j} V_{i,k}^{-1} (u_k - U_k) + \frac{\phi_i}{P_E}, \quad (3.6)$$

onde  $V_{i,k} = \langle (u_i - U_i)(u_k - U_k) \rangle$ . Na equação (3.6), o primeiro termo representa a perda de memória (*fading memory*) e o segundo termo a correção *drift*, que é função do gradiente espacial da velocidade.

Na equação (3.6) é preciso determinar a função  $\phi_i(\vec{x}, \vec{u}, t)$ . Segundo Thomson (1987), o sistema não apresenta solução única em mais do que uma dimensão para esta função. No entanto, uma solução particular pode ser assumida considerando a distribuição de velocidade Gaussiana. Portanto, Thomson utilizou a equação (3.4b) para obter a seguinte expressão para  $\phi_i$ :

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i}{P_E} &= \frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_{i,j}}{\partial x_j} \\ &+ \left[ \frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{(V^{-1})_{i,m}}{2} \left( \frac{\partial V_{j,m}}{\partial t} + U_k \frac{\partial V_{j,m}}{\partial x_k} \right) \right] (u_j - U_j) \\ &+ \frac{1}{2} (V^{-1})_{i,m} \frac{\partial V_{k,m}}{\partial x_j} (u_j - U_j)(u_k - U_k). \end{aligned} \quad (3.7)$$

O segundo critério requer que o modelo de partículas forneça resultados corretos no subintervalo inercial. Assim, o coeficiente  $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)$  é determinado comparando-se a função estrutura da velocidade Lagrangeana, derivada da equação (3.2a),

$$\overline{(du_i)^2} = b_{i,j}^2 dt, \quad (3.8)$$

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

$$\overline{(du_i)^2} = \delta_{ij} C_o \varepsilon dt. \quad (3.9)$$

Então, a partir das equações (3.8) e (3.9), mostra-se que  $b_{i,j}(\vec{x}, \vec{u}, t)$  está relacionado à constante  $C_o$  da seguinte forma:

$$b_{i,j} = \delta_{ij} \sqrt{C_o \varepsilon} \quad (3.10)$$

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

$$b_{i,j} = \delta_{ij} \sqrt{C_o \varepsilon} = \delta_{ij} \left( 2 \frac{\sigma_i^2}{\tau_{Li}} \right)^{1/2}, \quad (3.11)$$

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

### 3.2.2 Turbulência não-homogênea e não-Gaussiana

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

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

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

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, w, t)dW(t) \quad (3.12a)$$

e

$$dz = wdt \quad (3.12b)$$

onde todos os termos têm o mesmo significado que nas eqs. (3.2a,b).

A equação de Fokker-Planck correspondente para condições estacionárias é:

$$\frac{\partial [wP_E(w, z)]}{\partial z} = -\frac{\partial [a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [b^2(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2} \quad (3.13)$$

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

Novamente, o problema encontra-se em calcular os coeficientes  $a(z, w, t)$  e  $b(z, w, t)$  das equações (3.12a) e (3.13). Para  $b(z, w, t)$ , encontrar a solução é relativamente fácil, mas para  $a(z, w, t)$ , em turbulência não-homogênea (em uma CLC), não é uma tarefa simples. Antes, porém, duas observações sobre estes dois coeficientes são necessárias. Primeiro Thomson (1987) observou que o coeficiente  $a(z, w, t)$  pode ser determinado em uma dimensão, mas não para duas ou três, como foi descrito anteriormente na seção 3.2.1. Como, agora, trabalha-se somente em uma dimensão, a vertical, não haverá o problema de várias soluções para o coeficiente determinístico. Segundo, Thomson concluiu que é melhor trabalhar com um modelo simples quando na ausência de uma teoria satisfatória. Ele declarou que é mais simples manter  $b$  independente da velocidade, ou seja,  $b(z, w, t) = b(z, t)$ . Assim, a equação de Langevin (3.12a) passa a ser escrita como:

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, t)dW(t) \quad (3.14)$$

e a equação de Fokker-Planck torna-se:

$$\frac{\partial [wP_E(w, z)]}{\partial z} = -\frac{\partial [a(z, w, t)P_E(w, z)]}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 [b^2(z, t)P_E(w, z)]}{\partial w^2} \quad (3.15)$$

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

$$b(z, t) = [C_o \varepsilon(z)]^{1/2} \quad (3.16)$$

ou

$$b(z, t) = [C_o \varepsilon(z)]^{1/2} = \left( 2 \frac{\sigma_w^2}{\tau_{Lw}} \right)^{1/2} \quad (3.17)$$

Do mesmo modo, como na seção anterior, o coeficiente  $a(z, w, t)$  depende da função densidade de probabilidade Euleriana,  $P_E(w, z)$ , e deve ser determinado a partir da equação de Fokker-Planck (3.15). Esta é dividida em duas equações, as quais definem a condição de boa mistura (*well-mixed*) de Thomson (1987):

$$a(z, w, t)P_E(w, z) = \frac{\partial}{\partial w} \left( \frac{b^2(z, t)}{2} P_E(w, z) \right) + \phi(z, w, t) \quad (3.18a)$$

$$\frac{\partial \phi(z, w, t)}{\partial w} = -w \frac{\partial P_E(w, z)}{\partial z} \quad (3.18b)$$

sujeito à condição:

$$\phi \rightarrow 0 \text{ quando } |w| \rightarrow \infty. \quad (3.19)$$

Para o desenvolvimento do Modelo de Langevin para a difusão turbulenta não-homogênea, deve-se utilizar uma FDP não-Gaussiana ou assimétrica. As FDPs não-Gaussianas mais utilizadas são a bi-Gaussiana e Gram-Chalier de terceira ou quarta ordem (Ferrero e Anfossi, 1998b).

Nesta dissertação utiliza-se, na direção vertical, a FDP não-Gaussiana dada pela função Gram-Chalier truncada na terceira ordem, a qual será apresentada na próxima seção, juntamente com o cálculo para a obtenção do termo determinístico da equação de Langevin para esta FDP.

### 3.2.3 Função densidade de probabilidade (PDF) Gram-Chalier

A FDP Gram-Chalier, truncada para a quarta ordem, tem a seguinte expressão (Kendall e Stuart, 1977):

$$P_E(x, z) = \frac{e^{-(x^2/2)}}{\sqrt{2\pi}} (1 + C_3 H_3 + C_4 H_4) \quad (3.20)$$

onde  $H_3$  e  $H_4$  são os polinômios de Hermite e  $C_3$  e  $C_4$  os coeficientes dos polinômios de Hermite, cujas expressões são:

$$H_3 = x^3 - 3x \quad (3.21a)$$

$$H_4 = x^4 - 6x^2 + 3 \quad (3.21b)$$

$$C_3 = \overline{\mu_3} / 6 \quad (3.21c)$$

$$C_4 = (\overline{\mu_4} - 3) / 24 \quad (3.21d)$$

e  $\overline{\mu_3}, \overline{\mu_4}$  são os momentos padronizados de  $w$  e  $x = w / \sigma_w$ . No caso de turbulência Gaussiana, a equação (3.20) reduz-se à distribuição normal ( $C_3$  e  $C_4$  tornam-se iguais a zero).

Resolvendo (3.18b), em que  $P_E$  é dada pela equação (3.20), a seguinte expressão para  $\phi$  é encontrada:

$$\phi = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_w^2}{\partial z} \frac{e^{-(x^2/2)}}{\sqrt{2\pi}} [1 - C_4 + x^2(1 + C_4) - 2C_3x^3 - 5C_4x^4 + C_3x^5 + C_4x^6] \quad (3.22)$$

A partir das equações (3.16), (3.18a), (3.20) e (3.22), a expressão para o coeficiente  $a(z, w)$  é dada por (Ferrero e Anfossi, 1998b):

$$a(z, w) = \sigma_w \frac{\frac{1}{\tau_{Lw}}(T_1) + \frac{\partial \sigma_w}{\partial z}(T_2)}{T_3}, \quad (3.23)$$

onde

$$T_1 = -3C_3 - x(15C_4 + 1) + 6C_3x^2 + 10C_4x^3 - C_3x^4 - C_4x^5 \quad (3.24a)$$

$$T_2 = 1 - C_4 + x^2(1 + C_4) - 2C_3x^3 - 5C_4x^4 + C_3x^5 + C_4x^6 \quad (3.24b)$$

$$T_3 = 1 + 3C_4 - 3C_3x - 6C_4x^2 + C_3x^3 + C_4x^4 \quad (3.24c)$$

A FDP Gram-Chalier truncada na terceira ordem é obtida colocando  $C_4 = 0$ .

### 3.3 Modelo de vento fraco

Simular a dispersão de escalares passivos em condições de velocidade do vento fraco é um problema físico difícil porque quando a velocidade do vento decresce abaixo de um certo valor crítico ( $\bar{u} < 1.5 \text{ms}^{-1}$ ), não é possível definir uma direção precisa do vento médio (Oettl

et al., 2005). Neste caso, oscilações de baixa frequência do vento horizontal são observadas na baixa atmosfera. Na literatura, estas oscilações de baixa frequência do vento horizontal são chamadas de meandro e são responsáveis pelas funções de autocorrelação das componentes horizontais do vento exibirem grandes lobes negativos (Anfossi et al., 2005a e Oetl et al., 2005). Assim, tornando-se crucial estimar corretamente a dispersão de poluentes na atmosfera. As seguintes relações,

$$R(\tau) = e^{-\frac{\tau}{(m^2+1)T}} \cos \frac{m\tau}{(m^2+1)T} \quad (3.25a)$$

e

$$R(\tau) = e^{-p\tau} \cos(q\tau) \quad (3.25b)$$

onde:

$$p = \frac{1}{(m^2+1)T} \quad \text{e} \quad q = \frac{m}{(m^2+1)T} \quad (3.25c)$$

foram previamente propostas, respectivamente, por Frenkiel (1953) e Murgatroyd (1969) em diferentes contextos. Estas formas funcionais são compostas do produto da função exponencial clássica (representado pela função de autocorrelação para uma turbulência bem desenvolvida) pela função cosseno (a qual descreve o fenômeno de meandro associado às oscilações de baixa frequência do vento horizontal). As equações (3.25a) e (3.25b) contêm dois parâmetros, um ( $p$  ou  $T$ ) que pode ser associado à escala de tempo integral clássica e o segundo ( $q$  ou  $m$ ) ao período de meandro. Este último controla o valor absoluto do lobe negativo na função de autocorrelação Euleriana e ainda estabelece a magnitude do fenômeno de meandro, sendo encontrado que a relação (3.25a) ajusta-se corretamente a  $R(\tau)$  experimental em situações de velocidade do vento fraco, enquanto a forma exponencial clássica é completamente deficiente (Oetl et al., 2005). Em particular, a forma de Frenkiel recupera o resultado clássico quando os efeitos de meandro não são considerados, ou seja, quando  $m = 0$ .

Portanto, Anfossi et al. (2005a) e Oetl et al. (2005) forneceram uma explicação física à ocorrência de meandro e como resultado um sistema de duas equações de Langevin acopladas para as componentes horizontais do vento foi derivado. Esse sistema de equações foi proposto para simular a dispersão em condições de vento fraco, condições homogênea e estacionária como é mostrado abaixo:

$$du = -(pu + qv)dt + \sigma_u \sqrt{2pdt} \xi_u \quad (3.26a)$$

e

$$dv = -(-qu + pv)dt + \sigma_v \sqrt{2pdt} \xi_v \quad (3.26b)$$

onde  $u$  e  $v$  são as componentes horizontais das flutuações da velocidade do vento,  $\xi_u$  e  $\xi_v$  são variáveis Gaussianas (tendo média zero e variância  $dt$ ),  $\sigma_u$  e  $\sigma_v$  são os desvios padrões das componentes horizontais do vento.

A forma do termo de difusão na equação (3.26), a qual aparece em substituição à escala de tempo Lagrangeana  $\tau_L$ , foi obtida com um procedimento similar ao utilizado na derivação do termo de difusão em condições tradicionais. A seguinte relação pode ser escrita para a função estrutura Lagrangeana  $D_i(\tau)$ :

$$D_i(\tau) = 2\sigma_i^2[1 - R(\tau)] = C_o \varepsilon \tau \quad (3.27)$$

onde  $R(\tau)$  é a função de autocorrelação Euleriana,  $C_o$  é a constante de Kolmogorov e  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação da turbulência. Assumindo uma forma exponencial para  $R(\tau)$  e expandindo em ( $R(\tau) \approx 1 - \tau/T_L$ ), Tennekes (1979) encontrou:

$$2\sigma_i^2[1 - (1 - \tau/T_L)] = C_o \varepsilon \tau \quad (3.28)$$

$$\frac{2\sigma_i^2}{T_L} = C_o \varepsilon \quad (3.29)$$

$$\varepsilon = \frac{2\sigma_i^2}{C_o T_L}. \quad (3.30)$$

Repetindo o mesmo procedimento, usando a expressão  $R(\tau)$  para o caso de vento fraco, obtem-se:

$$\varepsilon = \frac{2\sigma_i^2 p}{C_o}. \quad (3.31)$$

Mais recentemente, Anfossi et al. (2005b) propuseram um novo sistema de duas equações de Langevin acopladas baseado na chamada “solução simples de Thomson” (Thomson, 1987), para o caso geral de turbulência não-homogênea e condições estacionárias, mostrada abaixo:

$$du = \left\{ -p(u - \bar{u}) - q(v - \bar{v}) + \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} u + \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} v + \sigma_u \frac{\partial \sigma_u}{\partial x} + \frac{(u - \bar{u})}{\sigma_u} \left[ \frac{\partial \sigma_u}{\partial x} u + \frac{\partial \sigma_u}{\partial y} v \right] \right\} dt + \sqrt{2pdt} \sigma_u \xi_u \quad (3.32)$$

$$dv = \left\{ q(u - \bar{u}) - p(v - \bar{v}) + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} u + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} v + \sigma_v \frac{\partial \sigma_v}{\partial y} + \frac{(v - \bar{v})}{\sigma_v} \left[ \frac{\partial \sigma_v}{\partial x} u + \frac{\partial \sigma_v}{\partial y} v \right] \right\} dt + \sqrt{2pdt} \sigma_v \xi_v$$

onde  $u$  e  $v$  são as componentes horizontais das flutuações da velocidade do vento e  $\bar{u}$  e  $\bar{v}$  são as velocidades médias.

A componente vertical  $w$  é calculada resolvendo a equação de Langevin (Thomson, 1987) como apresentado na seção 3.2.2, tal que:

$$dw = a_i(z, w) + b_o(z)dW_j \quad (3.33)$$

onde  $dW_j$  é o processo incremental de Wiener, Gaussiano com média zero e variância  $dt$ ,  $b_o(z) = \sqrt{2\sigma_w^2/T_{Lw}}$  e  $a_i(z, w)$  é calculado resolvendo a equação de Fokker-Planck associada à equação (3.32) usando uma FDP.

A posição de cada partícula, em cada passo no tempo, é obtida pela integração numérica das equações (3.32) e (3.33) e da seguinte equação:

$$dx_i = u_i dt, \quad (3.34)$$

onde  $i = u, v, w$ ,  $x_i$  é o vetor posição de cada partícula,  $u_i$  é a combinação dos vetores velocidade do vento médio e velocidade Lagrangeana.

### 3.4 Cálculo da concentração em um modelo estocástico Lagrangeano

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

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

$$C(\vec{x}) = S \frac{V_f}{V_s} \frac{1}{N_{PEF}} \sum_{i=1}^{N_{PVS}} \Delta t = S \frac{V_f}{V_s} \frac{\Delta t}{N_{PEF}} N_{PVS} \quad (3.35)$$

onde  $N_{PEF}$  é o número de partículas emitidas da posição da fonte em cada passo no tempo,  $\Delta t$ ,  $N_{PVS}$  é o número de partículas no sensor,  $V_s$  é o volume do sensor e  $V_f$  é o volume da fonte. Tendo-se  $N_s$  sensores e/ou  $N_f$  elementos de fonte, a concentração em cada sensor será calculada da seguinte forma:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} S_i \frac{V_{f,i}}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (3.36)$$

onde  $C_j$  é a concentração no j-ésimo sensor,  $S_i$  é a i-ésima fonte,  $V_{s,i}$  é o volume do i-ésimo sensor,  $N_{PEF,i}$  é o número de partículas emitidas da i-ésima fonte e  $N_{PVS,i,j}$  é o número de partículas emitidas da i-ésima fonte e que se encontram no j-ésimo sensor.

Pode-se, ainda, definir uma intensidade de emissão, em  $gs^{-1}$ , da i-ésima fonte como sendo:

$$Q_i = S_i V_{f,i}, \quad (3.37)$$

e, assim, a equação (3.36) pode ser reescrita como:

$$C_j = \sum_{i=1}^{N_f} Q_i \frac{1}{V_{s,j}} \frac{\Delta t}{N_{PEF,i}} N_{PVS,i,j} \quad (3.38)$$

## Capítulo 4

### **SIMULAÇÃO DOS MODELOS ESTOCÁSTICOS LAGRANGEANOS**

Nesta dissertação, a simulação dos modelos de partículas Lagrangeanos consiste em comparar os dados de concentrações observados com os dados simulados numericamente a partir dos modelos propostos. Nas simulações propostas, utilizam-se três experimentos. O primeiro experimento é o de Copenhagen (Dinamarca) com dados de 9 horas de medidas de concentração de um poluente passivo, liberado a uma altura de 115m em condições de convecção forçada. O segundo é o de Prairie Grass (Nebraska, EUA), onde o poluente foi liberado sob condições instáveis e neutras de uma altura de 0.5m sem empuxo. E o último é o de INEL (Idaho, EUA), onde o poluente foi liberado de uma altura de 1.5m acima do nível do solo. No experimento de INEL foram observadas condições estáveis durante a maioria dos experimentos. Cada experimento, incluindo emissão e coleta dos dados, teve duração de uma hora, exceto o experimento 10 que teve duração de 49 minutos.

Neste capítulo, uma descrição dos experimentos citados acima é realizada. Esta descrição apresenta as principais características destes experimentos e também as simulações realizadas com o modelo LAMBDA para cada um deles. Além disso, são apresentados os resultados obtidos, bem como as modificações realizadas no modelo LAMBDA para o experimento de INEL.

#### **4.1 Parâmetros utilizados nas simulações**

Nesta dissertação foram utilizados, em todas as simulações, os perfis verticais do desvio padrão da velocidade ( $\sigma_i$ ) e da escala de tempo Lagrangeana ( $\tau_{Li}$ ) como dados de entrada no modelo estocástico Lagrangeano. Segundo Mangia et al. (2002) a confiabilidade de cada modelo depende fortemente dos caminhos pelos quais os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados à CLP. Aqui, estes parâmetros foram calculados de acordo com a parametrização da turbulência derivada por Degrazia et al. (2000), sendo está válida somente

em condições de homogeneidade horizontal. A teoria da difusão estatística clássica, as propriedades espectrais observadas e as características observadas dos turbilhões contendo energia são usadas para estimar estes parâmetros. Estas parametrizações fornecem valores contínuos para a CLP em todas as elevações ( $z_o \leq z \leq z_i, h$ ) e todas as condições de estabilidade da instável a estável, onde  $z_o$  é o comprimento de rugosidade,  $z_i$  é a altura da CLP convectiva e  $h$  é a altura da CLP neutra ou estável.

As expressões gerais para a variância da velocidade do vento ( $\sigma_i^2$ ) e para a escala de tempo Lagrangeana ( $\tau_{Li}$ ) são:

$$\sigma_i^2 = \frac{1.06c_i \left[ \psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{2/3} w_*^2}{\left[ (f_m^*)_i^c \right]^{2/3}} + \frac{2.32c_i \left[ \phi_\varepsilon^{n+s} \right]^{2/3} u_*^2}{\left[ (f_m^*)_i^{n+s} \right]^{2/3}} \quad (4.1)$$

e

$$\tau_{Li} = \frac{z}{\sqrt{c_i}} \left\{ \frac{0.14 \left[ \frac{-\bar{L}}{h} \frac{h}{-L} \right]^{-1/2}}{\left[ (f_m^*)_i^c \right]^{2/3} w_* \left[ \psi_\varepsilon^c \frac{z}{h} \right]^{1/3}} + \frac{0.059}{\left[ (f_m^*)_i^{n+s} \right]^{2/3} \left[ \phi_\varepsilon^{n+s} \right]^{1/3} u_*} \right\} \quad (4.2)$$

onde a variância da velocidade do vento ( $\sigma_i^2$ ), proporcional à escala de velocidade ao quadrado, depende das energias cinéticas turbulentas, originadas pelos forçantes convectivo (empuxo) e mecânico (cisalhamento do vento), respectivamente. Do mesmo modo, a escala de tempo de decorrelação Lagrangeana ( $\tau_{Li}$ ) depende das escalas de tempo associadas aos forçantes convectivo e mecânico. Em ambas as equações (4.1) e (4.2), o primeiro termo contém os turbilhões mais energéticos convectivos e o segundo os turbilhões mais energéticos mecânicos. Ainda,  $w_*$  é a escala de velocidade convectiva,  $u_*$  é a velocidade local de fricção,  $\psi_\varepsilon^c = \varepsilon h / w_*^3$  e  $\phi_\varepsilon^{n+s} = (\varepsilon k z) / u_*^3$  são as funções adimensionais das taxas de dissipação,  $(f_m^*)_i^c$  e  $(f_m^*)_i^{n+s}$  são as frequências reduzidas dos picos espectrais convectivo e neutro ou estável, respectivamente. O termo na raiz quadrada é introduzido para fornecer uma transição contínua da condição neutra à convectiva.  $-\bar{L}/h$  é um parâmetro de estabilidade médio para a CLP convectiva,  $k$  é a constante de von Karman e  $c_i = \alpha_i \alpha_u (2\pi k)^{-2/3}$  com  $\alpha_u = 0.5 \pm 0.05$  e  $\alpha_i = 1.4/3, 4/3$  para as componentes  $u, v$  e  $w$ , respectivamente.

Na parametrização da turbulência, dada pelas equações (4.1) e (4.2), é necessário ter expressões para  $w_*$ ,  $u_*$ ,  $\psi_\varepsilon^{n+s}$ ,  $\phi_\varepsilon^{n+s}$ ,  $(f_m^*)_i^c$  e  $(f_m^*)_i^{n+s}$ . Para a CLP convectiva,  $(\psi_\varepsilon^c)^{2/3} \approx 0.75$  (Caughey e Palmer, 1979; Højstrup, 1982; Wilson, 1997),  $w_* = (u_*)(-h/kL)^{1/3}$  e, recordando que  $(f_m^*)_i^c = z/(\lambda m)_i$  e  $(\lambda m)_i$  é o pico espectral da velocidade turbulenta do vento, expressões de  $(f_m^*)_i^c$  para  $i = u, v, w$  podem ser derivada.

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

$$(\lambda_m)_u = (\lambda_m)_v = 1.5z_i \quad (4.3)$$

e

$$(\lambda_m)_w = 1.8z_i \left[ 1 - \exp\left(-4 \frac{z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(8 \frac{z}{z_i}\right) \right] \quad (4.4)$$

mas

$$(f_m^*)_i^c = z/(B_i z_i) \quad (4.5)$$

com  $B_u = B_v = 1.5$  e

$$B_w = 1.8 \left[ 1 - \exp\left(-4 \frac{z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(8 \frac{z}{z_i}\right) \right]. \quad (4.6)$$

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

$$\phi_\varepsilon^{n+s} = \phi^n (1 + 3.7 z/\Lambda) \quad (4.7)$$

onde  $\phi^n = 1.25$  e  $\Lambda = L(1 - z/h)^{(1.5\alpha_1 - \alpha_2)}$  (Degrazia e Moraes, 1992) é o comprimento de Monin-Obukhov local. Para a CLP estável,  $\alpha_1 = 1.5$  e  $\alpha_2 = 1.0$  (Nieuwstadt, 1984). Além disso, para a CLP neutra ou estável, a velocidade de fricção é:

$$u_*^2 = (u_*^2)_0 (1 - z/h)^{\alpha_1} \quad (4.8)$$

em que  $\alpha_1 = 1.7$  para o caso neutro (Wyngaard et al., 1974).

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

$$(f_m^*)_i^{n+s} = (f_m^*)_i^n \left( 1 + 0.03a_i \frac{f_c z}{(u_*^2)_0} + 3.7 \frac{z}{\Lambda} \right) \quad (4.9)$$

onde  $(f_m^*)_{is}^n$  é a frequência do pico espectral na superfície para condições neutras e  $f_c = 10^{-4} s^{-1}$  é o parâmetro de Coriolis. De acordo com Olesen et al. (1984) e Sorbjan (1989),  $(f_n)_{us}^n = 0.045$ ,  $(f_m)_{vs}^n = 0.16$  e  $(f_m)_{ws}^n = 0.33$ . Na equação (4.9),  $a_w = 500$  (Hanna, 1968; Hanna, 1981),  $a_u = 3889$  e  $a_v = 1094$ .

A parametrização contínua para todas as estabilidades é garantida pelo fato de que condições estáveis e instáveis não podem existir ao mesmo tempo, numa mesma posição. No entanto, efeitos estáveis e neutros podem ocorrer simultaneamente, visto que tanto a turbulência estável quanto a turbulência neutra é gerada por forçantes mecânicos. Portanto, em condições neutro-instável o último termo da equação (4.9) torna-se nulo, enquanto em condições estável-neutra o termo  $1/(f_m^*)_i^c$  é nulo, nas equações (4.1) e (4.2).

## 4.2 Experimento de Copenhagen

No experimento de Copenhagen o contaminante ( $SF_6$ ) foi liberado sem empuxo de uma fonte de 115m de altura e coletado ao nível do solo por amostradores de concentração em três distâncias na direção preferencial do vento (entre 2 e 6 km a partir da fonte) como mostrado na Figura 4.1 (Gryning e Lyck, 1984 e 1998). As medidas de concentração foram feitas a cada 20 mim, totalizando 3 medidas em 1 hora. A região do experimento era plana com um comprimento de rugosidade de 0.6m. Os resultados de 23 experimentos convectivos ( $-z_i / L > 10$ ) são apresentados. Todos os dados avaliados (veja Tabela 4.1) foram usados para criar a entrada para as simulações do modelo LAMBDA. O produto  $C_o \varepsilon$ , presente no termo estocástico da equação de Langevin, foi calculado em termos da variância da velocidade turbulenta  $(\sigma_i^2)$  e da escala de tempo de decorrelação Lagrangeana  $(\tau_{Li})$ , equações (4.1) e (4.2), respectivamente, que foram parametrizadas de acordo com o esquema de parametrização derivado por Degrazia et al. (2000).

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

$$\gamma = \left[ \frac{\log(U(115)/U(10))}{\log(115/10)} \right] \quad (4.10a)$$

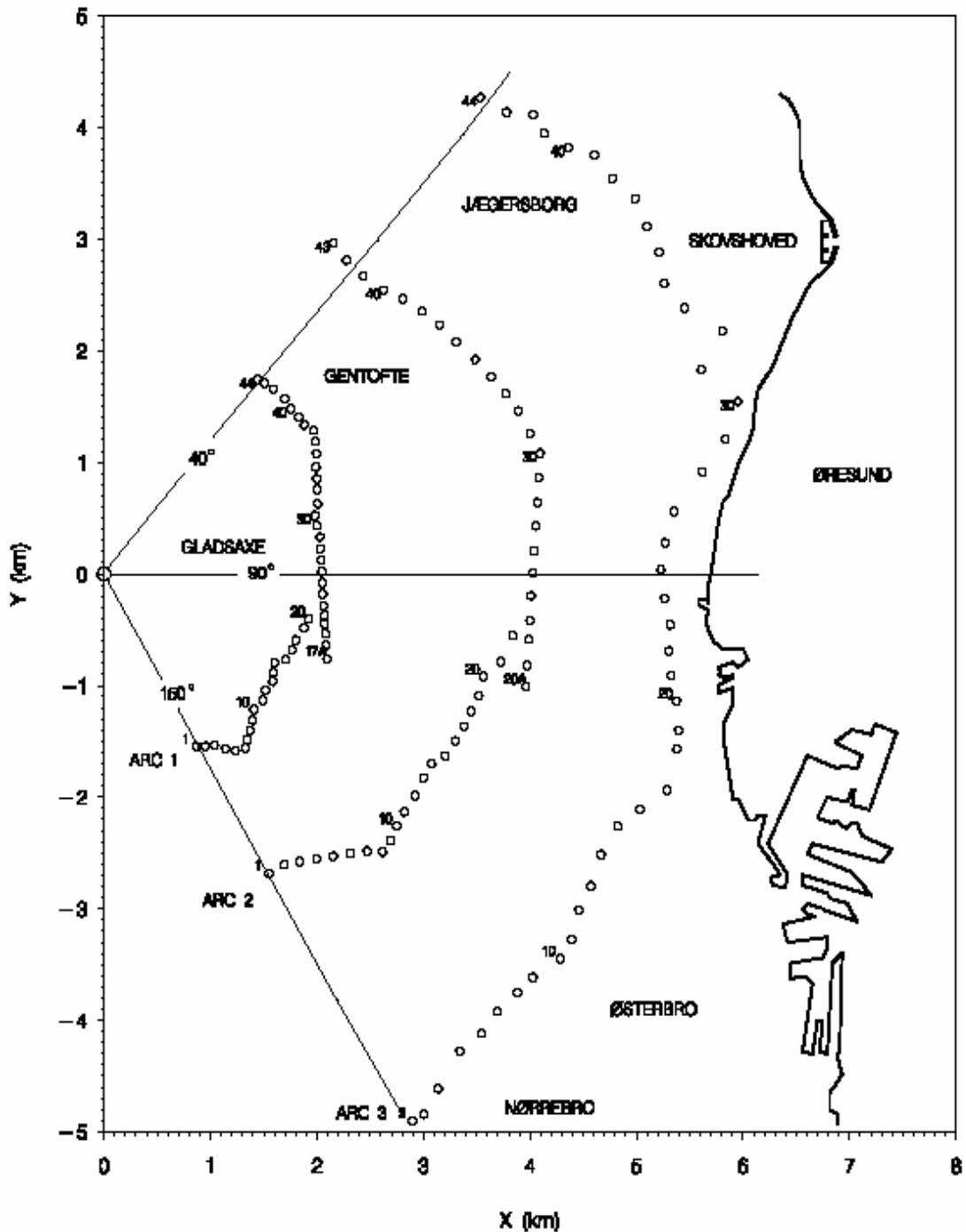
e

$$U(z) = U(10) \left[ \frac{z}{10} \right]^\gamma \quad (4.10b)$$

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

No LAMBDA, o domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores e o domínio vertical foi considerado igual à altura da camada limite convectiva,  $h$ . O passo no tempo foi mantido constante ( $\Delta t = 1s$ ). Cem partículas foram liberadas em cada passo no tempo, a partir da fonte, durante 2400 passos no tempo. O volume que representa a fonte pontual foi de  $0.1m \times 0.1m \times 0.1m$ , enquanto o volume para o cálculo da concentração foi de  $50m \times 50m \times 10m$ . A função densidade de probabilidade (FDP) Gram-Chalier truncada na terceira ordem foi utilizada na direção vertical, como apresentado na seção 3.2.3.

No experimento de Copenhagen foi considerado o mesmo modelo utilizado por Carvalho et al. (2002) e também a mesma parametrização da turbulência. A simulação deste experimento teve como objetivo estudar o modelo LAMBDA e a parametrização da turbulência a partir da reprodução do trabalho desenvolvido por Carvalho et al. (2002).



**Figura 4.1** – Área do experimento de Copenhagen. O eixo  $x$  está apontando para Leste, o eixo  $y$  para norte e as posições dos sensores estão indicadas através de círculos, distribuídos em três arcos concêntricos em relação à fonte. O contaminante foi liberado de uma altura de 115m na posição  $(x, y) = (0,0)$ . Foram instalados e distribuídos aproximadamente 20 sensores ao longo de cada arco. A linha cheia indica o litoral de Øresund (extraído de Gryning e Lyck, 1998).

**Tabela 4.1** – Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Copenhagen.

Exp	$-L$ (m)	$h$ (m)	$u_*$ (m/s)	$U_{10m}$ (m/s)	$U_{15m}$ (m/s)	$Q$ (g/s)
1	37	1980	0.36	2.1	3.4	3.2
2	292	1920	0.73	4.9	10.6	3.2
3	71	1120	0.38	2.3	5.0	3.2
4	133	390	0.38	2.5	4.6	2.3
5	444	820	0.45	3.1	6.7	3.2
6	432	1300	1.05	7.2	13.2	3.1
7	104	1850	0.64	4.1	7.6	2.4
8	56	810	0.69	4.2	9.4	3.0
9	289	2090	0.75	5.1	10.5	3.3

### 4.3 Experimento de Prairie Grass

O experimento de Prairie Grass foi realizado em O'Neill, Nebraska, EUA, 1956 (Barad, 1958). O poluente  $SO_2$  foi emitido sem empuxo em uma altura de 0.5m e coletado por amostradores de concentração a uma altura de 1.5m em cinco distâncias na direção preferencial do vento (50, 100, 200, 400 e 800m). A região do experimento era plana com rugosidade de 0.6cm. Nesta dissertação foram considerados somente os experimentos com condições de estabilidade neutra, para as quais a velocidade do vento médio foi maior que 6m/s. Os dados meteorológicos medidos durante o experimento (veja Tabela 4.2) foram utilizados para criar um arquivo de entrada para as simulações. O perfil exponencial do vento foi calculado a partir das observações de velocidade do vento na altura de 10m e parametrizado seguindo a teoria de similaridade de Monin-Obukhov (Berkowicz et al., 1986):

$$U(z) = \frac{u_*}{k} \left[ \ln\left(\frac{z}{z_o}\right) - \Psi_m\left(\frac{z}{L}\right) + \Psi_m\left(\frac{z_o}{L}\right) \right] \quad \text{se } z < z_b \quad (4.11a)$$

$$U(z) = U(z_b) \quad \text{se } z > z_b \quad (4.11b)$$

onde  $z_b = \min[|L|, 0.1h]$  e  $\Psi_m$  é a função estabilidade dada por:

$$\Psi_m = 2 \ln\left(\frac{1+A}{2}\right) + \ln\left(\frac{1+A^2}{2}\right) - 2 \tan^{-1} A + \frac{\pi}{2} \quad (4.12)$$

e

$$A = \left(1 - 16 \frac{z}{L}\right)^{1/4}. \quad (4.13)$$

Para calcular  $h$ , altura da Camada Limite Planetária neutra, foi utilizada a seguinte relação (Garratt, 1992):

$$h = 0.33 \frac{u_*}{f_c} \quad (4.14)$$

onde  $f_c = 0.0001s^{-1}$  é o parâmetro de Coriolis. As variâncias da velocidade do vento ( $\sigma_i^2$ ) e escalas de tempo de decorrelação Lagrangeana ( $\tau_{Li}$ ), foram calculadas de acordo com o esquema derivado por Degrazia et al. (2000).

No LAMBDA, o domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores e o domínio vertical foi considerado igual à altura da camada limite neutra,  $h$ . O passo no tempo foi mantido constante ( $\Delta t = 1s$ ). Cem partículas foram liberadas em cada passo no tempo, a partir da fonte, durante 1500 passos no tempo. O volume que representa a fonte pontual foi de  $0.1m \times 0.1m \times 0.1m$ , enquanto o volume para o cálculo da concentração foi de  $20m \times 20m \times 1m$ . A função densidade de probabilidade (FDP) Gram-Chalier truncada na terceira ordem, apresentada na seção 3.2.3, foi utilizada na direção vertical devido ao fato de mesmo em condições neutras poder existir movimentos que sejam assimétricos em relação à velocidade vertical das partículas.

**Tabela 4.2** - Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de Prairie Grass.

Exp	$-L$ (m)	$h$ (m)	$w_*$ (m/s)	$U_{10m}$ (m/s)	$Q$ (g/s)
5	28	780	1.64	7.0	78
9	31	550	1.70	8.4	92
19	28	650	1.58	7.2	102
20	62	710	1.92	11.3	102
26	32	900	1.86	7.8	98
27	30	1280	2.08	7.6	99
30	39	1560	2.23	8.5	98
43	16	600	1.66	6.1	99
44	25	1450	2.20	7.2	101
49	28	550	1.73	8.0	102
50	26	750	1.91	8.0	103
51	40	1880	2.30	8.0	102
61	38	450	1.65	9.3	102

#### 4.4 Experimento de INEL

O experimento de INEL foi realizado no Idaho National Engineering Laboratory (INEL) no sudeste de Idaho, EUA (Sagendorf e Dickson, 1974). O INEL é localizado em uma região ampla, relativamente plana em uma elevação de aproximadamente 1500m acima do nível do mar. O clima é seco e a área tem características semidesérticas. O poluente SF<sub>6</sub> foi liberado 1.5m acima da superfície. Concentrações ao nível do solo foram medidas a 0.76m por sessenta amostradores (colocados em intervalos de 6°) sobre três arcos concêntricos (360°) com raios de 100, 200 e 400m em relação ao ponto de emissão (totalizando 180 amostradores) (Figura 4.2). No experimento de INEL informações meteorológicas como velocidade, direção do vento e desvio padrão da direção do vento foram registradas em uma

torre meteorológica em seis níveis (2, 4, 8, 16, 32 e 61m) com anemômetros tradicionais colocados sobre o segundo arco.

Medidas de velocidades do vento fornecidas por anemômetros nos níveis de 2, 4, 8, 16, 32 e 61m, localizados no arco de 200m, foram usadas para calcular o coeficiente para o perfil exponencial vertical do vento. Segundo Brusasca et al. (1992) e Sharan et al. (1996a) a rugosidade da região do experimento era de 0.005m. O comprimento de Monin-Obukhov  $L$  e a velocidade de fricção  $u_*$  não foram avaliados para o experimento de INEL, mas podem ser aproximadamente estimados. Segundo Zannetti (1990)  $L$  pode ser escrito da seguinte formulação empírica:

$$L = Au_*^2, \quad (4.15)$$

onde  $A = 1.1 \times 10^3 s^2.m^{-1}$  e a magnitude da escala de comprimento  $L$  corresponde a altura em que as taxas de produção térmicas e mecânicas da energia cinética turbulenta são iguais. A velocidade de fricção é obtida pela seguinte expressão:

$$u_* = \frac{ku(z_r)}{\ln(z_r/z_o)}, \quad (4.16)$$

onde  $z_r = 2m$  (altura de referência) e  $k$  é a constante de von Karman ( $\sim 0.4$ ). Para calcular  $h$ , altura da Camada Limite Planetária estável, foi utilizada a seguinte relação (Zilitinkevich, 1972):

$$h = 0.4 \sqrt{\frac{u_* L}{f_c}} \quad (4.17)$$

onde  $f_c = 0.0001s^{-1}$  é o parâmetro de Coriolis. Todos os dados avaliados (veja Tabela 4.3) foram usados para criar um arquivo de entrada para as simulações do modelo LAMBDA. Os valores de  $\sigma_i^2$  e  $\tau_{Li}$  foram calculados de acordo a parametrização derivada por Degrazia et al. (2000) (equações (4.1) e (4.2), respectivamente).

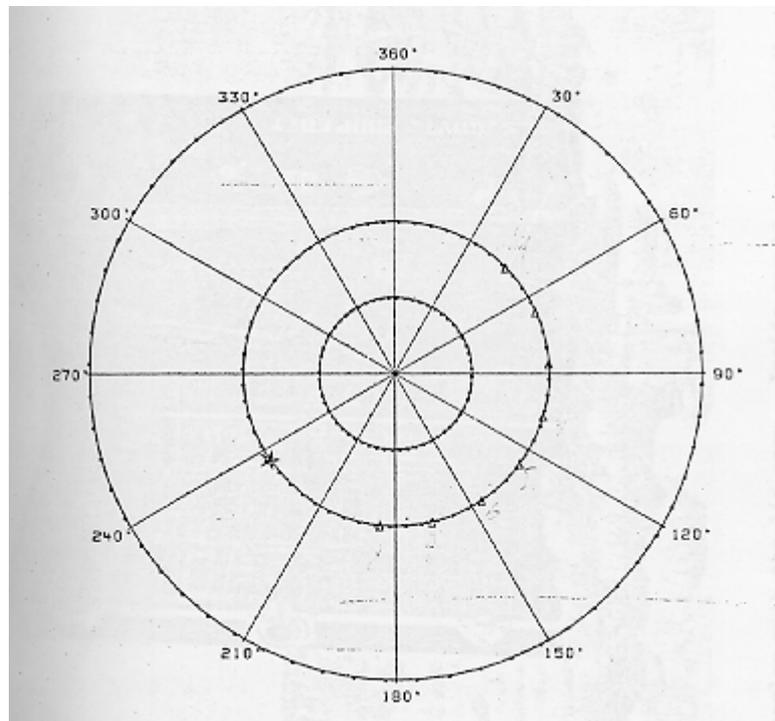
No LAMBDA, o domínio horizontal foi determinado de acordo com a distância dos amostradores e o domínio vertical foi considerado igual à altura da camada limite estável,  $h$ . A fonte foi localizada no centro do domínio. O passo no tempo foi mantido constante ( $\Delta t = 0.5s$ ). Cem partículas foram liberadas em cada passo no tempo, a partir da fonte, durante 1500 passos no tempo. O volume que representa a fonte pontual foi de  $0.1m \times 0.1m \times 0.1m$ .

As concentrações observadas,  $\chi_m (m^{-2})$ , foram dadas em Sagendorf e Dickson (1974) como concentrações normalizadas, isto é

$$\chi_m = C_m \frac{U_4}{Q}, \quad (4.18)$$

onde  $C_m$  é a concentração expressa em  $\text{gm}^{-3}$ ,  $U_4$  é a velocidade do vento médio em 4m e  $Q$  é a taxa de emissão ( $\text{gs}^{-1}$ ). Consequentemente, as concentrações simuladas para o experimento de INEL foram expressas em ( $\text{m}^{-2}$ ). No caso do experimento de INEL o volume para o cálculo da concentração foi de  $10\text{m} \times 10\text{m} \times 3\text{m}$ .

No experimento de INEL duas séries de simulações foram consideradas usando o modelo LAMBDA: primeiro foi utilizado as equações de Langevin implementadas para as componentes longitudinais, para a condição de vento fraco, as quais serão apresentadas na próxima seção e segundo as equações de Langevin para a velocidade total considerando homogeneidade horizontal e condições de vento forte. As duas séries de simulações foram consideradas, neste trabalho, a fim de demonstrar que esta pequena velocidade do vento faz com que modelos de dispersão tradicionais tornem-se altamente imprecisos na simulação do campo de concentração de contaminantes na CLP.



**Figura 4.2** – Área do experimento de INEL. Os amostradores são representados por ( . ), as torres ( $\Delta$ ) e as torres meteorológicas a 61m por ( $\star$ ) sobre a grade de localização. (extraído de Sagendorf e Dickson, 1974).

**Tabela 4.3** - Parâmetros meteorológicos medidos durante o experimento de INEL.

Exp	$u_*$ (m/s)	$L$ (m)	$h$ (m)	$U(2m)$	$U(4m)$	$U(8m)$	$U(16m)$	$U(32m)$	$U(61m)$	$Q(g/s)$
4	0.047	2.40	13.40	0.7	1.2	999	1.5	0.9	2.1	0.032
6	0.079	6.87	29.39	1.2	1.3	1.2	1.6	1.7	1.8	0.031
7	0.040	1.77	10.64	0.6	0.9	1.2	0.5	0.9	2.4	0.033
8	0.033	1.22	8.09	0.5	0.8	0.6	1.2	1.6	2.7	0.033
9	0.033	1.22	8.09	0.5	0.8	0.9	1.6	2.2	2.7	0.032
10	0.073	5.93	26.40	1.1	1.7	2.1	3.2	4.7	3.1	0.032
11	0.093	9.60	37.91	1.4	1.9	2.3	2.9	999	3.6	0.031
12	0.047	2.40	13.40	0.7	1.1	1.1	1.6	1.6	1.9	0.032
13	0.067	4.90	22.88	1.0	1.6	2.0	3.0	4.0	6.0	0.033
14	0.067	4.90	22.88	1.0	1.5	2.0	3.5	5.1	7.1	0.032

#### 4.4.1 Implementação no modelo LAMBDA

Considerando que o experimento de INEL é conduzido sobre condições estáveis com velocidade do vento fraco em um terreno plano e que os dados de velocidade do vento foram registrados em uma única posição, ou seja, desconsiderando o gradiente horizontal da equação (3.32), temos (Anfossi et al., 2006):

$$du = \left\{ -p(u - \bar{u}) - q(v - \bar{v}) \right\} dt + \sqrt{2pdt} \sigma_u \xi_u \quad (4.19a)$$

e

$$dv = \left\{ q(u - \bar{u}) - p(v - \bar{v}) \right\} dt + \sqrt{2pdt} \sigma_v \xi_v \quad (4.19b)$$

Estas equações foram implementadas no modelo estocástico Lagrangeano LAMBDA. Em particular, a componente vertical da velocidade  $w$  foi calculada como usual no LAMBDA (seções 3.2.2 e 3.3). Nesta dissertação usa-se a FDP Gram-Chalier truncada na terceira ordem para a direção vertical devido ao fato de que mesmo em condições estáveis

podem existir movimentos verticais assimétricos em relação à velocidade vertical das partículas (Ferrero e Anfossi, 1998b).

Os principais parâmetros de entrada para descrever os efeitos de meandro do vento nas equações (4.19) são os parâmetros  $p$  e  $q$ . Em modelos de dispersão atmosférica, uma parametrização adequada da turbulência é essencial. A confiabilidade de cada modelo depende fortemente do modo como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados à CLP (Mangia et al., 2002). Portanto, para calcular  $p$  e  $q$  (apresentadas na seção 3.3) é necessário conhecer os parâmetros  $m$  e  $T$ . Os valores para os parâmetros  $m$  e  $T$  são calculados pela formulação empírica sugerida por Oettl e Anfossi (2005 apud Carvalho e Vilhena, 2005), os quais somente foram testados por Carvalho e Vilhena (2005) que propuseram resolver a equação de Langevin, de uma maneira semi-analítica, pelo método iterativo de Picard:

$$m = \frac{8.5}{(1+U)^2}, \quad (4.20)$$

$$T = \frac{mT_*}{2\pi(m^2 + 1)}, \quad (4.21)$$

e

$$T_* = 200m + 500 \quad (4.22)$$

onde  $U$  é a velocidade média do vento calculada a partir da média dos dados de velocidade do vento medidos para diferentes alturas,  $T_*$  é o período de meandro.

#### 4.5 Resultados obtidos

Os seguintes parâmetros estatísticos são determinados para descrever o desempenho dos modelos de partículas Lagrangeanos (Hanna, 1989):

- Erro quadrático médio normalizado,

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{C_o C_p}, \quad (4.23)$$

onde  $C$  é a concentração e os subscritos “o” e “p” representam os valores observados e previstos, respectivamente.

A indicação  $NMSE(0 < NMSE < 1)$  representa a média das diferenças entre as concentrações observadas e previstas elevada ao quadrado. Quanto mais próximo de zero menor é o erro;

- erro fracional,

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0.5(\overline{C_o} + \overline{C_p})}. \quad (4.24)$$

A indicação  $FB(-2 \leq FB \leq 2)$  revela se as concentrações médias previstas superestimam as concentrações médias observadas. Quando  $FB$  tende a zero,  $\overline{C_p}$  tende a  $\overline{C_o}$ ;

- desvio padrão fracional,

$$FS = 2 \frac{\sigma_o - \sigma_p}{\sigma_o + \sigma_p}, \quad (4.25)$$

onde  $\sigma$  é o desvio padrão. A indicação  $FS(-2 \leq FS \leq 2)$  mostra se a dispersão simulada em torno da concentração média é superestimada ou subestimada. Em outras palavras, se  $\sigma_p > \sigma_o$  o poluente simulado está mais disperso que o observado e vice-versa. Entretanto, esse parâmetro deve ser analisado com restrições, pois podem existir casos onde  $\overline{C_p} \neq \overline{C_o}$  e  $\sigma_p = \sigma_o$ ;

- coeficiente de correlação,

$$COR = \frac{(\overline{C_o} - \overline{C_o})(\overline{C_p} - \overline{C_p})}{\sigma_o \sigma_p}. \quad (4.26)$$

Mede  $COR(-1 \leq R \leq 1)$  a qualidade do ajuste à verdadeira reta, mediante a qual são relacionadas às concentrações  $C_o$  e  $C_p$ , ou ainda, o grau de relação linear existente entre elas. Quanto maior a qualidade do ajuste linear, mais próximo de +1 ou -1 estará o valor de  $R$ . Não havendo uma relação linear entre  $C_o$  e  $C_p$ , tem-se  $COR = 0$ . Se  $C_p = C_o$ , isto significa que as concentrações previstas estão perfeitamente relacionadas às concentrações observadas. Este parâmetro também deve ser analisado com cuidado. Nesse caso, podem ocorrer que  $C_o \neq C_p$  e  $R = \pm 1$ ;

- fator de dois,

$$FA2 = 0.5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2. \quad (4.27)$$

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

Quanto mais próximo de zero forem os valores de NMSE, FB e FS e mais próximos de um forem os valores de COR e FA2, melhores são os resultados.

A seguir, são apresentados os resultados obtidos para os experimentos de Copenhagen, Prairie Grass e INEL.

#### 4.5.1 Copenhagen

O desempenho do modelo LAMBDA é apresentado nas Tabelas 4.4 e 4.5 e nas Figuras 4.3 e 4.4. A Tabela 4.4 mostra a comparação entre os valores simulados,  $C^{Sim}$ , e observados,  $C^{Obs}$ , de concentração integrada perpendicularmente à direção do vento ao nível do solo ( $C_y$ ). A Figura 4.3 apresenta o espalhamento dos dados de concentração simulados e observados, enquanto na Figura 4.4 é apresentada uma comparação entre os gráficos de isolinhas de concentração ao nível do solo para três diferentes números de experimento com diferentes valores de estabilidade. A Figura 4.3 demonstra que para concentrações abaixo de  $1100\mu\text{g}/\text{m}^3$  o modelo superestima os dados reais e para concentrações maiores de  $1100\mu\text{g}/\text{m}^3$  o modelo subestima estes dados. Como 65% dos dados de concentração medidos pelo modelo foram abaixo dos dados de concentração reais, conclui-se que o modelo subestimou os valores de concentração, demonstrado também pelo valor positivo do erro fracional entre os dados,  $FB=0.09$ .

A Figura 4.4 apresenta uma análise para o comprimento de Obukhov  $L$ . Sabendo que todos os valores de  $L$  para o experimento de Copenhagen são negativos espera-se que haja instabilidade na CLP durante o experimento. Considerando somente os experimentos 1, 2 e 7, apresentados na Figura 4.4, nota-se a presença de instabilidade, que é comprovada pela abertura lateral da pluma de contaminante. No entanto, as isolinhas obtidas a partir do experimento 1 (Figura 4.4a) apresenta uma abertura lateral bem maior da pluma de contaminantes que os experimentos 2 (Figura 4.4b) e 7 (Figura 4.4c). Do mesmo modo, nota-se que o experimento 7 apresenta uma abertura lateral da pluma maior que o experimento 2.

Isso é justificado pelo fato do experimento 1 apresentar uma maior instabilidade, ou seja,  $L = -37$ , enquanto nos experimentos 2 e 7  $L = -292$  e  $L = -104$ , respectivamente, o que mostra ser uma condição mais neutra, apresentando assim uma pluma mais estreita, mas ainda com a presença de vento forte. Igualmente, para os experimentos 2 e 7, dos quais o valor de  $L$  é bem maior, em módulo, para o experimento 2, demonstra que este é mais neutro que o experimento 7, portanto apresenta uma abertura lateral da pluma de contaminante mais estreita, como mostra a figura.

A Tabela 4.5 mostra os resultados da análise estatística feita com os valores de  $C_y$ , apresentados na Tabela 4.4, segundo os índices estatísticos de Hanna (1989). Além disso, na Tabela 4.5 é apresentada uma comparação entre os índices estatísticos obtidos pelo modelo simulado, por Carvalho et al. (2002) e por Ferrero et al. (1995). Na simulação do experimento de Copenhagen foi considerado o mesmo modelo utilizado por Carvalho et al. (2002) e também o mesmo esquema de parametrização da turbulência.

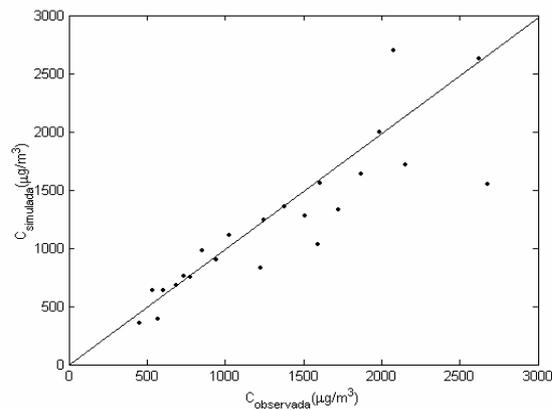
Os resultados da Tabela 4.5 e Figura 4.3 mostram excelente concordância entre os valores observados e os valores simulados pelo modelo LAMBDA. De acordo com a Tabela 4.5, nota-se que os valores dos índices estatísticos NMSE, FB e FS estão próximos de zero e COR e FA2 estão próximos de 1. Mais especificamente, pode-se perceber que o modelo subestimou os valores de concentração observados (FB=0.09), apresenta uma alta correlação entre os dados observados e simulados (COR=0.88) e mostra que a dispersão dos valores de concentração simulados é somente um pouco menor que a dispersão dos valores de concentração observados (FS=0.06). Considerando, ainda, a Tabela 4.5, observa-se que os índices obtidos através do modelo simulado e por Carvalho et al. (2002) mostram-se superiores aos obtidos por Ferrero et al. (1995) o que indica uma boa qualidade da parametrização da turbulência considerada nesta dissertação e por Carvalho et al. (2002). Ferrero et al. (1995) utilizaram uma versão antiga do modelo LAMBDA e a parametrização da turbulência de Hanna (1982). No entanto, o modelo simulado apresenta boa concordância com os resultados obtidos por Carvalho et al. (2002), visto que, as pequenas diferenças encontradas na comparação podem ter surgido devido alguns dados de entrada não estarem presentes no artigo. Por exemplo, a discretização vertical, o volume do domínio utilizado para o cálculo da concentração, a semente que gera os valores aleatórios provavelmente não foi a mesma, dados que podem ter influenciado nos resultados obtidos.

**Tabela 4.4** – Valores de concentração integrada ao nível do solo ( $C_y$ ) observadas e simuladas para o experimento de Copenhagen.

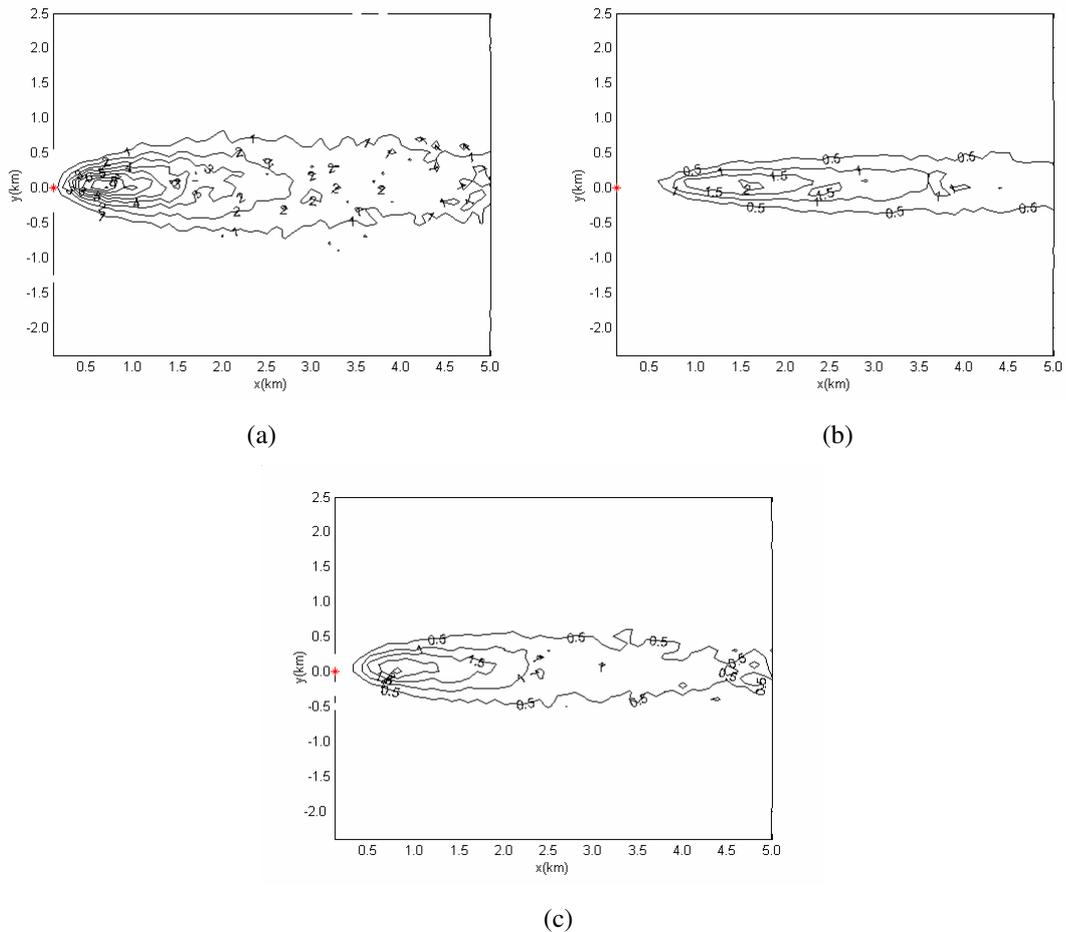
Exp	Dist. (km)	Q(g/s)	$C^{obs}(\mu\text{g}/\text{m}^3)$	$C^{sim}(\mu\text{g}/\text{m}^3)$
1	1.9	3.2	2074	2696
1	3.7	3.2	739	761
2	2.1	3.2	1722	1330
2	4.2	3.2	944	899
3	1.9	3.2	2624	2627
3	3.7	3.2	1990	1991
3	5.4	3.2	1376	1354
4	4.0	2.3	2682	1551
5	2.1	3.2	2150	1718
5	4.2	3.2	1869	1633
5	6.1	3.2	1590	1031
6	2.0	3.1	1228	825
6	4.2	3.1	688	683
6	5.9	3.1	567	390
7	2.0	2.4	1608	1554
7	4.1	2.4	780	747
7	5.3	2.4	535	636
8	1.9	3.0	1248	1241
8	3.6	3.0	606	632
8	5.3	3.0	456	355
9	2.1	3.3	1511	1140
9	4.2	3.3	1026	1111
9	6.0	3.3	855	981

**Tabela 4.5** – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de Copenhague obtidos através do modelo simulado, por Carvalho et al. (2002) e por Ferrero et al. (1995).

	<b>NMSE</b>	<b>COR</b>	<b>FA2</b>	<b>FB</b>	<b>FS</b>
<b>Modelo Simulado</b>	0.07	0.88	1.00	0.09	0.06
<b>Carvalho et al.(2002)</b>	0.08	0.82	0.96	-0.02	-0.05
<b>Ferrero et al. (1995)</b>	0.14	0.72	0.87	-0.09	0.12



**Figura 4.3** – Diagrama de espalhamento entre os valores de concentração integradas ao nível do solo ( $C_y$ ) simuladas e observadas para o conjunto de dados de Copenhague.



**Figura 4.4** – Isolinhas de concentração de  $\text{SF}_6$  ao nível do solo com os dados do modelo LAMBDA simulando o experimento de Copenhagen para os números de experimentos 1,2 e 7, respectivamente, com diferentes valores do parâmetro  $L$ : (a)  $L = -37m$ , (b)  $L = -292m$  e (c)  $L = -104m$ . O \* em vermelho representa a posição da fonte.

#### 4.5.2 Prairie Grass

O desempenho do modelo LAMBDA é apresentado nas Tabelas 4.6 e 4.7 e na Figura 4.5. A Tabela 4.6 apresenta a comparação entre os valores simulados,  $C^{\text{Sim}}$ , e observados,  $C^{\text{Obs}}$ , de concentração integrada perpendicularmente à direção do vento ao nível do solo ( $C_y$ ). A análise destes resultados sugere que o modelo foi capaz de reproduzir o comportamento geral observado no experimento de difusão. A Figura 4.5 exibe o diagrama de espalhamento dos dados de concentração simulados e observados. A Figura 4.5 mostra que para concentrações abaixo de  $0.5\text{g/m}^3$  o modelo superestima os dados reais e para concentrações

maiores de  $0.5\text{g/m}^3$  o modelo subestima estes dados. Como 73% dos sensores mediram concentrações acima de  $0.5\text{g/m}^3$  e destes apenas 18% tiveram suas concentrações superestimadas pelo modelo, então se conclui que o modelo subestimou os valores de concentração, o que é demonstrado também pela análise dos índices estatísticos ( $\text{FB}=0.11$ ).

A Tabela 4.7 mostra o resultado da análise estatística feita com os dados apresentados na Tabela 4.6 e a comparação com os índices estatísticos obtidos por Carvalho et al. (2002) somente para os experimentos com condição de estabilidade neutra (velocidade do vento maior que  $6\text{m/s}$ ). Para obter os índices apresentados por Carvalho et al. (2002), na Tabela 4.7, foram considerados os valores de concentração simulados pelos autores para o experimento de Prairie Grass e destes consideramos somente os com estabilidade neutra, ou seja, foi feito um novo cálculo dos índices estatísticos.

Analisando os índices estatísticos, apresentados na Tabela 4.7, é possível notar que o modelo simula muito bem as concentrações observadas, com valores de NMSE, FB e FS relativamente próximos de zero e valores de COR e FA2 relativamente próximos de 1. Em particular, o modelo subestima os valores de concentração observados ( $\text{FB}=0.11$ ), apresenta uma alta correlação ( $\text{COR}=0.98$ ) e mostra que a dispersão dos valores de concentração simulados é menor que a dispersão dos valores observados ( $\text{FS}=0.19$ ).

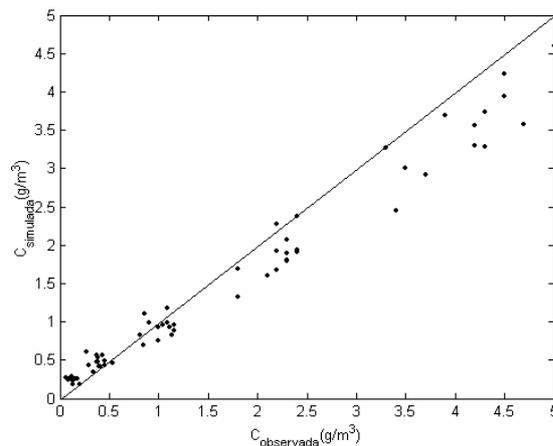
No entanto, é possível notar que os índices estatísticos obtidos a partir do modelo simulado concordam muito bem com os índices estatísticos obtidos por Carvalho et al. (2002), demonstrando que para fontes localizadas próximo à superfície pode-se considerar somente a condição de estabilidade neutra (situação em que prevalecem somente forçantes mecânicos) bem como a condição de estabilidade instável (no qual prevalecem os forçantes térmicos e mecânicos).

**Tabela 4.6** – Valores de concentração integrada ao nível do solo ( $C_y$ ) medidas durante o experimento de Prairie Grass. Concentrações observadas estão na primeira linha e concentrações simuladas na segunda linha.

Exp	Q(g/s)	50m(g/m <sup>3</sup> )	100m(g/m <sup>3</sup> )	200m(g/m <sup>3</sup> )	400m(g/m <sup>3</sup> )	800m(g/m <sup>3</sup> )
5	78	3.30	1.80	0.81	0.29	0.092
		3.27	1.69	0.82	0.43	0.24
9	92	3.70	2.20	1.00	0.41	0.13
		2.91	1.67	0.76	0.42	0.23
19	102	4.50	2.20	0.86	0.27	0.058
		4.23	2.27	1.10	0.60	0.27
20	102	3.40	1.80	0.85	0.34	0.13
		2.45	1.33	0.70	0.35	0.18
26	98	3.90	2.20	1.04	0.39	0.127
		3.69	1.92	0.96	0.48	0.25
27	99	4.30	2.30	1.16	0.46	0.176
		3.74	1.90	0.96	0.49	0.26
30	98	4.20	2.30	1.11	0.40	0.10
		3.30	1.79	0.93	0.42	0.25
43	99	5.00	2.40	1.09	0.37	0.12
		4.60	2.38	1.18	0.57	0.28
44	101	4.50	2.30	1.09	0.43	0.14
		3.94	2.07	0.99	0.57	0.24
49	102	4.30	2.40	1.16	0.45	0.15
		3.28	1.94	0.88	0.43	0.25
50	103	4.20	2.30	0.91	0.39	0.11
		3.56	1.81	0.99	0.53	0.25
51	102	4.70	2.40	1.00	0.38	0.084
		3.58	1.91	0.93	0.47	0.24
61	102	3.50	2.10	1.14	0.53	0.20
		3.01	1.60	0.83	0.46	0.19

**Tabela 4.7** – Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de Prairie Grass obtidos através do modelo simulado e por Carvalho et al. (2002) somente para os experimentos com condição de estabilidade neutra (velocidade do vento maior que 6m/s).

	NMSE	COR	FA2	FB	FS
<b>Modelo Simulado</b>	0.06	0.98	0.89	0.11	0.19
<b>Carvalho et al. (2002)</b>	0.05	0.97	0.86	0.06	0.04



**Figura 4.5** – Diagrama de espalhamento entre os valores de concentração integradas ao nível do solo ( $C_y$ ) simuladas e observadas para o conjunto de dados de Prairie Grass.

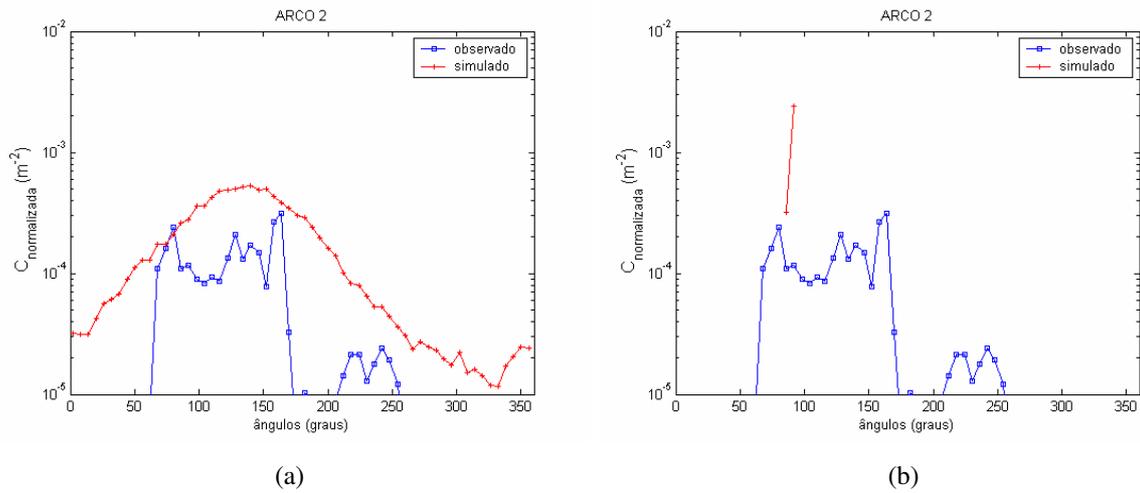
#### 4.5.3 INEL

O desempenho do modelo LAMBDA implementado e tradicional é apresentado nas Figuras 4.6 – 4.9 e na Tabela 4.8. As Figuras 4.6 – 4.9 demonstram os resultados típicos obtidos com o modelo LAMBDA. A primeira (Figura 4.6) refere-se ao experimento 8, no qual a dispersão da pluma ocorre em todas as direções, ou seja, o traçante é coletado em todos os ângulos. A comparação entre as duas opções de simulações torna evidente que o modelo implementado para velocidade do vento fraca é capaz de dispersar a pluma em todos os 360°, enquanto a simulação com o modelo LAMBDA tradicional produz uma pluma muito estreita. Além disso, enquanto a concentração máxima é aproximadamente capturada pelo novo modelo, o modelo LAMBDA tradicional não apresenta resultados significantes. Considerando a Figura 4.7, podemos novamente observar que o novo modelo reproduz melhor a concentração máxima observada, enquanto o modelo LAMBDA tradicional superestima esse valor de concentração, além de apresentar uma pluma mais estreita. Ainda, observamos o mesmo comportamento quando comparamos os resultados obtidos a partir das Figuras 4.8 e 4.9, as quais se referem aos experimentos 11 e 12, respectivamente.

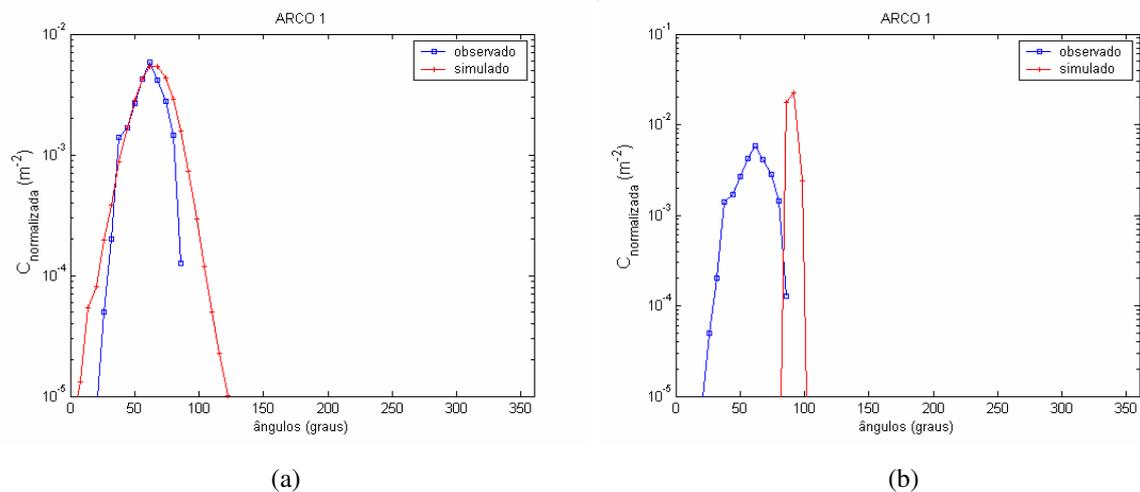
A Tabela 4.8 mostra os resultados da análise estatística de desempenho do modelo feita com os picos de concentração ( $n = 30$ ), segundo os índices estatísticos de Hanna (1989), além de apresentar a comparação entre os índices estatísticos obtidos pelo modelo simulado e outros cinco trabalhos disponíveis na literatura.

Os resultados da Tabela 4.8 e das Figuras 4.6 – 4.9 mostram boa concordância entre os valores observados e simulados pelo modelo LAMBDA implementado. De acordo com a Tabela 4.8, nota-se que os valores dos índices estatísticos NMSE, FB e FS estão próximos de zero e COR e FA2 estão próximos de 1. Mais especificamente, pode-se perceber que o modelo superestimou levemente os valores de concentração (FB = -0.04), apresenta uma alta correlação entre os dados observados e simulados (COR=0.89) e mostra que a dispersão dos valores de concentração simulados é somente um pouco maior que a dispersão dos valores de concentração observados (FS = -0.053). Considerando, ainda, a Tabela 4.8 verifica-se que os resultados obtidos a partir do modelo LAMBDA tradicional não são satisfatórios, demonstrando, então, que os modelos de dispersão tradicionais não levam em conta o efeito de meandro do vento. Logo, para utilizá-los em problemas de dispersão de poluentes, em situações de vento fraco, devem ser realizadas implementações que levem em conta este tipo de fenômeno.

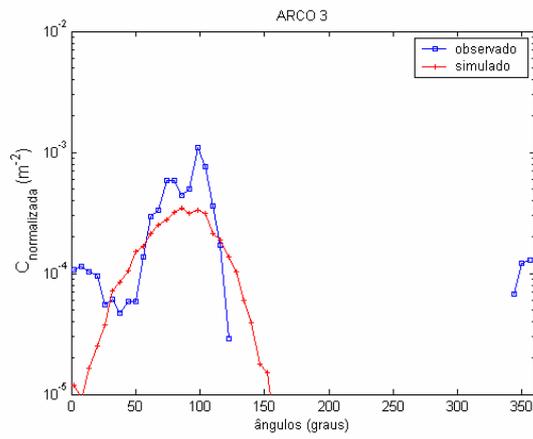
Além disso, comparando os índices estatísticos obtidos pelo modelo LAMBDA implementado com os obtidos por outros modelos percebe-se uma leve melhora em alguns casos. Porém, o modelo de Oettl et al. (2001), o modelo de Carvalho e Vilhena (2005) e o modelo apresentado nesta dissertação têm a vantagem de poder ser aplicados a todos tipos de fontes e condições de campos de vento não-homogêneos, em contraste aos modelos de Sagendorf e Dickson (1974), Sharan e Yadav (1998) e Moreira et al. (2005), os quais utilizaram modelos de pluma Gaussiana.



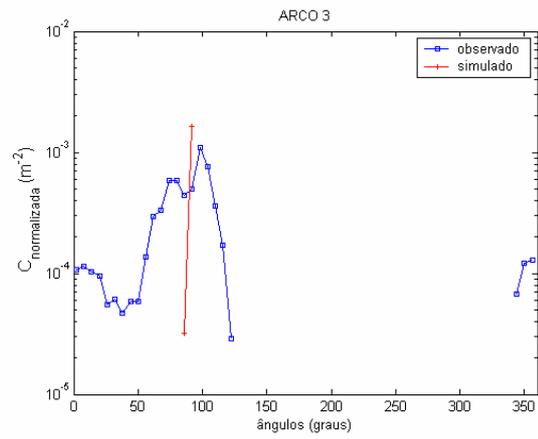
**Figura 4.6** – Concentração ao nível do solo normalizada ( $\text{m}^{-2}$ ) em função dos ângulos para o experimento 8 a 200m. As figuras plotadas referem-se ao (a) modelo LAMBDA implementado e (b) modelo LAMBDA tradicional. A linha em azul ( $\square$ ) indica concentração observada e a linha vermelha ( $\times$ ) indica concentração simulada.



**Figura 4.7** – Como Figura 4.6 mas para o experimento 4 a 100m.

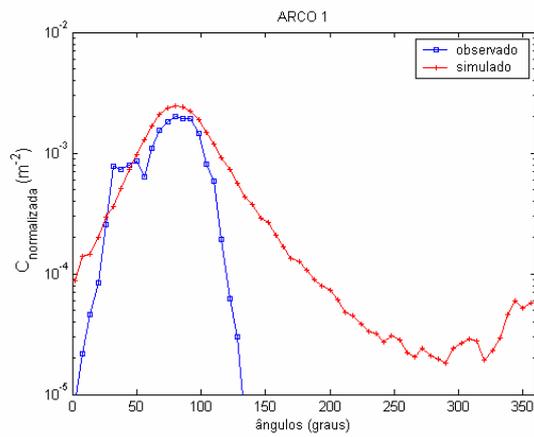


(a)

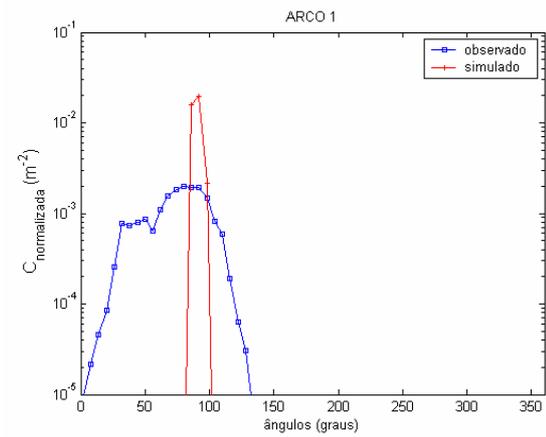


(b)

**Figura 4.8** – Como Figura 4.6 mas para o experimento 11 a 400m.



(a)



(b)

**Figura 4.9** – Como Figura 4.6 mas para o experimento 12 a 100m.

**Tabela 4.8** - Índices estatísticos de desempenho do modelo LAMBDA para o experimento de INEL obtidos a partir do modelo simulado e por outros cinco trabalhos presentes na literatura.

	NMSE	COR	FA2	FB	FS
<b>LAMBDA implementado</b>	0.17	0.89	0.77	-0.04	-0.053
<b>LAMBDA tradicional</b>	7.38	0.41	0.067	-1.40	-1.44
<b>Sagendorf e Dickson (1974)</b>	0.60	0.42	0.80	0.06	–
<b>Sharan e Yadav (1998)</b>	0.53	0.55	0.60	-0.02	–
<b>Moreira et al. (2005)</b>	0.25	0.79	0.79	0.02	0.08
<b>Carvalho e Vilhena (2005)</b>	0.11	0.93	0.83	0.02	-0.18
<b>Oetl et al. (2001)</b>	0.21	0.86	0.87	-0.13	–

A fim de compararmos os nossos resultados obtidos com os obtidos por Anfossi et al. (2006), sendo que utilizamos o mesmo conjunto de equações de Langevin para as componentes longitudinais utilizadas por estes autores, e para ilustrar as diferenças entre as duas opções de simulações propostas aqui, os seguintes índices estatísticos foram calculados para cada arco dos dez experimentos: concmax, top5,  $C_y$  e  $S_y$ . Concmax ( $m^{-2}$ ) é a concentração máxima ao nível do solo, top5 ( $m^{-2}$ ) refere-se à média dos cinco valores mais altos de concentração experimental e simulada ao nível do solo,  $C_y = \Delta y \sum_{i=1}^N \chi_i$  ( $m^{-1}$ ) é a concentração ao nível do solo integrada perpendicular a direção do vento e  $S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\vartheta_i - \bar{\vartheta})^2}{\sum_{i=1}^N \chi_i}}$ , onde  $\vartheta_i$  são os ângulos dos amostradores e  $\bar{\vartheta}$  o valor médio destes.

As Figuras 4.10 – 4.13 demonstram a comparação destes índices estatísticos para as duas séries de simulações do experimento de INEL com o modelo LAMBDA. A Figura 4.10 mostra a comparação entre os valores simulados e observados de concmax. A diferença no desempenho dos modelos é claramente visível. Enquanto no caso das simulações realizadas com o modelo LAMBDA implementado os valores de concentração alinham-se aproximadamente à linha central de perfeita concordância, mesmo com algumas dispersões, no caso do modelo LAMBDA tradicional a maior parte dos dados são superestimados. Os mesmos comentários feitos sobre as Figuras 4.6 à 4.9 são apropriados aqui também, ou seja, simulações do modelo LAMBDA tradicional não levam em conta o fenômeno de meandro do

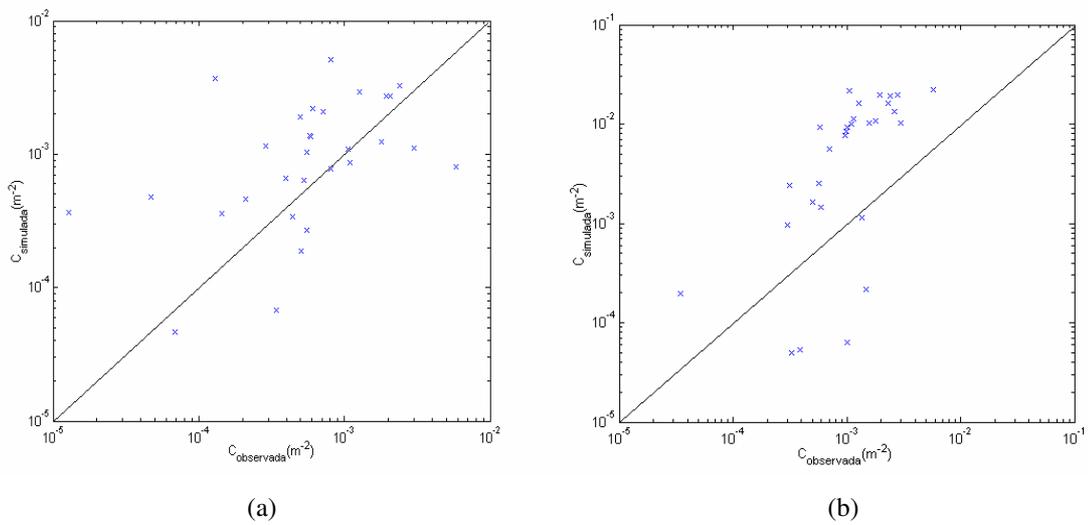
vento e os seus efeitos sobre a dispersão em condições de vento fraco, o que conduz a resultados não representativos da pluma de dispersão.

A Figura 4.11 apresenta a comparação entre os valores de concentração simulados e observados para top5. As mesmas considerações feitas para a figura anterior também se aplicam neste caso. Novamente, a distribuição da concentração ao nível do solo simulada superestima os valores de concentração observados para o caso simulado com o modelo LAMBDA tradicional.

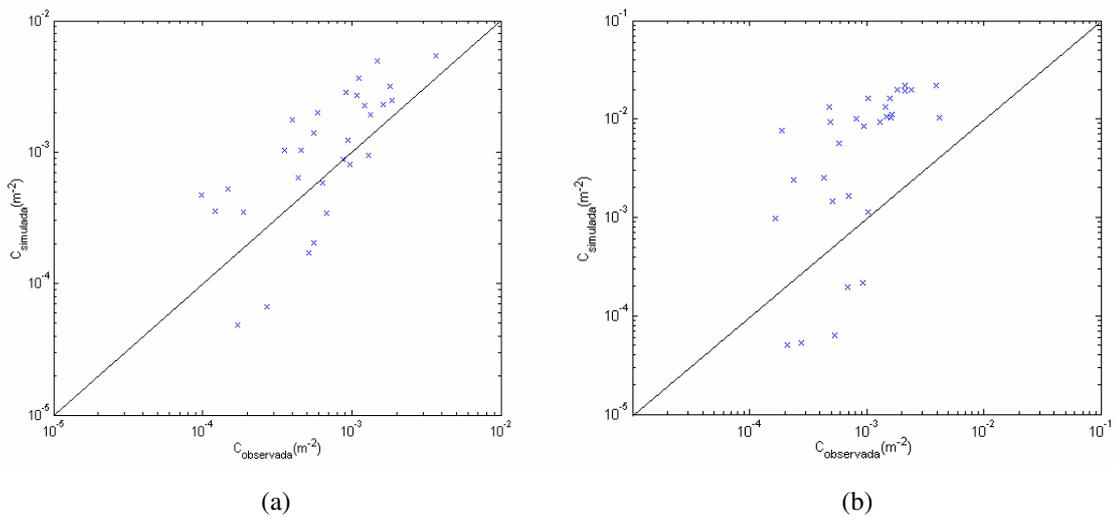
A Figura 4.12 mostra a comparação entre valores simulados e observados de  $C_y$ . Neste caso, não existe diferenças significativas entre as duas simulações, visto que ambos os valores de concentração alinham-se aproximadamente a linha central, a qual representa a concordância entre os dados de concentração simulados e observados. Este fato se deve à  $C_y$  ser a soma de todos os valores da concentração em  $y$  para cada arco. Assim esse valor não leva em conta a abertura lateral da pluma e em termos da “massa” nos dois modelos ela provavelmente é a mesma.

A Figura 4.13 mostra a comparação entre os valores simulados e observados para  $S_y$ . Neste caso, novamente, o efeito da simulação com o modelo LAMBDA implementado torna-se claramente visível. O desvio padrão angular da concentração simulada pelo modelo LAMBDA tradicional é superestimada, enquanto o novo modelo simula aproximadamente bem estes dados.

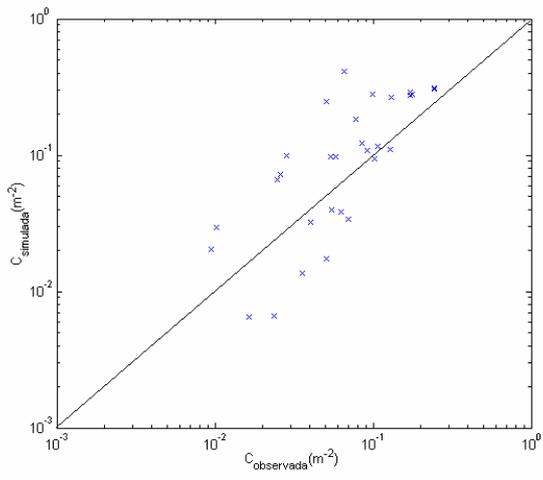
Portanto, comparando o novo conjunto de índices estatísticos calculados percebe-se novamente que o modelo LAMBDA tradicional não apresenta precisão nas simulações envolvendo o fenômeno de meandro do vento. No entanto, o modelo LAMBDA implementado apresenta boa concordância tanto com os valores de concentrações observadas quanto com o modelo de Anfossi et al. (2006). A diferença entre o modelo LAMBDA implementado, utilizado nesta dissertação, e o modelo de Anfossi et al. (2006) encontra-se na parametrização de  $p$  e  $q$ , os quais estão contidos na função de autocorrelação Euleriana citada na seção 3.3 e nas equações de Langevin para as componentes longitudinais. Anfossi et al. (2006) calcularam os valores de  $p$  e  $q$  fitando a equação para a função de autocorrelação Euleriana obtida a partir de dados experimentais, sendo que os diferentes pares de  $p$  e  $q$  foram estimados para cada experimento e para cada altura da torre (2, 4, 8, 16, 32 e 61m). Neste trabalho foram utilizados os valores dos parâmetros  $m$  e  $T$  para calcular os valores de  $p$  e  $q$  segundo a formulação sugerida por Oettl e Anfossi (2005 apud Carvalho e Vilhena, 2005), a qual gera valores de  $p$  e  $q$  constantes com a altura.



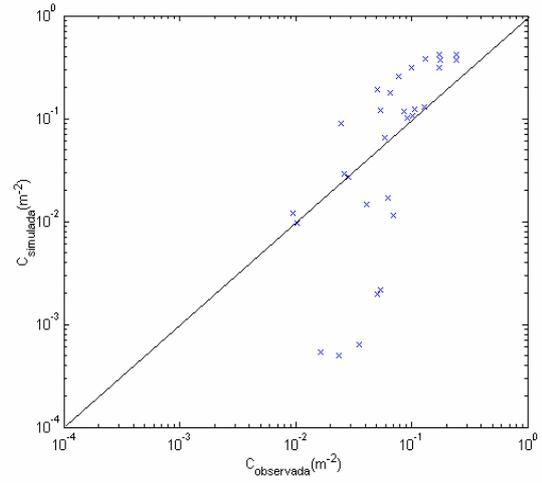
**Figura 4.10** – Concentração máxima calculada com o (a) modelo LAMBDA implementado para vento fraco e (b) modelo LAMBDA tradicional. O eixo x mostra os valores observados e o eixo y os valores simulados.



**Figura 4.11** – Como Figura 4.10 mas para top5.

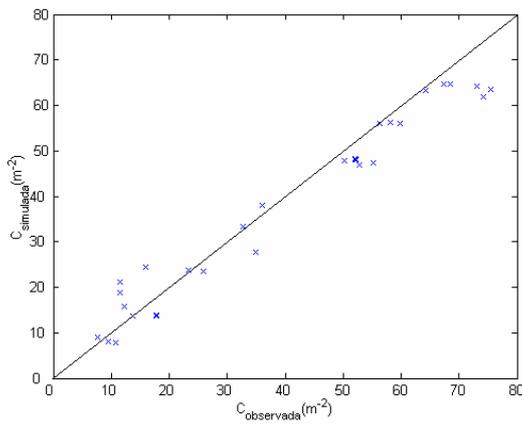


(a)

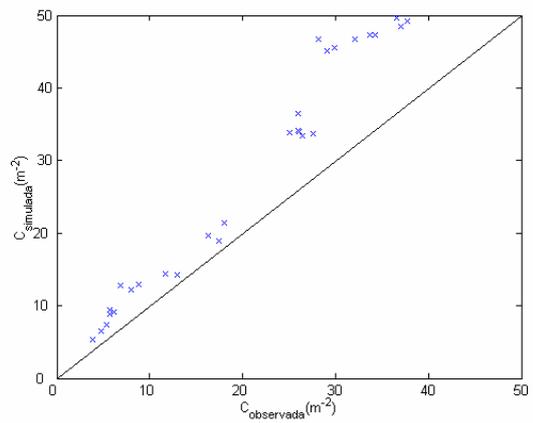


(b)

Figura 4.12 – Como Figura 4.10 mas para  $C_y$ .



(a)



(b)

Figura 4.13 – Como Figura 4.10 mas para  $S_y$ .

## Capítulo 5

### CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentado um estudo da dispersão de poluentes passivos, liberados de forma contínua, utilizando um modelo de partículas estocástico Lagrangeano com o objetivo de estimar a concentração de contaminantes nas diferentes condições de estabilidade da CLP. Para tanto, foram utilizados três diferentes tipos de experimentos, primeiro o experimento de Copenhagen, simulado sob condições fortemente convectivas, segundo o experimento de Prairie Grass, do qual foram considerados somente os casos neutros, ou seja, magnitude da velocidade do vento superior a 6m/s e, por último, o experimento de INEL realizado sob condições estáveis e velocidade do vento fraco.

O modelo de partículas estocástico Lagrangeano utilizado foi o LAMBDA, o qual é baseado na forma tridimensional da equação de Langevin para a velocidade aleatória e a implementação deste modelo permite levar em conta situações complexas do escoamento tais como velocidade do vento fraco e variações espaciais e temporais dos campos meteorológicos. Este modelo ainda pode simular fontes de diferentes formas e dimensões, como contínuas, variáveis no tempo e fontes instantâneas.

A fim de comparar os valores de concentração, integrados ao nível do solo, simulados e observados obtidos durante as simulações dos experimentos de Copenhagen e Prairie Grass alguns índices estatísticos foram considerados. A análise da comparação dos resultados com os dados experimentais e a da aplicação dos índices estatísticos demonstra que o modelo de partículas estocástico Lagrangeano LAMBDA produz um bom ajuste da medida dos valores de concentração integrados ao nível do solo perpendicularmente a direção do vento médio. Além disso, os resultados mostram que o modelo descreve a dispersão de poluentes para os experimentos de Copenhagen e Prairie Grass para condições convectivas e neutras, respectivamente, de forma satisfatória.

O experimento de INEL realizado sob condições estáveis com velocidade do vento fraco também foi simulado usando o modelo de partículas estocástico Lagrangeano LAMBDA. Valores de concentrações foram registrados ao nível do solo. Duas séries de simulações foram realizadas com o modelo LAMBDA para terreno plano no caso do

experimento de INEL: na primeira série a rotina foi modificada passando-se a considerar a contribuição do efeito de meandro do vento na dispersão, enquanto na segunda série foi considerada a rotina original do modelo aplicada a condições de turbulência bem desenvolvida.

A nova versão do LAMBDA leva em conta um sistema de duas equações de Langevin acopladas para as componentes horizontais do vento que considera os efeitos de meandro do vento. Tais equações foram propostas por Anfossi et al. (2005b) e, recentemente, testadas por Anfossi et al. (2006) obtendo resultados satisfatórios. Além disso, foi sugerida uma nova parametrização para os parâmetros  $p$  e  $q$  para o cálculo das duas equações de Langevin como um valor constante e dependente apenas da velocidade média do vento para cada experimento. As simulações foram repetidas utilizando o modelo LAMBDA tradicional com o objetivo de verificar a melhora na precisão obtida com o novo sistema de equações para as componentes longitudinais. Estas somente diferem nas componentes horizontais da equação de Langevin, todas as outras especificações e dados de entrada seguem os mesmos. Em outras palavras, procuramos comparar os resultados obtidos pelo novo método com aqueles obtidos de acordo com a versão tradicional do modelo de partículas Lagrangeano LAMBDA.

Particularmente, os resultados obtidos com o novo sistema de equações concordam muito bem com os dados experimentais, indicando que o modelo representa o processo de dispersão corretamente em condições de velocidade do vento fraco. Assim, demonstrando que esse novo conjunto de equações para as componentes horizontais pode ser incorporado a um sistema de modelos para estimar a qualidade do ar.

A principal conclusão deste trabalho foi verificar a qualidade da nova parametrização dos parâmetros  $p$  e  $q$  quando aplicados ao sistema de equações de Langevin proposto para as componentes horizontais, ou seja, demonstrar que valores de  $p$  e  $q$  constantes podem gerar resultados satisfatórios na simulação da dispersão de contaminantes. Anfossi et al. (2006) calcularam os valores de  $p$  e  $q$  fitando a equação para a função de autocorrelação Euleriana obtida a partir de dados experimentais, estimando diferentes pares de  $p$  e  $q$  para cada experimento e para cada altura da torre (2, 4, 8, 16, 32 e 61m).

Portanto, a vantagem deste modelo é que este pode ser aplicado a todos os tipos de turbulência presentes na CLP, ou seja, em casos de turbulência bem desenvolvida e em casos de turbulência associada ao efeito de meandro do vento (turbulência fraca), pois considerando  $m = 0$  (quando o efeito de meandro é eliminado) o conjunto de equações (4.19) reproduz a

expressão clássica obtida na seção 3.2.1, normalmente utilizada na modelagem da dispersão de vento forte.

## 5.1 Trabalhos futuros

Nesta dissertação utilizaram-se modelos simplificados de dispersão de poluentes (homogeneidade horizontal, terreno plano), ou seja, quando na presença de topografia suficientemente plana modelos matemáticos simples podem ser empregados e a precisão de seus resultados é satisfatória. O modelo de partículas Lagrangeano LAMBDA é um exemplo. O modelo LAMBDA é utilizado na determinação da trajetória de partículas sobre terreno plano e é aplicável em situações de atmosfera estacionária, situações essas pouco comuns na realidade, por isso, é considerado um modelo limitado.

No caso de regiões com topografia complexa (colinas, montanhas ou vales) esses modelos matemáticos simples já não produzem resultados satisfatórios, pois informações meteorológicas variando no tempo, necessárias para os modelos de dispersão, aplicáveis aos casos da realidade não são levadas em consideração. Portanto, a sugestão para futuras pesquisas é a utilização de modelos que abrangem uma escala maior, em que os parâmetros atmosféricos variem tanto temporal quanto espacialmente e o campo de vento seja obtido a partir de um modelo meteorológico de mesoescala, como, por exemplo, BRAMS (*Brazilian Regional Atmospheric Modeling System*).

A modelagem da dispersão atmosférica é uma ferramenta valiosa na previsão dos níveis de concentração de poluentes, tornando-se indispensável para determinar possíveis danos provocados por novas fontes, ou mesmo, por fontes existentes a serem modificadas. Neste âmbito, cientes da crescente importância atribuída nos últimos anos aos problemas relacionados ao meio ambiente em nível mundial, bem como da necessidade de se desenvolver, no Brasil, estudos mais profundos com relação à previsão da dispersão de poluentes na atmosfera, sugere-se o estudo de modelos que levem em conta a topografia da região e a não-homogeneidade das variáveis que determinam a difusão. Considerando, interessante, ainda, a incorporação de uma parametrização capaz de descrever os processos de difusão reforçados pelo efeito de meandro do vento, visto que a maioria dos modelos físicos não leva em conta este tipo de fenômeno frequentemente presente na CLP.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANFOSSI, D.; BRUSASCA, G.; TINARELLI, G. Simulation of atmospheric diffusion in low wind speed meandering conditions by a Monte Carlo dispersion model. **Il Nuovo Cimento**, v.13C, p.995-1006, 1990.

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

ANFOSSI, D. et al. An analysis of sonic anemometer observations in low wind speed conditions. **Boundary-Layer Meteorology**, v.114, p.179-203, 2005a.

ANFOSSI, D. et al. Well mixed condition verification in windy and low wind speed conditions. **Proceedings of Harmo 10**, Create, 17-20 October 2005b.

ARYA, S. P. Air Pollution Meteorology and Dispersion. New York: Oxford, 1999. 310p.

ARYA, S. P. Modeling and parameterization of near-source diffusion in weak winds. **Journal of Applied Meteorology**, v. 34, p.1112-1121, 1995.

BAERENTSEN, J.H.; BERKOWICZ, R. Monte Carlo simulation of plume dispersion in the convective boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.18, p.701-712, 1984.

BALDOCHI, D. A Lagrangian random walk model for simulating water vapor, CO<sub>2</sub> sensible heat densities and scalar profiles over and within a soybean canopy. **Boundary-Layer Meteorology**, v.61, p.113-144, 1992.

BARAD, M.L. **Project Prairie Grass: A Field program in diffusion.** – Geophys. Res. Paper N° 59 (II) TR-58-235 (II), Air Force Cambridge Research Centre, USA. 1958.

BATCHELOR, G.K. Diffusion in a field of homogeneous turbulence, I. Eulerian analysis. **Australian Journal of Science Research**, v.2, p.437-450, 1949.

BERKOWICZ, R.R.; OLESEN, H.R.; TORP, U. The Danish Gaussian air pollution model (OML): description, test and sensitivity analysis in view of regulatory applications. **Air Pollution Modeling and Its Application**, C. De Wispelare, F.A. Schiermeier and N.V. Gillani Eds., Plenum Publishing Corporation, p. 453-480, 1986.

BRUSASCA, G.; TINARELLI, G.; ANFOSSI, D. Particle model simulation of diffusion in low wind speed stable conditions. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.707-723, 1992.

BRUSASCA, G.; TINARELLI, G.; ANFOSSI, D. Comparison between the results of a Monte Carlo atmospheric diffusion model e tracer experiments. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1263-1280, 1989.

CARVALHO, J.C. **Estudo dos processos de transporte e difusão na Camada Limite Planetária utilizando os modelos RAMS e SPRAY: Aplicação ao caso do experimento TRACT**. 1999. Tese (Doutorado em Meteorologia) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 1999.

CARVALHO, J.C. et al. Parameterization of meandering phenomenon in a stable atmospheric boundary layer. **Physica A**, v.368, p.247-256, 2006.

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.; NICHIMURA, E.R.; VILHENA, M.T.; MOREIRA, D.M.; DEGRAZIA, G.A. An iterative Langevin solution for contaminant dispersion simulation using the Gram-Chalier PDF. **Environmental Modelling & Software**, v.20, p.285-289, 2005.

CARVALHO, J.C.; VILHENA, M.T. Pollutant dispersion simulation for low wind speed condition by the ILS method. **Atmospheric Environment**, v. 39, p. 6282-6288, 2005.

CAUGHEY, S.J. Observed characteristics of the atmospheric boundary layer. In: Nieuwstadt, F.T.M., van Dop, H. (Eds.), **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling**. Reidel, Dordrecht, p.107-158, 1982.

CAUGHEY, S.J.; PALMER, S.G. Some aspects of turbulence structure through the depth of the convective boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.105, p.811-827, 1979.

CIRILLO, M.C.; POLI, A.A. An intercomparison of semiempirical diffusion models under low wind speed, stable conditions. **Atmospheric Environment**, v.26A, p.765-774, 1992.

CSANADY, G.T. Turbulent diffusion in the Environment. **Reidel Dordrecht**, Holland, 1973, 248p.

CUVILIER, C. (Editor) **Workshop on intercomparison of advanced practical short-range atmospheric dispersion models**, Manosque, 1994, Joint Research Centre (European Commission, Institute for Safety Technology), EUR 15603 EN.

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.W. Three-dimensional numerical study of the height and mean structure of a heated planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.7, p.81-106, 1974.

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

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

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

DEGRAZIA, G.A. et al. A Lagrangian decorrelation time scale in the convective boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 86, p. 525-534, 1998.

DEGRAZIA, G.A.; MORAES, O.L.L. A model for eddy diffusivity in a stable boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.58, p. 205-214, 1992.

DELAGE, Y. A numerical study of the nocturnal atmospheric boundary layer. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.100, p.351-364, 1974.

FERRERO, E.; ANFOSSI, D. Sensitivity analysis of Lagrangian stochastic models for CBL with different FDPs and turbulence parameterizations. In: **Air Pollution Modelling and its Applications XII**, GRYNING, S.E.; N. CHAUMERLIAC (Eds.), Plenum Press, New York, p. 673-368, 1998a.

FERRERO, E.; ANFOSSI, D. Comparison of FDPs, closure schemes and turbulence parameterizations in Lagrangian stochastic models. **International Journal of Environment and Pollution**, v.9, p. 384-410, 1998b.

FERRERO, E.; ANFOSSI, D. Sensitivity analysis of Lagrangian stochastic models for CBL with different PDF's and turbulence parameterizations. In: S.E. Gryning and N. Chaumerliac (Eds.). **Air Pollution Modelling and its Applications XI**, Plenum Press, New York, v.22, in press, 1997.

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**, v. 33, p. 2337-2345, 1999.

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

GARDINER, C.W. Handbook of stochastic methods for Physics, chemistry and the natural sciences. **Springer-Verlag**, Berlin, 1985.

GARRATT, J. R. **The atmospheric Boundary Layer**. Cambridge: Cambridge Atmospheric and Space Science Series – University Press, 316p, 1992.

GRYNING, S.E.; LYCK, E. The Copenhagen tracer experiments: Reporting of measurements. RISØ National Laboratory, ISBN 87-550-2395-9. 54p (only available in an electronic version at: <http://www.risoe.dk/rispubl/VEA/ris-r-1054.html>), 1998.

GRYNING, S.E.; LYCK, E. Atmospheric dispersion from elevated sources in an urban area: Comparison between tracer experiments and model calculations. **Journal of Climate and Applied Meteorology**, v. 23, p. 651-654, 1984.

HANNA, S.R. Confidence limits for air quality model evaluations, as estimated by Bootstrap and Jackknife Resampling Methods. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1385–1398, 1989.

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

HANNA, S.R. Lagrangian and Eulerian time-scale relations in the daytime boundary layer. **Journal of Applied Meteorology**, v.20, p.242-249, 1981.

HANNA, S.R. A method of estimating vertical eddy transport in the planetary boundary layer using characteristics of the vertical velocity spectrum. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.25, p.1026-1033, 1968.

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

HØJSTRUP, J. Velocity spectra in the unstable boundary layer. **Journal of Atmospheric Science**, v.39, p.2239-2248, 1982.

KAIMAL, J.C. et al. Turbulence structure in the convective boundary layer. **Journal of Atmospheric Science**, v.33, p.2152-2169, 1976.

KENDALL, M.; STUART, A. **The advanced theory of statistics**. MacMillan, New York, 1977.

KRISTENSEN, L.; JENSEN, N.O.; PETERSON, E.L. Lateral dispersion of pollutants in a very stable atmosphere. **Atmospheric Environment**, v.15, p.837-844, 1981.

LAMB, R.G. Diffusion in the convective boundary layer. In: **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling**. Edited Nieuwstadt, F.T.M. and van Dop, H. Reidel: Dordrecht, p.159-229, 1984.

LAMB, R. G. Numerical simulation of dispersion from an elevated point source in the convective Planetary Boundary Layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1297-1304, 1978.

LUAHR, A.K.; BRITTER, R.E. A random walk model for dispersion in inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1911-1924, 1989.

MANGIA, C. et al. Evaluation of a new eddy diffusivity parameterization from turbulent Eulerian spectra in different stability conditions. **Atmospheric Environment**, v.36, p.67-76, 2002.

MORAES, M.R. **Implementação de uma ferramenta para a previsão de ventos e dispersão de poluentes na micro-escala atmosférica**. 2004. 142f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2004.

MOREIRA, D.M.; TIRABASSI, T. Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental. **Ambiente & Sociedade**, v. VII, p. 159-173, 2004.

MOREIRA, D.M.; TIRABASSI, T.; CARVALHO, J.C. Plume dispersion simulation in low wind conditions in stable and convective boundary layers. **Atmospheric Environment**, v. 39, p. 3643-3650, 2005.

MURGATROYD, R.J. Estimations from geostrophic trajectories of horizontal diffusivity in the mid-latitude troposphere and lower stratosphere. **Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society**, v.95, p.40-62, 1969.

NIEUWSTADT, F.T.M. The turbulent structure of the stable, Nocturnal Boundary Layer. **Journal of the Atmospheric Sciences**, v.41, p.2202-2216, 1984.

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

OETTL, D.; ALMBAUER, R.A.; STURM, P.J. A new method to estimate diffusion in stable, low-wind conditions. **Journal of Applied Meteorology**, v. 40, p. 259-268, 2001.

OETTL, D. et al. A new hypothesis on meandering atmospheric flows in low wind speed conditions. **Atmospheric Environment**, v.39, p.1739-1748, 2005.

OLESEN, H.R.; LARSEN, S.E.; HØJSTRUP, J. Modelling velocity spectra in the lower part of the planetary boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.29, p.285-312, 1984.

PEREIRA, M.M.R. Modelos Lagrangeanos de partículas aplicados à dispersão de poluentes na atmosfera. **XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica**. Proceedings of COBEM 2001, Fluid Mechanics, v.8, p. 149-158.

PEREIRA, M.M.R. **Estudo do transporte local de poluentes em Iperó por meio de um modelo Lagrangeano de partículas**. 2004. Tese (Doutorado em Ciências) – Universidade De São Paulo, São Paulo, 2004.

RODEAN, H.C. **Stochastic Lagrangian Models of Turbulence Diffusion**. Boston: American Meteorological Society, 84p., 1996.

RODEAN, H.C. Notes on the Langevin model for turbulent diffusion of “marked” particles. **Techn. Report UCRL-ID-115869, Lawrence Livermore National Laboratory**, 122p., 1994.

ROTACH, M.W.; GRYNING, S.E.; TASSONE, C. A two-dimensional Lagrangian stochastic dispersion model for daytime conditions. **Quarterly Journal of Royal Meteorology Society**, v.122, p.367-389, 1996.

SAGENDORF, J.F.; DICKSON, C.R. Diffusion under low wind speed, inversion conditions. **NOAA Technical Memorandum ERL ARL-52**, 89p., 1974.

SHARAN, M.; GOPALAKRISHNAN, S.G. Mathematical modeling of diffusion and transport of pollutants in the Atmospheric Boundary Layer. **Pure and Applied Geophysics**, v.160, p.357-394, 2003.

SHARAN, M.; SINGH, M.P.; YADAV, A.K. Mathematical model for atmospheric dispersion in low winds with eddy diffusivities as linear functions of downwind distance. **Atmospheric Environment**, v.30, p.1137-1145, 1996a.

SHARAN, M.; YADAV, K. Simulation of diffusion experiments under light wind, stable conditions by a variable k-theory model. **Atmospheric Environment**, v. 32, p. 3481-3492, 1998.

SHARAN, M.; YADAV, A.K.; SING, M.P. Comparison of sigma schemes for estimation of air pollutant dispersion in low winds. **Atmospheric Environment**, v.29, p.2051-2059, 1995.

SHARAN, M. et al. A mathematical model for the dispersion of air pollutants in low wind conditions. **Atmospheric Environment**, v. 30, p. 1209-1220, 1996b.

SINGH, M.P. et al. Tracer **experiments – a report**. Tech. Report, CAS, IIT Delhi, 1991.

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

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

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

TAYLOR, G.I. Diffusion by continuous movements. **Proceedings of the London Mathematical Society** Series 2, p.196-212, 1921.

TENNEKES, H. Similarity relations, scaling laws and spectral dynamics. In: Nieuwstadt, F.T.M., van Dop, H. (Eds.), **Atmospheric Turbulence and Air Pollution Modelling**. Reidel, Dordrecht, p.37-68, 1982.

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

THOMAS, P. et al. Experimental determination of the atmospheric dispersion parameters at the Karlsruhe Nuclear Research Center for 160 m and 195 m emission heights. Part 1: measured data. **KfK Report 3456**, 1983.

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

van DOP, H. **Some topics in turbulent diffusion**. In: Diffusion and transport of pollutants in the atmospheric flow fields. U.K.: Albert Gyr and Franz-S. Rys, Kluwer, Dordrecht, 1995. 216p.

WEIL, J.C. A diagnosis of the asymmetry in top-down and bottom-up diffusion using a Lagrangian stochastic model. **Journal Atmospheric Science**, v.47, p.501-515, 1990.

WILLIS, G.E.; DEARDORFF, J.A. A laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convective mixed boundary-layer. **Atmospheric Environment**, v.15, p.109-117, 1981.

WILLIS, G.E.; DEARDORFF, J.A. A laboratory study of dispersion from an elevated source within a modeled convective boundary-layer. **Atmospheric Environment**, v.12, p.1305-1311, 1978.

WILLIS, G.E.; DEARDORFF, J.A. A laboratory model of diffusion into the convective planetary boundary-layer. **Quarterly Journal of Royal Meteorology Society**, v.102, p.427-445, 1976.

WILSON, D.K. A three-dimensional correlation/spectral model for turbulent velocities in a convective boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v. 85, p. 35-52, 1997.

WILSON, J.D.; SAWFORD, B.L. Review of Lagrangian stochastic models for trajectories in the turbulent atmosphere. **Boundary-Layer Meteorology**, v.78, p.191-210, 1996.

WYNGAARD, J.C.; COTE, O.R.; RAO, K.S. Modelling of the atmospheric boundary layer. **Advances in Geophysics**, v.18A. Academic Press, New York, p.193-212, 1974.

ZANNETTI, P. **Air Pollution Modeling. Teories, Computational Methods and Available Software**. Nova York: Kluwer Academic Publisher, 444p., 1990.

ZANNETTI, P. New Monte Carlo scheme for simulating Lagrangian particle diffusion with wind shear effects. **Applied Mathematical Modelling**, v.8, p.188-192, 1984.

ZILITINKEVICH, S.S. On the determination of the height of the Ekman boundary layer. **Boundary-Layer Meteorology**, v.3, p.141-145, 1972.